

OpenMPI를 이용한 ORCA병렬계산

부제목 : 더 빠른 계산을 위해

작성일자 : 2025 01 20

작성자 : 안용상

Openmpi 다운로드

Openmpi 다운로드

OpenMPI는 고성능 컴퓨팅(High-Performance Computing, HPC)을 위해 설계된 오픈소스 라이브러리로, 병렬 프로그래밍과 다중 노드 간 통신을 지원하는 MPI(Message Passing Interface) 구현체입니다. 이를 통해 대규모 계산 작업에서 여러 CPU 코어와 클러스터 노드를 효율적으로 활용할 수 있습니다.

1) orca 압축파일에 써있는 openmpi 버전 확인

```
orca_6_0_1_linux_x86-64_shared_openmpi416.tar.xz
```

4.1.6 인것을 알 수 있다.




2) openmpi 사이트 접속 후 파일 다운로드

<https://www.open-mpi.org/software/ompi/v4.1/>

Release	File names	Size	Date
4.1.6 SRPM notes	openmpi-4.1.6-1.src.rpm	16.6 MiB	Sep 30, 2023
	openmpi-4.1.6.tar.bz2	9.55 MiB	Sep 30, 2023
	openmpi-4.1.6.tar.gz	16.93 MiB	Sep 30, 2023

맞는 버전 압축파일 다운로드

최근 다운로드 기록

	openmpi-4.1.6.tar.gz 16.9MB • 1분 전		
---	---------------------------------------	---	---

Openmpi 설치

Openmpi 설치

1) 압축 해제 : tar -xzf openmpi-4.1.6.tar.xz

```
(base) [yongsang@ga04 openmpi-4.1.6]$ ls -l
total 16000
-rw-rw-r-- 1 yongsang yongsang 49345 2023-10-01 00:25 alocal.m4
-rw-rw-r-- 1 yongsang yongsang 12186 2023-10-01 00:28 AUTHORS
-rwxrwxr-x 1 yongsang yongsang 53477 2023-10-01 00:23 autogen.pl
-rwxrwxr-x 1 yongsang yongsang 12288 2023-10-01 00:29 config
-rwxrwxr-x 1 yongsang yongsang 15627043 2023-10-01 00:26 configure
-rw-rw-r-- 1 yongsang yongsang 47777 2023-10-01 00:23 configure.ac
-rwxrwxr-x 6 yongsang yongsang 4096 2023-10-01 00:28 contrib
-rw-rw-r-- 1 yongsang yongsang 44049 2023-10-01 00:23 Doxyfile
-rwxrwxr-x 2 yongsang yongsang 4096 2023-10-01 00:28 examples
-rw-rw-r-- 1 yongsang yongsang 3469 2023-10-01 00:23 INSTALL
-rw-rw-r-- 1 yongsang yongsang 5487 2023-10-01 00:23 LICENSE
-rw-rw-r-- 1 yongsang yongsang 2503 2023-10-01 00:23 Makefile.am
-rw-rw-r-- 1 yongsang yongsang 107626 2023-10-01 00:25 Makefile.in
-rw-rw-r-- 1 yongsang yongsang 1931 2023-10-01 00:23 Makefile.omp-rules
-rw-rw-r-- 1 yongsang yongsang 241583 2023-10-01 00:23 NEWS
-rwxrwxr-x 29 yongsang yongsang 4096 2023-10-01 00:29 omp
-rwxrwxr-x 13 yongsang yongsang 4096 2023-10-01 00:28 opal
-rwxrwxr-x 10 yongsang yongsang 4096 2023-10-01 00:29 orte
-rwxrwxr-x 12 yongsang yongsang 4096 2023-10-01 00:29 ashmem
-rw-rw-r-- 1 yongsang yongsang 101982 2023-10-01 00:23 README
-rw-rw-r-- 1 yongsang yongsang 10695 2023-10-01 00:23 README.JAVA.txt
-rwxrwxr-x 13 yongsang yongsang 4096 2023-10-01 00:29 test
-rw-rw-r-- 1 yongsang yongsang 6748 2023-10-01 00:23 VERSION
```

압축 해제 폴더 확인하면 위와 같다.

2) GCC 컴파일 과정

아래 세개의 명령을 순차적으로 입력 (시간이 조금 걸린다)

* TIP : 여러 개 CPU 가용 가능하다면 make 시에 -j <cpu수> 인자를 적용해서 빠르게 컴파일 할 수 있다

```
./configure --prefix="/home/yongsang/.openmpi"
```

```
make
```

```
sudo make install
```

3) 설치 폴더 체크 (.openmpi는 숨김 폴더라서 ls -al로 해야 보인다)

```
(base) [yongsang@ga04 openmpi-4.1.6]$ ls -l ~/.openmpi
total 20
drwxr-xr-x 2 root root 4096 2025-01-20 10:01 bin
drwxr-xr-x 2 root root 4096 2025-01-20 10:00 etc
drwxr-xr-x 5 root root 4096 2025-01-20 10:00 include
drwxr-xr-x 5 root root 4096 2025-01-20 10:01 lib
drwxr-xr-x 5 root root 4096 2025-01-20 10:00 share
```

4) 환경 변수 설정 과정

```
vi ~/.bashrc
```

```
# OPENMPI
export PATH=$PATH:/home/yongsang/.openmpi/bin
export LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:/home/yongsang/.openmpi/lib
```

~/.bashrc 파일 맨 아래줄에 다음을 추가

```
source ~/.bashrc
```

5) 잘 깔렸는지 확인 (아래처럼 나오면 OK)

```
(base) [yongsang@ga04 ~]$ mpirun
-----
mpirun could not find anything to do.

It is possible that you forgot to specify how many processes to run
via the "-np" argument.
-----
```

```
(base) [yongsang@ga04 ~]$ which mpirun
~/.openmpi/bin/mpirun
```

orca에서 병렬처리 사용법

ORCA Input 파일 수정

1) Input 파일을 다음과 같이 수정한다.

```
! B3LYP def2-SVP OPT ALLPOP KEEPDEMS
```

```
%pal  
nprocs 32  
end
```

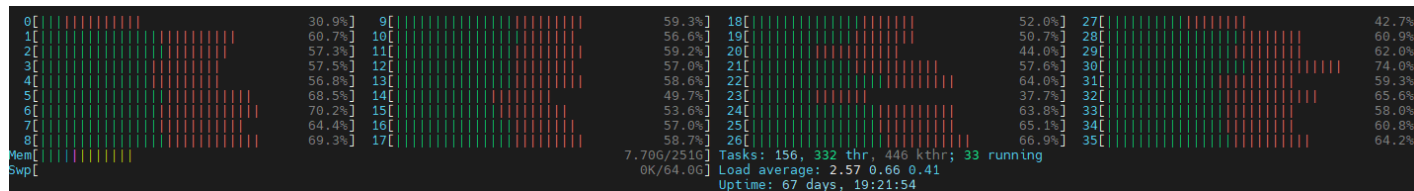
```
* xyz 0 1
```

```
N      -2.40460      0.00000      0.00050  
C      -0.99410     -0.00020     -0.00030  
C      -0.29690      1.20790     -0.00030  
C      -0.29650     -1.20800     -0.00030  
C       1.09800      1.20800      0.00010  
C       1.09840     -1.20780      0.00010  
C       1.79570      0.00020      0.00030  
H      -0.82890      2.15580     -0.00030  
H      -0.82830     -2.15610     -0.00020  
H       1.64110      2.14860      0.00020  
H       1.64170     -2.14820      0.00020  
H       2.88180      0.00040      0.00060  
H      -2.91090     -0.87550     -0.00050  
H      -2.91070      0.87560     -0.00060  
*
```

```
%pal  
nprocs <사용할 병렬 CPU수>  
end
```

2) 인풋 파일 실행

```
orca <inp file> > <outfile>
```



위 사진처럼 htop을 했을 때 여러 개의 CPU가 사용중인 것을 확인하면 OK
훨씬 빠르게 계산이 끝나는 것을 체감할 수 있다.

추가 TIP) 아래처럼 오류났을 때.

```
(base) [yongsang@ga04 a]$ orca aniline_opt.inp > out.out  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!  
[file orca_tools/qcsys.cpp, line 50]:
```

원인 : orca 실행 경로가 절대경로로 불러지지 않기 때문.
이럴때는 절대경로로 orca실행파일을 실행하면 된다.

```
/home/yongsang/orca_6_0_1_linux_x86-64_shared_openmpi416/orca aniline_opt.inp > out.out
```

참고 자료

Open MPI 설치 방법 영상

<https://www.youtube.com/watch?v=61mDG1q7z44>

병렬 계산 사용 orca 영상

https://www.youtube.com/watch?v=N_smvukQoM8