

# Materials Studio 软件的安装与并行计算使用手册

张运动

[zhangzyd@ustc.edu.cn](mailto:zhangzyd@ustc.edu.cn)

中国科技大学 超级计算中心

2012-07-26

## 一、 安装前说明:

1. 中国科技大学超级计算中心（以下简称超算中心）服务器的操作系统多为 CentOS x86\_64 Linux 系统，无任何版本的 Windows 系统环境提供计算。计算用户在安装 Materials Studio 软件时请选择使用相应的 linux 版本软件以及对应的软件许可。

Materials Studio 软件不支持 AIX 系统，因此不可在超算中心的 IBM-JS22 刀片服务器上安装使用。

2. 计算用户在超算中心服务器系统上安装使用 [Materials Studio 软件](#)之前，应对计算软件本身以及 [Linux 系统的基本命令](#)、[LSF 作业管理系统](#)的使用有所学习了解。
3. 超算中心禁止用户以客户端/服务器端的模式使用 Materials Studio 计算软件，本手册主要介绍 Materials Studio 软件在 CentOS 系统的命令行模式下的安装、配置以及协同 LSF 作业管理系统的命令行提交方法。

## 二、 测试环境介绍:

以超算中心刀片及胖节点服务器系统上，个人计算用户 zhangzyd 安装软件为例说明，其他计算用户在超算中心其他服务器系统上安装 Materials Studio 软件时可参考执行。

操作系统：

CentOS release 6.2 x86\_64 GNU/Linux

编译器：

Intel v12.1.3、PGI v10.6、GCC v4.4.6 等 C/C++、Fortran 编译器

数值函数库：

Intel MKL 等

并行环境：

Open MPI，支持 MPI 并行程序

作业管理系统：

Platform LSF

系统用户使用指南：

[刀片及胖节点服务器用户使用指南](#)

测试安装软件：

Materials Studio6.0

### 三、 软件安装：

1. 在个人计算账号下建立 soft 文件夹作为软件安装文件的存放目录，并将软件安装包 Materials Studio60.tar 以及软件许可 msi.lic 上传至 soft 文件夹下。

```
[zhangzyd@sugon ~]$ mkdir soft
上传文件后:
[zhangzyd@sugon ~]$ cd soft
[zhangzyd@sugon soft]$ ls
MaterialsStudio60.tar  msi.lic
```

2. 解压缩文件 Materials Studio60.tar 得到 Materials Studio60 文件目录，进入 Materials Studio60 文件目录开始安装。

```
[zhangzyd@sugon soft]$ tar -xvf MaterialsStudio60.tar
[zhangzyd@sugon soft]$ ls
MaterialsStudio60  MaterialsStudio60.tar  msi.lic
[zhangzyd@sugon soft]$ cd MaterialsStudio60
[zhangzyd@sugon MaterialsStudio60]$ ls
Info install lib LicensePack msi.lic  README_Materials_Studio.htm  rpms
```

执行安装命令 `./install` 并导入软件许可。MS 软件 6.0 版本之前只能以非 root 身份用户安装，6.0 版本之后可以 root 身份安装到统一共享的路径使用。安装过程中均默认即可，会在个人账号根目录下生成 Accelrys 目录。执行命令：

```
[zhangzyd@sugon MaterialsStudio60]$ ./install
..... (均默认安装即可)
[zhangzyd@sugon ~]$ cd
[zhangzyd@sugon ~]$ ls Accelrys/
LicensePack  MaterialsStudio6.0
```

若安装开始时，遇到“Bundled JRE is not binary compatible with host OS/Arch or it is corrupt. Testing bundled JRE failed.”的错误提示，请安装一下 glibc 的 32 位库文件。

超算中心禁止用户使用客户端/服务器端模式使用 Materials Studio 软件，因此软件安装完成后，请将 gateway 进程停用：

```
[zhangzyd@sugon ~]$ Accelrys/MaterialsStudio6.0/etc/Gateway/gwstop
```

导入软件许可：

```
[zhangzyd@sugon~]$ Accelrys/LicensePack/linux/bin/lp_install soft/msi.lic
```

### 3. 软件及环境变量配置:

编辑文件 gw-info.sbd 将其中 cpucoresetotal 参数以及 gwparams.cfg 文件中 gw\_cpucoresetotal 参数均设置为系统全部 CPU 总核数 1528。

其他系统上此处配置请设置为当时系统的 CPU 总核数。

```
$ cd ~/Accelrys/MaterialsStudio6.0/etc/Gateway/root_default/dsd/conf/  
[zhangzyd@sugon conf]$ vi gw-info.sbd
```

设置 cpucoresetotal=1528 后, 保存退出。

```
[zhangzyd@sugon conf]$ vi gwparams.cfg
```

设置 gw\_cpucoresetotal=1528 后, 保存退出。

### LSF 作业管理系统协同设置:

```
[zhangzyd@sugon ~]$ cd ~/Accelrys/MaterialsStudio6.0/etc/Gateway/config/  
[zhangzyd@sugon config]$ ./configure queue -queuepath LSF/dsd_lsf --activate
```

```
----- Queue name = Platform LSF HPC 6.0 for Linux  
Queue configuration complete
```

编辑文件.bashrc, 设置环境变量参数:

```
[zhangzyd@sugon ~]$ vi ~/.bashrc
```

添加如下几行:

```
. ~/Accelrys/LicensePack/etc/lp_profile  
export MS_INSTALL_ROOT=$HOME/Accelrys/MaterialsStudio6.0  
export PATH=$PATH:$MS_INSTALL_ROOT/etc/CASTEP/bin  
LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:$MS_INSTALL_ROOT/lib:$MS_INSTALL_ROOT  
/lib/32  
export LD_LIBRARY_PATH  
export CASTEP_TMP=/tmp
```

保存退出后, 重新登录系统, 或执行:

```
[zhangzyd@sugon ~]$ source ~/.bashrc  
[zhangzyd@sugon ~]$ which RunCASTEP.sh  
~/Accelrys/MaterialsStudio6.0/etc/CASTEP/bin/RunCASTEP.sh  
[zhangzyd@sugon ~]$
```

RunCASTEP.sh 命令在以后提交作业时可直接使用, 不必再写完整路径。

#### 四、 作业输入文件:

以 CASTEP 模块输入文件为例:

1. 打开 Materials Studio6.0 客户端软件界面，建立相关模型，并在 Castep 的 Calculation 对话框中设置相关的参数；
2. 在 Calculation 对话框中选择 File ->Save Files, 此时在 Project Explorer 中生成一个新的文件目录，其中包含了使用命令行运行 Castep 的输入文件；
3. 使用 Tools ->File Transfer 功能将第 2 步产生的新目录内文件上传到服务器上，准备计算。计算完成后，亦可使用 File Transfer 功能将计算结果文件下载至工作目录内。上传和下载的时候，请确认是在工作目录内，否则传得文件会不正确。

#### 五、 测试计算:

将计算所需输入文件上传到服务器上之后，使用命令 RunCASTEP.sh 提交作业，其参数设置说明可使用 RunCASTEP.sh -h 命令查看。

提交作业命令:

```
[zhangzyd@sugon ~]$ RunCASTEP.sh -q normal -np 12 seedfile
```

-q 指定使用 normal 队列，可根据系统上队列设置以及计算需要指定为其他队列

-np 指定提交的作业使用的进程数，可根据队列设置以及计算需要指定为其它数值

seedfile 请替换为自己实际提交计算作业时的种子文件名

作业提交完成后，可使用 LSF 作业管理系统的 bjobs 等相关命令查看作业的详细信息或 ssh 到作业计算节点上查看作业是否已在并行计算。

计算产生的结果文件会生成在提交作业的目录下，若计算结果存在异常，可根据生成的 Castepe.exe.log、std.err、std\_out.txt、stdout.txt 等文件分析产生异常的原因。

## 六、 其它计算模块说明：

MaterialsStudio6.0 软件中其他模块体系的计算，例如 Dmol3 等，安装以及配置过程均可参考以上方法执行操作。

## 七、 致谢：

手册编写过程中，得到了中国科学技术大学材料科学与工程系[傅正平](#)老师的诸多指导和帮助，在此深表感谢！