

中心 CP2K 使用指南

- 1、以下内容中 **hpc-user** 表示用户已开通的高性能帐号；**login node** 表示不同分区登录节点；
- 2、在编译节点也可以提交任务；
- 3、文件及文件夹命名方式仅供参考；
- 4、在作业提交之前，建议使用者熟悉 Linux 操作的几个常用命令（例如：vi 或 vim、cd、mkdir、ls、pwd 等）和 CP2K 建模。

一、作业提交

- 1、在电脑上用 Xshell 客户端（或其他类似软件）登陆高性能账号，若不知道自己的高性能帐号在哪个分区，登陆帐号以后输入：`pwd`，可以看到如下图，home-后面的就是高性能帐号所在的分区（图中为 YW 分区）：

```
[nsyw211_LZ@ycn24 ~]$ pwd
/home-yw/users/nsyw211_LZ
[nsyw211_LZ@ycn24 ~]$
```

- 2、如需直接提交作业，在高性能账号下创建放计算任务的文件夹 `test/cp2k`（该名称可以根据自己习惯命名）：

```
hpc-user@login node:~> mkdir -p test/cp2k
```

- 3、用 FTP 工具登录高性能帐号，将计算所需的算例文件通过 XFTP 上传至账号目录下 `test/cp2k`：

名称	大小	类型
..		
BASIS_MOLOPT	123KB	文件
CONTCAR.vasp	18KB	VASP 文件
GTH_BASIS_SETS	117KB	文件
GTH_POTENTIALS	123KB	文件
POTENTIAL	133KB	文件
geo_opt_444.inp	2KB	INP 文件
lsth_444.xyz	18KB	XYZ 文件

- 4、切换至 Xshell 界面，进入算例文件夹中：

```
hpc-user@login node:~> cd test/cp2k
```

- 5、创建或拷贝提交作业的脚本文件 cp2k-6.1_YW.lsf（也可在 Windows 系统写好以后用 FTP 工具上传；现以 YW 分区直接从公共目录中拷贝为例），Y 分区 CP2K 软件脚本的路径在 `/home-yw/soft/jobscripts/` 中。先查看脚本是否存在，图中 cp2k-6.1_YW.lsf 即为所需脚本：

```
[nsyw145_QLL@ycn24 ~]$ ls /home-yw/soft/jobscripts
Gaussian09001 cp2k-6.1_YW.lsf lammps-2018Mar16_YW.lsf namd-2.12_YW.lsf wrf-4.0_YW.lsf
MS gromacs-2018.4_YW.lsf lammps-2019Aug07_YW.lsf nwchem-6.6_YW.lsf
VASP5.4.1 gromacs-515_YW.lsf namd-2.11_YW.lsf qe-6.3_YW.lsf
[nsyw145_QLL@ycn24 ~]$
```

- 6、采用您最熟悉的方式将上述脚本拷贝至需要提交任务的文件夹中（注意 `cp` 后 `/` 前有空格）：

```
[nsyw211_LZ@ycn24 cp2k]$ cp /home-yw/soft/jobscripts/cp2k-6.1_YW.lsf ./
```

- 7、修改模板脚本：

```
hpc-user@login node:~/test/cp2k> vi cp2k-6.1_YW.lsf
```

- 8、输入字母“i”，进入编辑模式。脚本内容如下，部分内容需要根据情况进行修改：

注意：

- 1、`APP_NAME=intelY_mid` 为提交作业计算的队列，不同的分区、不同的核数所使用的队列不相同，参见[各分区提交作业脚本及队列说明](#)；
- 2、`NP=12` 为计算该作业设置的核数，可以根据任务的需要进行修改。除 FN 分区外，其他分区每个节点 12 核（FN 分区 32 核），需要跨节点并行时，建议使用 12 的多倍值（新节点除外）；
- 3、`test.inp`、`test.out` 为输入/输出文件，要修改为需计算任务的名称；
- 4、经测试：由于该软件编译时采用 MPICH 并行库（intel 无法编译成功），多节点计算速率提升不明显，在内存允许范围内，推荐使用单节点或者 2 个节点进行计算。

```
#!/bin/bash
APP_NAME=intelY_mid
NP=12
NP_PER_NODE=12
RUN="RAW"

source /home-yw/env_new/gcc/gcc-8.2.0.sh
source /home-yw/env_new/mpich/mpich3.2.1-gnu8.2.0.sh
source /home-yw/env_new/fftw/fftw-3.3.8.sh
source /home-yw/soft/envdir/cp2k-6.1-gnu.sh

CP2K=/home-yw/soft/packagedir/cp2k-6.1-gnu/exe/Linux-x86-64-gfortran/cp2k.popt
mpirun -np $NP $CP2K -i test.inp -o test.out
```

- 9、按下键盘上的 `esc` 键后，输入 `:wq` 保存脚本文件，并退出。
- 10、将脚本文件转换为 UNIX 格式（如从 Windows 系统上传的话必须要转换，不然提交作业时时报错；若直接拷贝公共目录中的脚本，并在 Linux 环境中进行修改，则可

以省略步骤 10、11。若提交作业脚本名称不为 cp2k-6.1_YW.lsf，则需要修改为对应的脚本名称）：

```
hpc-user@login node:~/test/cp2k> dos2unix cp2k-6.1_YW.lsf
```

- 11、赋予脚本文件可执行权限：

```
hpc-user@login node:~/test/cp2k> chmod +x cp2k-6.1_YW.lsf
```

- 12、用 bsub 命令提交作业脚本：

```
hpc-user@login node:~/test/cp2k> bsub cp2k-6.1_YW.lsf
```

```
[nsyw211_LZ@ycn24 cp2k]$ bsub cp2k-6.1_YW.lsf
Job <3319243> is submitted to queue <intely_mid>.
```

- 13、如果提交正确，则会出现如下内容（其中 Job 后面的数字为：JobID，每个任务的 JobID 不一样，可根据 JobID 查看该任务情况，出问题，请及时告知 JobID，保留计算的输出文件）：

```
Job <3319243> is submitted to queue <intely_mid>.
```

- 14、查看任务是否计算完成，可以使用 bjobs 命令（当出现：Done successfully. The CPU time used is xxxx seconds 说明计算结束）：

```
hpc-user@login node:~/test/cp2k> bjobs -l 3319243
```

- 15、任务计算结束后，可以查看输出文件，检查任务是否计算成功（作业脚本中指定的输出文件）：

```
hpc-user@login node:~/test/cp2k> tail test.out
```

- 16、若显示最后有时间统计，没有 Error，则表示计算正常结束：

```
The number of warnings for this run is : 4
-----
**** ** PROGRAM ENDED AT 2019-08-02 11:18:50.549
**** ** PROGRAM RAN ON
ys0310
** ** PROGRAM RAN BY
nsyw211_LZ
**** ** PROGRAM PROCESS ID
10700
**** ** PROGRAM STOPPED IN /home-yw/users/nsyw211_LZ/test/cp2k
```

二、短时间使用软件相关命令

- 1、CP2K 软件安装完成后会生成如下可执行文件：

```

[msyml@15_011evcp24 ~]$ ls /home-yw/soft/package017/cp2k-6.1-gnu/exe/Linux-x86_64-gfortran/
cp2k.popt          dbcsr_example_2.popt      dbcsr_tensor_unittest.popt  graph.popt
cp2k.psm           dbcsr_example_2.psm      dbcsr_tensor_unittest.psm   graph.psm
cp2k_shell.popt   dbcsr_example_3.popt     dbcsr_test_csr_conversions.popt  libcp2k_unittest.popt
cp2k_shell.psm    dbcsr_example_3.psm     dbcsr_test_csr_conversions.psm  libcp2k_unittest.psm
dbcsr_example_1.popt dbcsr_performance_driver.popt dbcsr_unittest.popt
dbcsr_example_1.psm dbcsr_performance_driver.psm dbcsr_unittest.psm
    
```

- 2、若需直接使用 CP2K 软件安装的可执行文件进行短时间文件处理或操作，必须进入编译节点，请选择相应分区的编译节点：**ssh +编译节点 IP/名称**。
- 3、需把脚本中关于 CP2K 的环境变量拷贝/添加至账号的 ~/.bashrc 文件下即可（以 YW 分区为例，添加 source /home-yw/soft/envdir/cp2k-6.1-gnu.sh 等四句，如下图）：

```
hpc-user@compiling node:~/test/cp2k> vim ~/.bashrc
```

```

source /home-yw/env_new/gcc/gcc-8.2.0.sh
source /home-yw/env_new/mpich/mpich3.2.1-gnu8.2.0.sh
source /home-yw/env_new/fftw/fftw-3.3.8.sh
source /home-yw/soft/envdir/cp2k-6.1-gnu.sh
    
```

- 4、按下键盘上的 **esc** 键后，输入 **:wq** 保存脚本文件，并退出。
- 5、需要执行 source ~/.bashrc，才能使其生效（若已经添加，则不用再添加，直接进入编译节点进行操作即可）。
- 6、即可进行短时间文件处理或操作。