

CASTEP

Uvod i verzije

Aplikacija **CASTEP** se koristi u kemiji i inženjerstvu materijala za izračun svojstva/strukture materijala na temelju njihovih kvantno-mehaničkih opisa. Više o CASTEP-u možete pročitati [na službenim stranicama](#).

Na računalnom klasteru Isabella, CASTEP (21.11) je pripremljen, odnosno preveden u dvije verzije; jedna verzija za arhitekturu NX čvorova te druga verzija za arhitekturu SL čvorova.

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

Modul koji doprema CASTEP u vašu okolinu definiran je u tablici niže:

Verzija	Modul
21.11	castep/21.11

Više o redovima poslova te tehničkim karakteristikama čvorova možete pročitati na službenim wiki stranicama računalnog klastera Isabella:

- [Redovi poslova i paralelne okoline](#)
- [Tehničke specifikacije klastera Isabelle](#)

U nastavku slijede primjeri korištenja aplikacije s pripadajućim skriptama, na konkretnim primjerima.

Primjeri korištenja

MPI verzija

U primjeru niže, definirana je paralelna okolina ***mpi** te 4 procesorske jezgre.

U liniji za poziv aplikacije, `${NSLOTS}` predstavlja broj jezgri na kojima će se posao izvršavati (definiran u zaglavlju skripte), dok je **quartz** osnovno ime *input* datoteka, bez ekstenzija.

Ulazni, tj. *input* podaci mogu se preuzeti u *tarball* obliku, [direktno sa službenih stranica CASTEP-a](#).

mpi.sge

```
#!/bin/bash

#$ -N castep.mpi
#$ -cwd
#$ -pe *mpi 4

# Load the required module:
module load castep/21.11

# Run the program:
mpirun -n ${NSLOTS} castep.mpi quartz
```

Nakon završetka izvođenja, rezultat izračuna nalazi se u datoteci **quartz.castep**.

Serijska verzija

Kako je već objašnjeno ranije, neki CASTEP-ovi alati za pred- i postprocesuiranje nisu paralelizirani te zbog toga modul u Vašu okolinu postavlja serijsku te MPI verziju.

Rad serijske verzije možete testirati s [ulaznim podacima dostupnih s CASTEP stranica](#).

Analogno kao i u prethodnom primjeru, posao možete podnijeti na način kako je prikazano niže. U liniji za poziv aplikacije, **si2** je osnovno ime *input* datoteka, bez ekstenzija.

serial.sge

```
#!/bin/bash

#$ -N castep.serial
#$ -cwd

# Load the required module:
module load castep/21.11

# Run the program:
castep.serial Si2
```

Rezultat izračuna nalazi se u datoteci **si2.castep**.