
如何使用命令行方式提交 MS 的计算作业

Castep:

1. 打开 MS 界面, 建立相关模型, 并且在 Castep 的 Calculation 对话框中设置相关参数;
2. 不要单击 Run 进行 Castep 计算工作, 而要在 Calculation 对话框中选择 Files -> Save Files, 此时会在 Project Explorer 中出现一个新的目录, 其中包括了使用命令行运行 Castep 的输入文件;
3. 使用 Windows 的文件管理器进入该目录(相关 Project 名称.files\Documents 下), 能够看到所需要的输入文件。

注意, 由于 castep 计算所需的.cell 文件是隐藏文件, 因此需要在“工具|文件夹选项”中选择“显示隐藏文件”。

将以下文件拷贝到 SGI Prism 的相关路径下,

.cell、.param。

此外, 需要将计算所需的赝势文件拷贝到 SGI Prism 相关路径下。

(在 CASTEP | Calculation | Electronic 的 more 下 Potential 中可以看到所使用的赝势文件, 该文件的路径在 Windows 系统的 <MS 安装路径>\MS Modeling 3.2\Data\Resources\Quantum\Castep\Potentials 中, 请将所出现的赝势文件全部拷贝到 SGI Prism 机器上, 否则会导致计算失败)

4. 使用帐号登陆到 SGI Prism 下, 进入相关文件夹 (文件夹中包括刚才所有的文件), 并执行命令:

```
> chmod 777 *.*
```

```
> /home/msi/ms/CASTEP/bin/RunCASTEP.sh -np n seedname
```

注: -np 表示使用多 CPU 进行并行运算;

n 表示所使用的 CPU 数目

seedname 表示计算作业的名称, 例如相关参数文件为 Al.param, 则 Seedname 为 Al, 不带后缀名

5. 计算完成后, 请将该目录中所有的文件下载到本地机器上, 并放到刚才在 Visualizer 下新建的目录中;
6. 在 Visualizer 的 Project Explorer 中单击右键, 选择刷新, 即可看到刚才所有计算得到的结果, 并可在 MS 中进行分析。

DMol³

1. 打开 MS 界面, 建立相关模型, 并且在 DMol 的 Calculation 对话框中设置相关参数;
2. 不要单击 Run 进行 DMol³计算工作, 而要在 Calculation 对话框中选择 Files -> Save Files, 此时会在 Project Explorer 中出现一个新的目录, 其中包括了使用命令行运行 DMol³的输入文件;
3. 使用 Windows 的文件管理器进入该目录(相关 Project 名称.files\Documents 下), 能够看到所需要的输入文件。

注意, 由于 DMol³ 计算所需的.car 和.mdf 文件是隐藏文件, 因此需要在“工具|文件夹选项”中选择“显示隐藏文件”。

将以下文件拷贝到 SGI Prism 的相关路径下，

.car、.mdf、*.kpoints、*.input。

4. 使用帐号登陆到 SGI Prism 下，进入相关文件夹（文件夹中包括刚才所有的文件），并执行命令：

```
> chmod 777 *.*
```

```
> dos2unix *.* (将 ASCII 码格式文件转换为 UNIX 格式)
```

```
>/home/msi/ms/DMol3/bin/RunDMol3.sh -np n seedname
```

注：-np 表示使用多 CPU 进行并行运算；

n 表示所使用的 CPU 数目

seedname 表示计算作业的名称，例如相关参数文件为 Al.input，则 Seedname 为 Al，不带后缀名

5. 计算完成后，请将该目录中所有的文件下载到本地机器上，并放到刚才在 Visualizer 下新建的目录中；
6. 在 Visualizer 的 Project Explorer 中单击右键，选择刷新，即可看到刚才所有计算得到的结果，并可在 MS 中进行分析。

Discover

1. 打开 MS 界面，建立相关模型，并且在 Discover 的 Setup 对话框中设置相关参数；
2. 不要单击 Run 进行 Discover 计算工作，而要在 Minimizer 或者 Dynamics 对话框中选择 Files -> Save Files，此时会在 Project Explorer 中出现一个新的目录，其中包括了使用命令行运行 Discover 的输入文件；
3. 使用 Windows 的文件管理器进入该目录(相关 Project 名称.files\Documents 下)，能够看到所需要的输入文件。

注意，由于 Discover 计算所需的 car 和 mdf 文件是隐藏文件，因此需要在“工具|文件夹选项”中选择“显示隐藏文件”。

将以下文件拷贝到 SGI Prism 的相关路径下，

如果进行 MM 计算，那么需要 *.car、*.inp 文件。

如果进行 MD 计算，那么需要 *.car、*.mdf、*.inp 文件。

4. 使用帐号登陆到 SGI Prism 下，进入相关文件夹（文件夹中包括刚才所有的文件），并执行命令：

```
> chmod 777 *.*
```

```
> dos2unix *.* (将 ASCII 码格式文件转换为 UNIX 格式)
```

```
>/home/msi/ms/Discover/bin/RunDiscover.sh -np n seedname
```

注：-np 表示使用多 CPU 进行并行运算；

n 表示所使用的 CPU 数目

seedname 表示计算作业的名称，例如相关参数文件为 Al.inp，则 Seedname 为 Al，不带后缀名

5. 计算完成后，请将该目录中所有的文件下载到本地机器上，并放到刚才在 Visualizer 下新建的目录中；
6. 在 Visualizer 的 Project Explorer 中单击右键，选择刷新，即可看到刚才所有计算得到的结果，并可在 MS 中进行分析。

Amorphous Cell

同 Discover

Reflex

目前无法从命令行方式进行计算。

Neotrident