



科学与工程计算中心
Center for Computational Science and Engineering

“启明” CP2K 手册

编写时间：2023 年 10月

一、 介绍.....	3
1.1. 简介.....	3
1.2. 启明的cp2k.....	3
二、 使用软件.....	3
2.1. 测试输入文件样例.....	3
2.2. 加载该软件.....	3
三、 作业样例.....	4
3.1. 提交脚本.....	4
3.2. 提交并查看作业.....	4
3.3. 作业结果.....	5
四、 注意事项.....	5
4.1. 关于测试样例.....	5
4.2. 联系方式.....	5

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，MND0 ……）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：<https://www.cp2k.org/>

1.2. 启明的cp2k

启明集群上面已经安装配置好了（v9.1版本使用openmpi编译）、（v2023.1版本使用oneAPI编译）的cp2k软件. 软件所在位置：`/share/apps/cp2k`

二、 使用软件

2.1. 测试输入文件样例

输入样例文件为`argon.inp`，该文件位于：`/share/apps/cp2k/testjob/example`，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

启明module已经做好配置，目前有以下处理器版本：

(1) 处理器型号：Intel Xeon Gold 可用队列：38、ot38、2t50c

对应软件编译版本：`cp2k/il-9.1_openmpi-4.1.1`、`cp2k/il-2023.1_oneapi-2023.1`

(2) 处理器型号：Intel Xeon E5 可用队列：v3-64、v3-128

对应软件编译版本：`cp2k/e5-9.1_openmpi-4.1.1`、`cp2k/e5-2023.1_oneapi-2023.1`

(3) 处理器型号：Intel Xeon E7 可用队列：v3-6t

对应软件编译版本：`cp2k/e7-9.1_openmpi-4.1.1`、`cp2k/e7-2023.1_oneapi-2023.1`

该文档提交v2023.1（oneAPI编译）版本测试：

直接执行：`module load cp2k/il-2023.1_oneapi-2023.1`，即可使用该软件。

```
[ccse-yangyc@b04u17l example]$ module load cp2k/il-2023.1_oneapi-2023.1
Loading compiler version 2022.1.0
Loading tbb version 2021.7.0
Loading compiler-rt version 2022.2.0
Loading oclfpga version 2022.2.0
Load "debugger" to debug DPC++ applications with the gdb-oneapi debugger.
Load "dpl" for additional DPC++ APIs: https://github.com/oneapi-src/oneDPL
Loading mpi version 2021.6.0
Loading mkl version 2022.2.0

Loading cp2k/il-2023.1_oneapi-2023.1
Loading requirement: tbb/latest compiler-rt/latest oclfpga/latest compiler/2022.1.0 mpi/2021.6.0 mkl/2022.2.0 gcc/11.2.0
[ccse-yangyc@b04u17l example]$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
 1) tbb/latest          3) oclfpga/latest      5) mpi/2021.6.0       7) gcc/11.2.0
 2) compiler-rt/latest  4) compiler/2022.1.0  6) mkl/2022.2.0      8) cp2k/il-2023.1_oneapi-2023.1
[ccse-yangyc@b04u17l example]$
```

三、 作业样例

3.1. 提交脚本

提交脚本文件为il-2023.lsf，该文件位于：/share/apps/cp2k/testjob，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 38
#BSUB -J test
#BSUB -n 128
#BSUB -e %J.err
#BSUB -o %J.o
#BSUB -R "span[ptile=64]"
```

```
hostfile=`echo $LSB_DJOB_HOSTFILE`
NP=`cat $hostfile | wc -l`
```

```
cd $LS_SUBCWD
module load cp2k/il-2023.1_oneapi-2023.1
```

```
mpirun -machinefile $LSB_DJOB_HOSTFILE -np $NP cp2k.popt -i xxx.inp >
$LSB_JOBID.log 2>&1
```

3.2. 提交并查看作业

```
[ccse-yangyc@b04u17l example]$ bsub < il-2023.lsf
Job <81148> is submitted to queue <38>.
[ccse-yangyc@b04u17l example]$ bjobs
```

81148	ccse-ya	RUN	38	b04u17l	64*b04u26b 64*b04u34b	test	Oct 27 17:07
-------	---------	-----	----	---------	--------------------------	------	--------------

```
[ccse-yangyc@b04u17l example]$
```

3.3. 作业结果

结果文件为81148.log

```

-
-          T I M I N G          -
-
-----
SUBROUTINE          CALLS  ASD          SELF TIME          TOTAL TIME
                   MAXIMUM          AVERAGE  MAXIMUM  AVERAGE  MAXIMUM
CP2K                  1  1.0    0.016    0.021    3.883    3.883
qs_mol_dyn_low        1  2.0    0.012    0.015    3.838    3.849
velocity_verlet     1000  3.0    0.052    0.055    3.249    3.274
md_output           1000  3.0    0.001    0.002    0.134    2.922
mp_sum_dm           3001  5.0    2.867    2.896    2.867    2.896
update_particle_set  2000  4.0    0.002    0.002    2.858    2.887
md_write_output      1001  4.0    0.062    1.928    0.113    2.605
write_trajectory      4004  5.0    0.022    0.097    0.026    0.651
fist_calc_energy_force 1001  4.0    0.187    0.209    0.443    0.610
write_particle_coordinates 1001  6.0    0.004    0.554    0.004    0.554
rot_ana              1  3.0    0.000    0.000    0.259    0.401
diamat_all           1  4.0    0.259    0.401    0.259    0.401
write_restart        1000  4.0    0.007    0.338    0.019    0.351
mp_sum_d             3278  3.4    0.179    0.347    0.179    0.347
-----

The number of warnings for this run is : 0
-----

```

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