



科学与工程计算中心

Center for Computational Science and Engineering

“太乙”

Cp2k

手册

编写时间：2020 年 11月

## 1. 目录

一、 介绍.....	3
1.1. 简介.....	3
1.2. 太乙的cp2k.....	3
二、 使用软件.....	3
2.1. 输入文件样例.....	3
2.2. 加载该软件.....	3
三、 作业样例.....	3
3.1. 提交脚本.....	3
3.2. 提交并查看作业.....	4
3.3. 作业结果.....	4
四、 注意事项.....	4
4.1. 关于测试样例.....	4
4.2. 联系方式.....	4

## 一、介绍

### 1.1. 简介

CP2K是一个量子化学和固态物理软件包，可以对固态，液态，分子，周期性，材料，晶体和生物系统进行原子模拟。CP2K为不同的建模方法（例如使用混合高斯的DFT和平面波方法GPW和GAPW）提供了通用框架。支持的理论包括DFTB，LDA，GGA，MP2，RPA，半经验方法（AM1，PM3，PM6，RM1，MNDO……）和经典力场（琥珀色，CHARMM…）。CP2K可以使用NEB或二聚体方法进行分子动力学，元动力学，蒙特卡洛，埃伦菲斯特动力学，振动分析，核心能级谱，能量最小化和过渡态优化的模拟。CP2K是用Fortran 2008编写的，可以结合使用多线程，MPI和CUDA来并行高效地运行。

更多内容，请参考官方网站：[www.cp2k.org](http://www.cp2k.org)。

### 1.2. 太乙的cp2k

太乙集群上面已经安装配置好了6.1版本的cp2k软件。软件所在位置：`/share/apps/cp2k-6.1-success`。

## 二、使用软件

### 2.1. 输入文件样例

输入样例文件为 `argon.inp`，该文件位于：`/share/apps/cp2k-6.1-success/tests/argon.inp`，用户可自行下载该文件到自己目录，进行测试。

### 2.2. 加载该软件

太乙module已经做好配置，直接执行：`module load cp2k/6.1`，即可使用该软件。

```
(base) [ccse-xiezy@login01 ~]$ module load cp2k/6.1
(base) [ccse-xiezy@login01 ~]$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
  1) intel/2018.4          2) mpi/intel/2018.4    3) cp2k/6.1
```

## 三、作业样例

### 3.1. 提交脚本

提交脚本文件为 `test.lsf`，该文件位于：`/share/apps/cp2k-6.1-success/tests/test.lsf`，用户可自行下载该文件到自己目录，进行测试。

脚本内容：

```
#!/bin/bash
#BSUB -q short
#BSUB -J cp2k_test
#BSUB -n 40
```

```
#BSUB -o %J.out
#BSUB -e %J.err
##BSUB -R "span[ptile=40]"
module load cp2k/6.1
mpirun -n 40 cp2k.popt -i argon.inp -o out_ex0.out
```

### 3.2. 提交并查看作业

```
$ bsub < test.lsf
Job <674975> is submitted to queue <short>.
```

```
$ bjobs
JOBID  USER  STAT  QUEUE  FROM_HOST  EXEC_HOST  JOB_NAME  SUBMIT_TIME
674975 ccse-zh RUN   ser     login04    40*r01n09  cp2k_test  Sep 28 15:27
```

### 3.3. 作业结果

结果文件为out\_ex0.out

```
(base) [ccse-xiezy@login01 tests]$ tail -n 20 out_ex0.out
diamat_all          1  4.0    0.219    0.265    0.219    0.265
fist_init_subsys    1  4.0    0.019    0.206    0.027    0.206
mp_max_i            319 1.6    0.189    0.199    0.189    0.199
fft3d_s             1  2.0    0.012    0.037    0.118    0.153
get_fft_scratch     1  3.0    0.106    0.153    0.106    0.153
topology_control    1  4.0    0.011    0.074    0.087    0.136
coordinate_control  1  5.0    0.000    0.000    0.007    0.095
coordinate_control_READ_COORDI 1  6.0    0.003    0.092    0.007    0.095
force_field_control 1  4.0    0.013    0.053    0.065    0.090
connectivity_control 1  5.0    0.005    0.043    0.044    0.089
-----
The number of warnings for this run is : 0
-----
****  ****  *****  **  PROGRAM ENDED AT                2020-11-11 15:41:18.294
*****  **  ***  ***  **  PROGRAM RAN ON                                r01n03
**  ****  *****  PROGRAM RAN BY                                ccse-xiezy
*****  **  **  **  **  PROGRAM PROCESS ID                                4536
****  **  *****  **  PROGRAM STOPPED IN /work/ccse-xiezy/fft/cp2k/tests
```

## 四、 注意事项

### 4.1. 关于测试样例

- 本文档测试样例，只是验证改软件能正常运行。
- 欢迎使用该软件的用户，提供更加好的样例，以便提高该软件的使用效率。

### 4.2. 联系方式

- 本文档由科学与工程计算中心编写，联系邮箱：hpc@sustech.edu.cn, 联系

---

人：谢作扬，电话：0755-88015831