

Quantum Espresso GPU

<https://gitlab.com/QEF/q-e-gpu/-/wikis/home>

Dostupne verzije su:

Verzija	Modul	Preveden s	Multi GPU
v.6.5Max	quantum-espresso-gpu/v.6.5Max	pgi/19.10, cuda/10-1, mkl	NE
v.6.7	quantum-espresso-gpu/6.7	nvhpc/21.5, cuda/11-3, mkl	DA
7.1	quantum-espresso/7.1	nvhpc/21.5, cuda/11-3, MKL	DA



Važno

Quantum Espresso GPU verzija v.6.5Max podržava samo jedan GPU. Za multi GPU koristiti v.6.7.

U GPU verziji programa dolazi do povećane potrošnje VRAM memorije i može izbaciti grešku "0: ALLOCATE: 709704720 bytes requested; status = 2(out of memory)" više na <https://gitlab.com/QEF/q-e/-/issues/280>

Primjer korištenja v.6.5Max:

```
#$ -cwd
#$ -pe gpu 1

module load quantum-espresso-gpu/v.6.5Max

export OMP_NUM_THREADS=1
cuda-wrapper.sh pw.x ...
```

Primjer korištenja v.6.7:

```
#$ -cwd
#$ -pe gpusingle 3

module load quantum-espresso-gpu/6.7

export OMP_NUM_THREADS=1
openmpi-wrapper.sh pw.x < poslani_podaci.txt
```