**Пакеты прикладных программ**

**Quantum ESPRESSO**

Quantum ESPRESSO – это интегрированный набор машинных кодов для энергетических расчетов многоэлектронных систем. Программа основана на теории функциональной плотности, плоских волн и псевдопотенциалов. Свободное программное обеспечение, доступное для всех пользователей кластера.

**Версии**

Установленные на кластере версии пакета приводятся в таблице.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Версия | Используемая библиотека | Поддержка GPU | Название модуля | Сайт проекта |
| 5.4 | IBM ESSL | - | espresso/cpu/5.4 | <http://www.quantum-espresso.org/> |
| 5.4 | IBM ESSL | +\* | espresso/gpu/5.4 | <https://github.com/fspiga/qe-gpu-plugin> |
| 5.4 | IBM ESSL (SMPCUDA) | ++ | espresso/gpu/5.4-esslcuda | <http://www.quantum-espresso.org/> |
| 6.0 | IBM ESSL | +++ | espresso/gpu/6.0 | https://github.com/RSE-Cambridge/qe-gpu |

\* – число символов “+” соотносится с производительностью пакета (больше – лучше)

Все версии пакета собраны с поддержкой MPI и могут работать в параллельном режиме. Версия Quantum ESPRESSO 6.0 является экспериментальной и может не поддерживать некоторые функции и настройки (например, в этой версии нельзя выставить значение nk большее 1; подробности смотрите на сайте проекта).

**Запуск Quantum ESPRESSO**

Перед началом работы с пакетом необходимо загрузить соответствующий модуль командой “module add”. Это позволит получить доступ к нужной версии исполняемых файлов пакета и выставить необходимые переменные среды. Также может потребоваться загрузить дополнительные модули, от которых зависит работоспособность соответствующей версии Quantum ESPRESSO. Все эти действия выполняются в скриптах описания заданий.

Ниже приводятся примеры скриптов описания заданий, используемых для запуска Quantum ESPRESSO в параллельном режиме на узлах кластера (два вычислительных узла; используются 2 процессора и 2 сопроцессора на каждом).

Версия Quantum Espresso – espresso/cpu/5.4.

#!/bin/sh

#PBS -N qe\_job\_name

#PBS -q workq

#PBS -j oe

#PBS -l select=2:ncpus=160:mpiprocs=20

# Загружаем необходимые модули

module add spectrum\_mpi essl espresso/cpu/5.4

# Переходим в рабочую директорию

cd /home/user/qe\_working\_dir

# Запускаем исполняемый файл Quantum ESPRESSO “pw.x”

mpirun -np 40 -npernode 20 --hostfile $PBS\_NODEFILE --bind-to core $QE\_HOME/bin/pw.x < ausurf.in

exit 0

Версия Quantum ESPRESSO – “espresso/gpu/5.4”.

#!/bin/sh

#PBS -N qe\_job\_name

#PBS -q workq

#PBS -j oe

#PBS -l select=2:ncpus=160:ngpus=2:mpiprocs=20

# Загружаем необходимые модули

module add spectrum\_mpi essl espresso/gpu/5.4

# Переходим в рабочую директорию

cd /home/user/qe\_working\_dir

# Запускаем исполняемый файл Quantum ESPRESSO “pw-gpu.x”

mpirun -np 40 -npernode 20 --hostfile $PBS\_NODEFILE --bind-to core $QE\_HOME/bin/pw-gpu.x < ausurf.in

exit 0

Версия Quantum ESPRESSO – espresso/gpu/5.4-esslcuda.

#!/bin/sh

#PBS -N qe\_job\_name

#PBS -q workq

#PBS -j oe

#PBS -l select=2:ncpus=160:ngpus=2:mpiprocs=20

# Загружаем необходимые модули

module add spectrum\_mpi essl espresso/gpu/5.4-esslcuda

# Переходим в рабочую директорию

cd /home/user/qe\_working\_dir

# Запускаем исполняемый файл Quantum ESPRESSO “pw.x”

mpirun -np 40 -npernode 20 --hostfile $PBS\_NODEFILE --bind-to core $QE\_HOME/bin/pw.x < ausurf.in

exit 0

Версия Quantum ESPRESSO – espresso/gpu/6.0.

#!/bin/sh

#PBS -N qe\_job\_name

#PBS -q workq

#PBS -j oe

#PBS -l select=2:ncpus=160:ngpus=2:mpiprocs=2

# Загружаем необходимые модули

module rm spectrum\_mpi

module add pgi/17.4 openmpi/pgi/1.10.2/2017 essl espresso/gpu/6.0

# Переходим в рабочую директорию

cd /home/user/qe\_working\_dir

# Запускаем исполняемый файл Quantum ESPRESSO “pw.x”

mpirun -np 4 --hostfile $PBS\_NODEFILE --map-by ppr:1:socket $QE\_HOME/bin/pw.x < ausurf.in

exit 0

Стандартный вывод и вывод ошибок перенаправляется в файл вида qe\_job\_name.o1079, где “1079” соответствует номеру задания.