

Q6

Korištenje

Na klasteru su instalirani svi pomoćni moduli programskog paketa Q6 u serijskoj i paralelnoj izvedbi - Qcalc6 Qdum6 Qdyn6 Qfep6 Qpi6 Qprep6 Qpi6p Qdyn6p.

Dostupne verzije su:

Verzija	Modul
6.0.16	Q6/6.0.16

q6-parallel

```
#$ -N q6-parallel
#$ -pe *mpi 14
#$ -q p28.q
#$ -cwd

# load program environment
module load Q6/6.0.16

# run the program
mpirun -np $NSLOTS Qdyn6p eq1.inp > eq1.log
```

Instalacija

Programski paket Q6 je pripremljen s kompajlerom Intel 2019 i MPI implementacijom OpenMPI 3.0.0. Instalacija je obavljena dopremanjem izvornog koda, učitavanjem potrebnih modula za kompajler i MPI te kompajliranjem samog paketa.

Dopremanje izvornog koda i kompajliranje

```
git clone https://www.github.com/qusers/Q6.git
cd Q6/src/

module load mpi/openmpi3-intel-x86_64

make all COMP=ifort
make mpi COMP=ifort
```