

教程：在集群和作业系统上使用ABCluster

作者：张鋆

zhangjunqcc@gmail.com

目录

- [前言](#)
- [在Torque作业系统下运行串行isomer+Gaussian](#)
- [在Torque作业系统下运行并行isomer+Gaussian](#)
- [尾声](#)



前言

前言

- ABCluster是一个效率极高并且使用方便的用于搜索化学团簇的**全局**和**局部**极小点的软件。
- 本教程将讲述如何在**计算机集群和作业系统**上使用 ABCluster中的isomer和lego来进行大规模团簇搜索。
- 本教程默认读者**已经熟悉**ABCluster的简单用法。如果没有，可以参考ABCluster的手册以及ppt教程：

<http://www.zhjun-sci.com/software-abcluster-download.php>

普通方式运行ABCluster

- 如果读者有一台或者几台可以随便使用的服务器，那么直接利用ABCluster其他教程中的步骤就可以直接进行搜索，也就是用isomer或者lego调用Gaussian、DMol3来进行局部优化和能量计算。
- 从2.0版本起，ABCluster可以跨节点并行。具体说，是利用SSH命令连接到其他的机器来进行计算，而计算的顺序则用ABCluster内部的一个微型排队系统实现。

计算机集群上运行ABCluster

- 如果读者在具有排队系统的集群上运行ABCluster，那么一般情况下不能直接SSH调用计算化学程序，必须使用排队系统提交作业。这时候，需要对ABCluster的脚本做一些改动。
- 本教程目标机器：**Linux集群与Torque作业系统**

计算机集群组建

- 如果读者试图自己组建集群，可以参见（老教程，写于2011年）：

<http://www.zhjun-sci.com/theochem-clusterbuilding-ZH.php>



在Torque作业系统下运行串行 isomer+Gaussian

B₇-的全局极小点，普通串行运行

- 例子：搜索B₇-在B3LYP/6-31g(d)下的全局极小点

b7.inp

```
b7          # Result file name
B 7         # Cluster file name
cube 3 3 2 # Structure types
30         # Maximal number of calculations
>>>>
xyz2gaussian optfile $inp$ > $xxx$.gjf
g09 < $xxx$.gjf > $xxx$.log 2>/dev/null
gaussian2xyz $xxx$.log > $out$
rm $xxx$.gjf $xxx$.log
>>>>
```

optfile

```
%nproc=16
%mem=20GB
#N B3LYP/6-31g(d) scf(xqc,novaracc)
opt(MaxCycles=100)

opt

-1 1
>>>>

>>>>
```

- 普通运行：nohup isomer b7.inp > b7.out &

作业系统

- 现在要在集群上使用ABCIsuter，集群使用的是Torque作业系统。假设你的Torque系统用于提交Gaussian作业脚本如下，提交的命令为: **qsub submit.pbs**

submit.pbs

后面将用sed命令
将这行修改为需
要的文件名。

```
#!/bin/bash

#PBS -l nodes=1:ppn=32
#PBS -l walltime=48:00:00
#PBS -q normal
#PBS -e $PBS_JOBID.err
#PBS -o $PBS_JOBID.out
#PBS -N se8

export GAUSS_SCRDIR=/scratch/sciteam/zhang9
fn=filename
g09 < ${fn}.gjf > ${fn}.log
```

ABCluster连接作业系统

- 为了能够使ABCluster通过作业系统调用Gaussian(或者其他程序)，可以使用如下的脚本：

jobhold.sh

这一步是为了提交作业并获得job ID，请根据你的作业系统配置改动。

每隔10秒检测一下作业是否完成

```
#!/bin/bash

# Submit and get job ID.
me=`whoami`
jobid=`qsub submit.pbs | tail -n 1`

# Detect if the job is finished.
sleep_time=10 # in second
jobstate="Q"
while [ -n "${jobstate}" ]
do
    sleep ${sleep_time}
    jobstate=`qstat -u ${me} | grep ${jobid}`
done
```

ABCluster连接作业系统

- 现在把b7.inp修改一下：

b7.inp

修改文件名

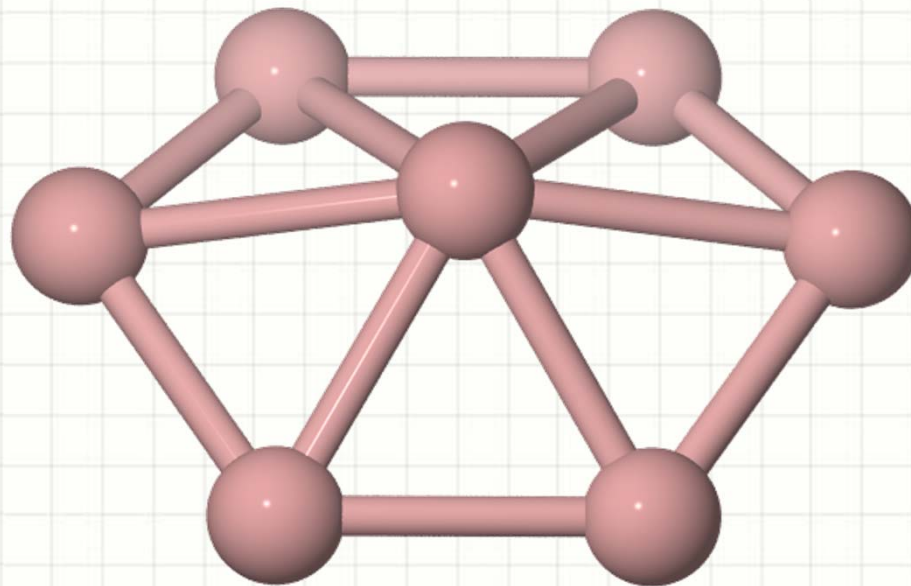


```
b7          # Result file name
B 7        # Cluster file name
cube 3 3 2 # Structure types
30         # Maximal number of
calculations
>>>>
xyz2gaussian optfile $inp$ > $xxx$.gjf
sed -i '11c fn=$xxx$' submit.pbs
./jobhold.sh
gaussian2xyz $xxx$.log > $out$
rm $xxx$.gjf $xxx$.log
>>>>
```

提交

- 在控制节点上直接运行：

```
nohup isomer b7.inp > b7.out &
```
- 这样isomer就可以自动通过作业管理系统来计算了。
- 最终得到的全局极小点是一个碗形结构：





在Torque作业系统下运行并行 isomer+Gaussian

ABCluster的并行

- 从2.0版开始，ABCluster本身具有并行功能。简单来说，就是通过SSH可以同时进行多个计算。
- 注意一定要保证节点间可以无密码SSH连接。
- 但是注意，ABCluster的全局优化并不是一次越多越好。比如要做50个计算，可以利用10个节点一次做10个计算，也可以干脆用50个节点一次完成。但是从全局优化的角度说，后者效率并不高。因为用第一种方式，在10个计算完成后，后续的计算会利用前面优化的结果产生更加合理的初猜，大大提高搜索效率。而第二种方式，50个计算的初猜全部都是随机产生的，这样的效率是很低的。

B₇-的全局极小点，普通并行运行

- 利用6个节点搜索B₇-在B3LYP/6-31g(d)下的全局极小点。
节点名称存储在nodes中，每个节点运行两个计算。

optfile与之前相同。

b7.inp

```
b7      # Result file name
B 7     # Cluster file name
cube 3 3 2 # Structure types
30      # Maximal number of calculations
>>>>
xyz2gaussian `pwd`/optfile $inp$ > $xxx$.gjf
g09 < $xxx$.gjf > $xxx$.log 2>/dev/null
gaussian2xyz $xxx$.log > $out$
rm $xxx$.gjf $xxx$.log
>>>>
nodes
```

注意使用绝对
路径名

nodes

```
6
node01
node01
node02
node02
node03
node03
```

- 普通运行：nohup isomer b7.inp > b7.out &

ABCluster连接作业系统

- 使用作业系统时，则不需要显式地SSH计算节点。如果想并行6个计算，则可以把nodes的6个地址改为本控制节点的主机名(可以通过hostname查看，或者直接写作localhost)

b7.inp

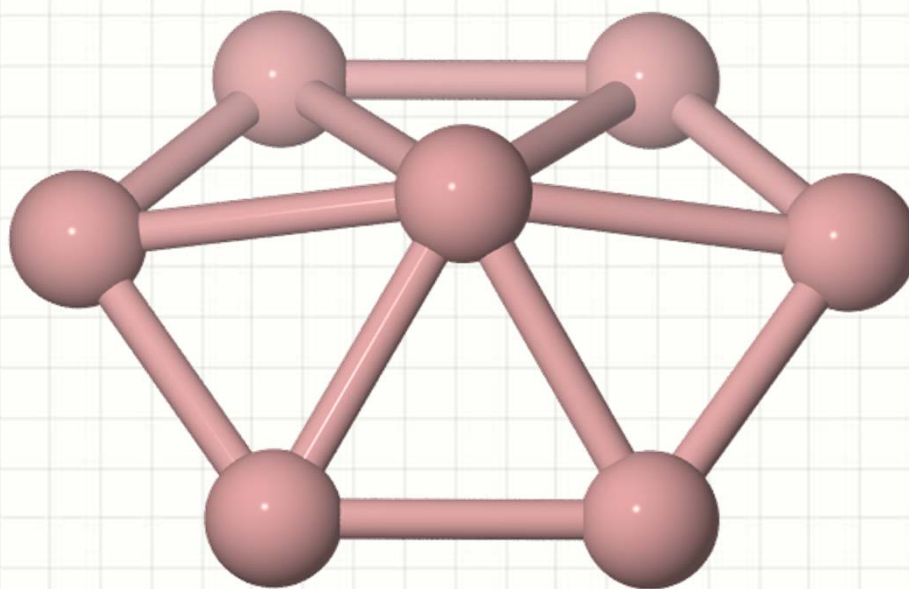
```
b7      # Result file name
B 7     # Cluster file name
cube 3 3 2 # Structure types
30      # Maximal number of calculations
>>>>
xyz2gaussian `pwd`/optfile $inp$ > $xxx$.gjf
sed -i '11c fn=$xxx$' `pwd`/submit.pbs
`pwd`/jobhold.sh
gaussian2xyz $xxx$.log > $out$
rm $xxx$.gjf $xxx$.log
>>>>
nodes
```


nodes

```
6
localhost
localhost
localhost
localhost
localhost
localhost
```


提交

- 在控制节点上直接运行：
`nohup isomer b7.inp > b7.out &`
- 这样isomer就会每次提交6个作业来计算了。





尾声



通过上述介绍，读者可以利用isomer和lego调用作业管理系统调用Gaussian或者其他程序。

本教程内容将会加入下一版的Manual中。

对于最新的版本和应用，可参见ABCcluster的网站：

www.zhjun-sci.com

如有问题和建议可以联系：

zhangjunqcc@gmail.com



谢谢！