

cp2k

Sadržaj

- [Dostupne verzije](#)
- [Primjeri korištenja](#)
 - [Verzija 7.0](#)
 - [Verzija 8.2.0 & 9.1.0](#)
- [Performanse](#)
 - [Ovisnost o broju jezgri](#)
 - [Ovisnost o količini dostupne memorije](#)

Dostupne verzije

verzija	modul	redovi	preveden s
7.0	cp2k/7.0-openmpi-x86_64	p28*	gcc v4.8.5
8.2.0	cp2k/8.2.0	p28*, a16*	gcc v9.3.1
9.1.0	cp2k/9.1.0	p28*, a16*	



Detaljnije informacije

Detaljnije verzije o pojedinoj konfiguraciji mogu se dobiti pozivanjem naredbe **cp2k.psmf --version** nakon aktivacije modula

Primjeri korištenja

Verzija 7.0

Primjer skripte

```
#$ -N cp2k_test
#$ -cwd
#$ -pe p28-mpi 2
module load cp2k/7.0-openmpi-x86_64
mpirun -n $NSLOTS cp2k.popt -i Si_bulk8.inp -o Si_bulk8.out
```

Pri čemu su *Si_bulk8.inp* ulazni podaci, dok je *Si_bulk8.out* izlazna datoteka u koju se upisuje izlaz. Važno je znati da prilikom ponovnog pokretanja s istom navedenom izlaznom datotekom, novi izlaz se dopisuje u postojeću datoteku. Varijabla `$NSLOTS` odnosi se na broj jezgri koje program koristi, a njena vrijednost je jednaka traženom broju jezgara.

Detaljnije upute o korištenju programa cp2k nalaze se na njihovim [mrežnim stranicama](#).

Verzija 8.2.0 & 9.1.0

Ispod je opisan primjer podnošenja posla za jedan od [službenih cp2k predložaka \(H20-64\)](#)

Opisana skripta će:

- Podnijeti posao pod imenom *H20-64-benchmark* i izvršiti ga u istom direktoriju
- Izabrati paralelnu okolinu *a16-mpi* s 4 jezgre
- Za svaki proces (4) zatražiti maksimalno 3 GB memorije (sveukupno 12 GB)
- Postaviti varijable okoline:

- `OMP_NUM_THREADS = 1` (jednodretveno izvršavanje po jezgri)
 - `OMPI_MCA_btl_openib_allow_ib = 1` (Infiniband)
 - `OMPI_MCA_orte_base_help_aggregate=0` (onemogućavanje združivanja poruka o pogreškama)
- Potjerati izvršnu datoteku `cp2k.psm`:
 - koristeći zatraženi broj jezgara pomoću `$NSLOTS`
 - koristeći ulaznu datoteku [H2O-64.inp](#)
 - koristeći `H2O-64.out` datoteku za izlaz

H2O-64-benchmark.sge

```
#$ -N H2O-64-benchmark
#$ -cwd
#$ -pe a16-mpi 4
#$ -l memory=3

# set environment
module load cp2k/8.2.0
export OMP_NUM_THREADS=1
export OMPI_MCA_btl_openib_allow_ib=1
export OMPI_MCA_orte_base_help_aggregate=0

# run H2O-64 benchmark
mpirun -np $NSLOTS cp2k.psm -i H2O-64.inp -o H2O-64.out
```

Performanse

Za testiranje brzine izvođenja programa, koriste se predlošci sa cp2k stranice:

- [H2O-64](#)
- [Fayalite-FIST](#)
- [LiH-HFX](#)
- [H2O-DFT-LS](#)
- [H2O-64-RI-MP2](#)

Testiranje se radilo ovisno o:

1. broju zatraženih jezgri
2. ograničavanju količine memorije koju cp2k koristi

U slučaju promjene broja jezgara, testiranje se odvijalo u konfiguracijama:

- **predložak:** svi
- **verzija:** 8.2.0
- **redovi:** *a16*, *p28*
- **paralelne okoline:** **mpi*, **mpisingle*
- **broj jezgara:** 1 - 256

U slučaju ograničavanja količine memorije, testiranje se odvijalo u konfiguracijama:

- **predložak:** LiH-HFX
- **verzija:** 8.2.0
- **redovi:** p28-mpi
- **broj jezgara:** 64
- **MAX_MEMORY (ulazni podatak):** 1000 - 8000 MiB ([detaljnije upute na službenoj stranici](#))



Broj jezgri i vrijeme izvršavanja

U *p28* redu, pri manjem broju jezgara (2 - 16) poslovi se prekidaju radi prekoračenja vremenskog ograničenja (7 dana) u nekim od predložaka (npr. [H2O-64-RI-MP2](#))



Ograničavanje memorije

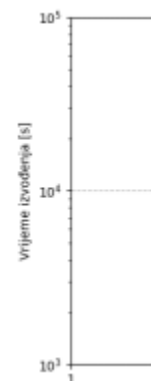
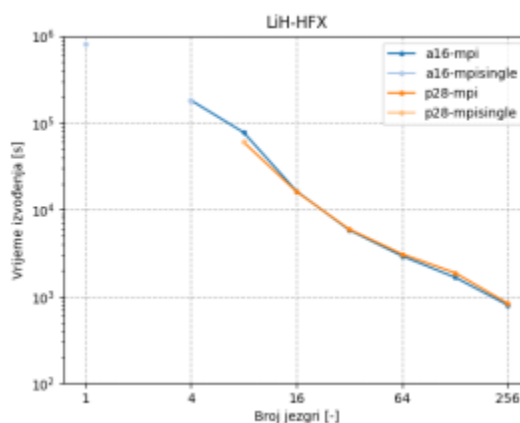
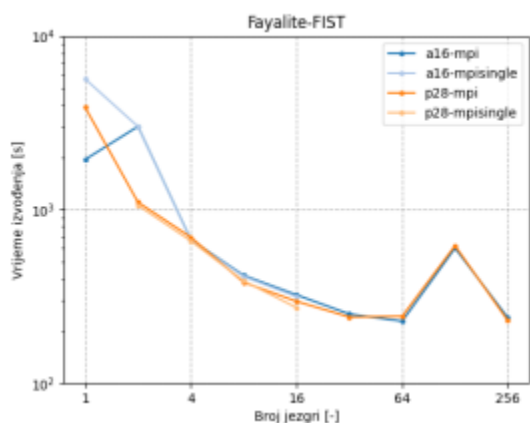
Nužno je ograničiti količinu memorije koju cp2k koristi, jer u protivnom može doći do:

- prekoračenja dostupne memorije, koja uzrokuje prijevremeno zaustavljanje programa
- usporavanja aplikacija ostalih korisnika na istom čvoru

Načini na koji se to može ostvariti:

- definicijom traženog resursa u zaglavlju SGE skripte (pomoću parametra `#$ -l memory=<količina GB po procesu>`)
- definicijom odgovarajućeg parametra u ulaznoj datoteci (npr. `MAX_MEMORY` u predlošcima `H20-64-RI-MP2` i `LiH-HFX`)

Ovisnost o broju jezgri



Ovisnost o količini dostupne memorije

