

# CASTEP



- 
- Opis
- Verzije
- Službena dokumentacija
- Primjeri
  - Napomene
  - Paralelno izvođenje
    - Jedan čvor (Supek i Padobran)
    - Više čvorova (Supek)
  - Serijsko izvođenje

## Opis

**CASTEP** je aplikacija za simulaciju materijala na atomskoj razini, posebno usmjerena na proučavanje elektronske strukture i svojstava čvrstih tvari.



### Važno

Korištenje CASTEP-a ograničeno je na registrirane korisnike.

Više informacija na:

- <http://www.castep.org/CASTEP/GettingCASTEP>

## Verzije

Verzija	Modul	Prevodioc	Podrška	Paralelizacija *	Supek
19.11	scientific/castep/19.11-gnu	GNU	CPU	Serijski + MPI	✗
20.11	scientific/castep/20.11-gnu	GNU	CPU	Serijski + MPI	✓
20.11 (non-SCF)	scientific/castep/20.11-nonscf-gnu	GNU	CPU	Serijski + MPI	✓
21.11	scientific/castep/21.11-gnu	GNU	CPU	Serijski + MPI	✓

## Napomene



Zbog aktualnog **cray-pals buga** na **Supeku**, trenutno je ograničen broj poslova koji se mogu širiti van čvora kad koriste Cray-ev **mpiexec**. Ako Vaš posao prijeđe taj limit i proširi svoje MPI procese na druge čvorove, prekinut će se.

Kako bi izbjegli taj *bug*, sigurnije je je sve MPI procese smjestiti na isti čvor.

Najjednostavniji način je korištenjem opcije **#PBS -l place=pack**.

## Paralelno izvođenje

### Jedan čvor (Supek i Padobran)

U primjeru niže, aplikacija će se pokrenuti na jednom čvoru, na sveukupno 32 procesorske jezgre, odnosno 32 MPI procesa. Sveukupno zatražena memorija iznosi 96 GB.

#### PBS script

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=32:mem=3gb
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/castep/20.11-gnu

mpiexec castep.mpi Cu
```

### Više čvorova (Supek)

**Padobran**  
U primjeru niže, aplikacija će se pokrenuti na dva čvora, na svakom po 16 procesorskih jezgri, odnosno 16 MPI procesa. Zatražena memorija po čvoru (odnosno po *chunku*) iznosi 48 GB.

#### PBS script

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=2:mpiprocs=16:ncpus=16:mem=48gb
#PBS -l place=scatter
export OMP_NUM_THREADS=1

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/castep/20.11-gnu

mpiexec castep.mpi Cu
```

### Serijsko izvođenje

U primjeru niže, aplikacija će se pokrenuti na jednoj procesorskoj jezgri.

22.11	scientific/castep/22.11-gnu	GNU	CPU	Serijski + MPI	✓	✓	<b>PBS skripta</b>  <pre>#PBS -q cpu-single  cd \${PBS_O_WORKDIR}  module load scientific/castep/20.11-gnu  castep.serial Si2</pre>
devel	scientific/castep/devel-openmpi	GNU	CPU	Serijski + MPI	✓	✗	

\* Svaka od spomenutih verzija ima paralelnu (MPI) verziju te serijsku verziju, budući da neki CASTEP-ovi alati za pred- i postprocesuiranje nisu paralelizirani.

## Službena dokumentacija

- <http://www.castep.org/CASTEP/OnlineTutorials>
- <http://www.castep.org/CASTEP/Documentation>

## Primjeri



Ukoliko primijetite sporo izvođenje na **Padobranu**, preporučuje se korištenje privremenog direktorija TMPDIR. Naime, ponekad *input/output* (čitanje/pisanje) može biti usko grlo u izvođenju posla.

Prije pokretanja CASTEP-a iz privremenog direktorija, potrebno je tamo premjestiti sve potrebne input datoteke, npr.:

```
cp -r * ${TMPDIR} && cd ${TMPDIR}
```

Po završetku izvođenja, potrebno je vratiti nazad željene output datoteke, npr.:

```
cp -r * ${PBS_O_WORKDIR}
```