# http://zhao-server.cn/h-nd-77.html

Materials Studio是美国Accelrys公司生产的新一代材料计算软件，它是商业软件哦。

在天河系统上如果用户希望使用它，请安装使用正版软件。

结合slurm的作业管理系统，可以使用我们编写的 ms-th-1A.sh 脚本提交任务。

这个脚本的使用方法为：

yhbatch -N NNODES -n NPROCS -p PARTITION ms-th-1A.sh server seedname





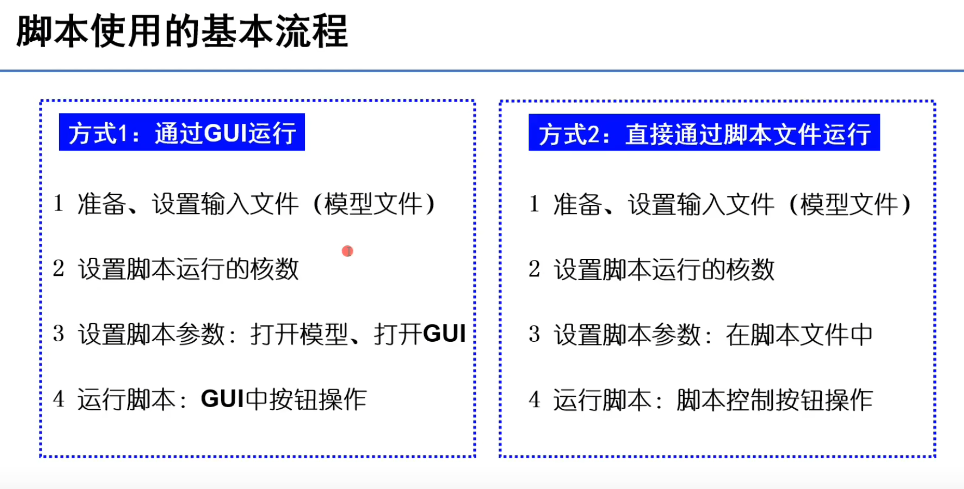
yhbatch -N 2 -n 24 -p TH\_SR1 ms-th-1A.sh castep Al

#https://www.bilibili.com/video/BV1Bg411C7sG/?spm\_id\_from=333.337.search-card.all.click&vd\_source=5dfd86d0bbee5a2798d63e9154215648

脚本如何使用

MS脚本perl，是对软件基本功能的扩展

可以建模





两种提交任务的方式

1、stand-alone

2、gateway，部分超算中心不支持！！

#!/bin/bash

#SBATCH --job-name=sl\_ms #作业名任取

#SBATCH --partition=debug #指定分区

#SBATCH --nodes=1 #节点数量N

#SBATCH --ntasks=40 #总核数n

#SBATCH --ntasks-per-node=40 #每个节点的核数

#SBATCH --time=1-23:59:59 #最大运行时间day-h:min:sec

#SBATCH --output=out.job%j #输出文件

#SBATCH --error=err.job%j #报错信息

# 环境变量

echo "make environment values…"

export $BIOVIA\_directory=/opt/BIOVIA/

export MSI\_LIC\_PARK\_DIR=$BIOVIA\_directory/BIOVIA\_LicensePack

export MS\_INSTALL\_ROOT=$BIOVIA\_directory/MaterialsStudio20.1

export MPIRUN=$MS\_INSTALL\_ROOT/bin/mpirun

export I\_MPI\_ROOT=$MS\_INSTALL\_ROOT

export PATH=$MS\_INSTALL\_ROOT/bin:$PATH

export LD\_LIBRARY\_PATH=$MS\_INSTALL\_ROOT/lib:$MSI\_LIC\_PARK\_DIR/linux/lib:$LD\_LIBRARY\_PATH

# for Castep

export CASTEP=$MS\_INSTALL\_ROOT/bin/castepexe.exe

export PSPOT\_DIR=$MS\_INSTALL\_ROOT/share/Resources/Quantum/Castep/Potentials

export TMPDIR=$BIOVIA\_directory/tmp

# for Dmol3

export DMOL3=$MS\_INSTALL\_ROOT/bin/dmol3.exe

export DMOL3\_DATA=$MS\_INSTALL\_ROOT/share/Resources/Quantum/DMol3

export DMOL\_TMP=$BIOVIA\_directory/tmp

# do not forget to mkdir TMPDir and DMOL\_TMP

#----------------------------------------------------------#

echo "The job "${SLURM\_JOB\_ID}" is submit to group: "${SLURM\_JOB\_PARTITION}

echo "Running with node(s): "${SLURM\_JOB\_NODELIST}

#----------------------------------------------------------#

mpirun -n ${SLURM\_NTASKS} $CASTEP brook210\_opt > output

#----------------------------------------------------------#

echo "The job "${SLURM\_JOB\_ID}" is finished by Slurm system. "

#----------------------------------------------------------#

echo "SLURM\_JOB\_ID = "${SLURM\_JOB\_ID}#：作业的唯一标识符。

echo "SLURM\_JOB\_NAME = "${SLURM\_JOB\_NAME}#：作业的名称。

echo "SLURM\_JOB\_PARTITION = "${SLURM\_JOB\_PARTITION}#：作业所分配的分区。

echo "SLURM\_NTASKS = "${SLURM\_NTASKS}#：作业中的总任务数。

echo "SLURM\_NTASKS\_PER\_NODE = "${SLURM\_NTASKS\_PER\_NODE}#：每个节点上的任务数。

echo "SLURM\_JOB\_CPUS\_PER\_NODE = "${SLURM\_JOB\_CPUS\_PER\_NODE}#：每个节点上的 CPU 数。

echo "SLURM\_NODELIST = "${SLURM\_NODELIST}#：分配给作业的节点列表。

echo "SLURM\_SUBMIT\_DIR = "${SLURM\_SUBMIT\_DIR}#：作业提交的目录。

echo "SLURM\_ARRAY\_TASK\_ID = "${SLURM\_ARRAY\_TASK\_ID}#：如果作业是作业数组的一部分，则表示当前任务在数组中的索引。

echo "SLURM\_JOB\_NODELIST = "${SLURM\_JOB\_NODELIST}#：作业所分配的节点列表。

echo "SLURM\_JOB\_NUM\_NODES = "${SLURM\_JOB\_NUM\_NODES}#：作业分配的节点数。

echo "SLURM\_TASK\_PID = "${SLURM\_TASK\_PID}#：作业任务的进程 ID。

echo "SLURM\_JOB\_ACCOUNT = "${SLURM\_JOB\_ACCOUNT}#：作业的帐户名称。

echo "SLURM\_JOB\_UID = "${SLURM\_JOB\_UID}#：作业的用户 ID。

echo "SLURM\_JOB\_GID = "${SLURM\_JOB\_GID}#：作业的组 ID