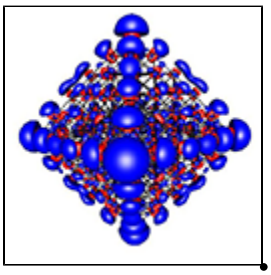
TurboMole



TurboMole ist ein Programmpaket für *ab-inito*-Elektronenstrukturrechnungen. Aktuell auf unserem HPC System ist zur Zeit die Version `7.3.1`.

- Offizielle Webseite: http://www.turbomole.com
- Manual: http://www.turbomole-gmbh.com/manuals/version_6_5/Documentation_html

> TurboMole ist unter Umständen nicht ganz so intuitiv bedienbar, wie bestimmte amerikanische Alternativen. Da das HPC-Team aber einen quantenchemischen Hintergrund hat und selber TurboMole einsetzt, stehen wir gerne mit Rat und Tat zur Seite.

TurboMole kommt in drei Versionen daher:

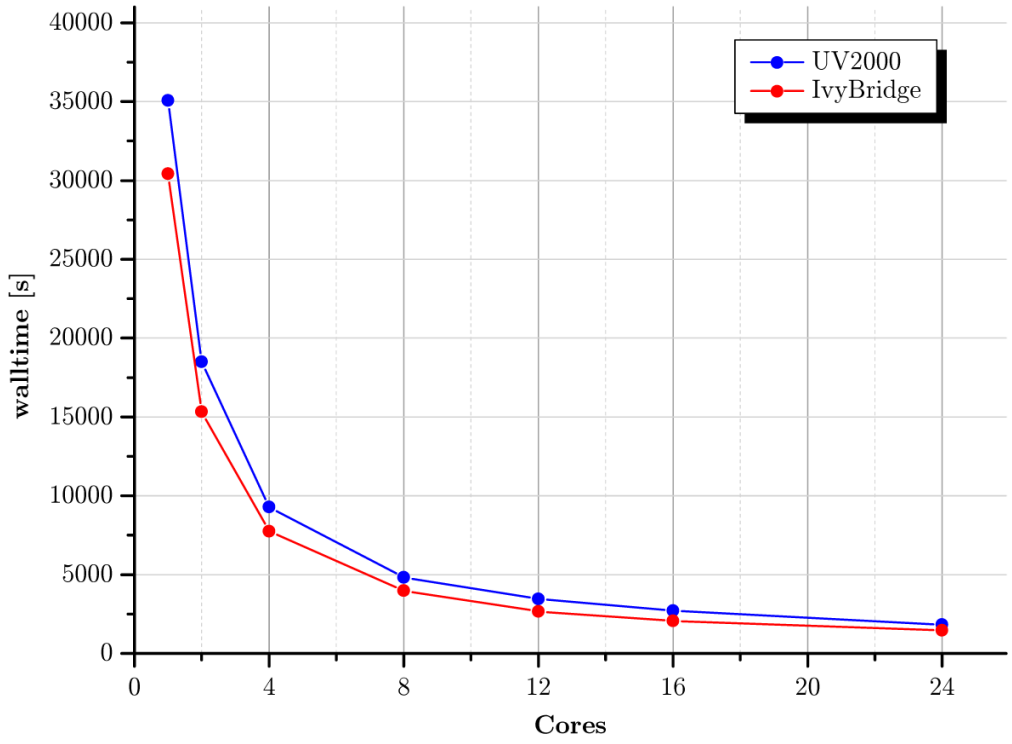
- *Sequential*: Keine Parallelisierung, es wird immer nur 1 Core genutzt.
- *Shared Memory* / *OpenMP*: Parallelisierung über mehrere Cores, die einen gemeinsamen Speicherbereich verwenden. Dafür müssen alle diese Cores auf dem selben Rechenknoten liegen
- *MPI*: Parallelisierung über mehrere Rechenknoten via MPI

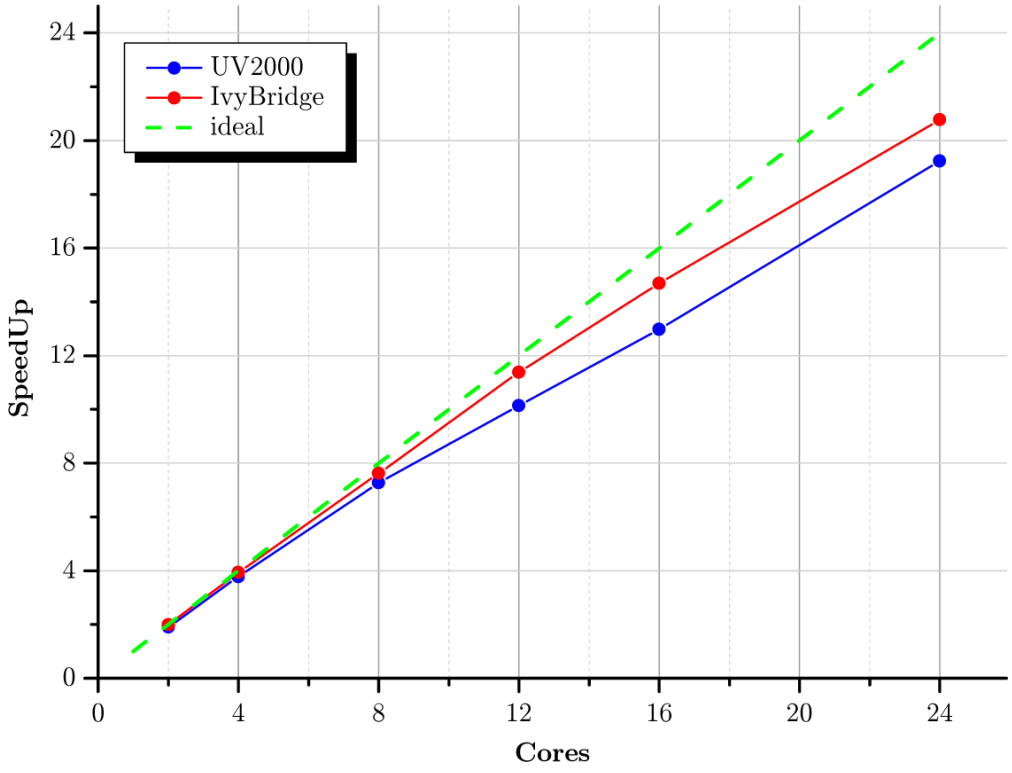
Das entsprechende Environment Module „TurboMole/6.5“ erkennt automatisch, in Abhängigkeit von den im Jobskript angeforderten Ressourcen, welche Version genutzt werden kann und setzt die Pfade entsprechend:

- Wenn nur ein Core angefordert wurde, wird die sequentielle Version genutzt
- Bei mehr als einem Core, wird die OpenMP-Version genutzt
- Existiert „mpiprocs=“ im angeforderten Chunk, wird die MPI-Version genutzt

Shared Memory / OMP

Im Gegensatz zu Gaussian skaliert die OpenMP-Variante von TurboMole exzellent mit der Anzahl der verwendeten Cores. Im Folgenden sind die reine Laufzeit (*Walltime*) und die erreichte Beschleunigung (*SpeedUp*) einer DFT-Rechnung (mit dscf_omp) mit steigender Anzahl an Cores für die SGI UV2000 (Sandybridge, 2,4 GHz) und für die Bull Blades (Ivybridge, 2,7 GHz) dargestellt. Die leicht bessere Performance der Ivybridge-basierten Rechenknoten ist allein der höheren Taktrate geschuldet. Dafür stehen auf der UV2000 mit 8 TByte RAM und bis zu 256 Cores gleichzeitig erheblich mehr Ressourcen für *S hared-Memory*-Rechnungen zur Verfügung.





***Rechnung**: Guanin-Cytosin (29 Kerne) in der* Watson-Creek-*Geometrie, DFT, B3LYP, aug-cc-pVTZ an allen Kernen (1104 Atomorbitale, 356 Elektronen).*

Job Script Template (Shared Memory / OMP)

tm.job

```
#!/bin/bash

#PBS -l select=1:ncpus=###CORES###:mem=32gb
#PBS -l walltime=999:00:00
#PBS -r n
#PBS -N ###JOB NAME###
#PBS -A ###myJAM PROJECT###

export LOGFILE=$PBS_O_WORKDIR/$PBS_JOBNAME"."$PBS_JOBID".log"

#make unique scratch directory on GPFS filesystem
SCRATCHDIR=/gpfs/scratch/$USER/$PBS_JOBID
mkdir -p "$SCRATCHDIR"

cd $PBS_O_WORKDIR

echo "$PBS_JOBID ($PBS_JOBNAME) @ `hostname` at `date` in "$RUNDIR" START" > $LOGFILE
echo "`date +"%d.%m.%Y-%T"`" >> $LOGFILE

#load TurboMole Environment and set scratch directory
module load TurboMole/7.3.1
export TURBOTMPDIR=$SCRATCHDIR

#copy input files to scratch directory
cp -r $PBS_O_WORKDIR/* $SCRATCHDIR/.
cd $SCRATCHDIR
rm $PBS_JOBNAME"."$PBS_JOBID".log"

#some output for debugging
CPUSET=/dev/cpuset/PBSPro/$PBS_JOBID
CPUSET_CPUS=`cat $CPUSET/cpus`
CPUSET_MEMS=`cat $CPUSET/mems`

echo >> $LOGFILE
echo "GLOBAL PARAMETERS" >> $LOGFILE
echo "---------------------------" >> $LOGFILE
echo "Node      : "`hostname` >> $LOGFILE
echo "RunDir    : "$PBS_O_WORKDIR >> $LOGFILE
echo "TurboBins : "$TURBOBINS >> $LOGFILE
echo "ScratchDir: "$SCRATCHDIR >> $LOGFILE
echo "# CPUs    : "$NCPUS >> $LOGFILE
echo "  \`-CPUSet: "$CPUSET_CPUS >> $LOGFILE
echo "  \`-MEMs  : "$CPUSET_MEMS >> $LOGFILE
echo "# Threads : "$OMP_NUM_THREADS >> $LOGFILE
echo "KMP_AFFINITY = "$KMP_AFFINITY >> $LOGFILE
echo >> $LOGFILE
echo "STARTING TURBOMOLE..." >> $LOGFILE
echo "---------------------------" >> $LOGFILE

#INSERT TURBOMOLE CALLS HERE, e.g.
# actual -r 2>&1 >> $LOGFILE
# dscf_omp 2>&1 >> $LOGFILE
# or whatever

# copy back results to home directory
cp -r "$SCRATCHDIR"/* $PBS_O_WORKDIR/.
cd $PBS_O_WORKDIR

#print the last known statistics of the job (memory usage, cpu time, etc...)
echo >> $LOGFILE
qstat -f $PBS_JOBID >> $LOGFILE

echo "$PBS_JOBID ($PBS_JOBNAME) @ `hostname` at `date` in "$RUNDIR" END" >> $LOGFILE
echo "`date +"%d.%m.%Y-%T"`" >> $LOGFILE
```

Zur Bedeutung und Verwendung der Environment-Variable KMP_AFFINITY siehe: Thread Affinity Interface (Intel)