LASP使用入门8-编写脚本使用外部程序计算能量

Lasp.in

- potential external使用外部程序计算能量
- External.script lasp.external.sh

 计算能量的外部脚本文件名,在作业目录中

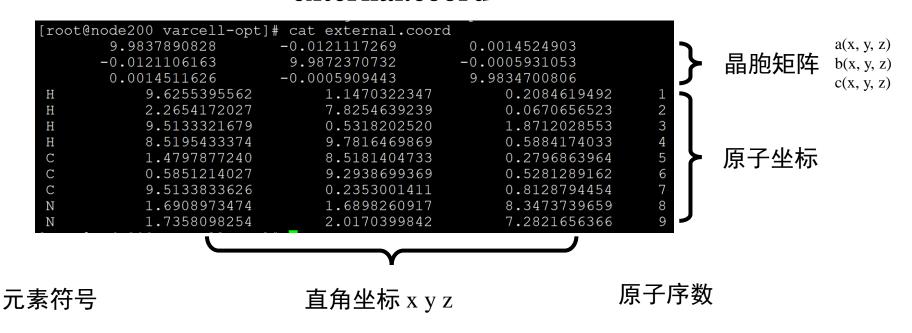
 (默认为lasp.external.sh)
- 使用方法:串行运行lasp程序 \$/xxx/xxx/xx/lasp
- 外部程序的并行运算在lasp.external.sh中实现

8/6/2018

LASP使用入门8-编写脚本使用外部程序计算能量

当使用 "external" 关键词时,程序会输出external.coord文件,该文件记录了结构信息。 格式如下所示,单位为Å。

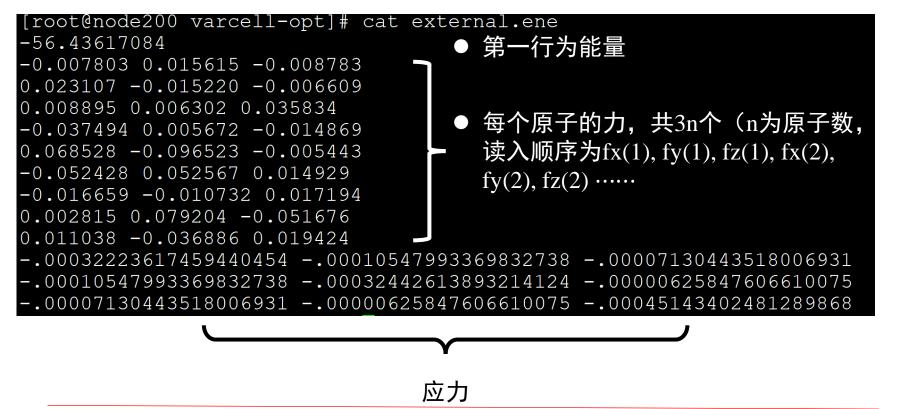
external.coord



版权所有:上海鞍面智能科技有限公司 2018--2028 ver 1.00

外部程序执行完之后,应该生成 "external.ene"文件,该文件记录了能量,力和应力。 格式如下。能量单位为eV,力的单位为eV/Å,应力单位为e $V/Å^3$ 。LASP将读入该文件。

external.ene



lasp.external.sh脚本实例1: 调用VASP, 该脚本在Example/lasp-external/external-vasp

```
#!/bin/bash
---Provide any necessary defination here ----
exec='/home7/bin/vasp-original-node200'
nprocs=`cat ./nprocs
machinefile=./machinefile
---Prepare the "parameter" input file here ----
if [ ! -f INCAR.lasp.external ]; then
 cp INCAR INCAR.lasp.external
                           INCAR.lasp.external
 sed -i '/ISTART/d'
 sed -i '/ICHARG/d'
                           INCAR.lasp.external
 sed -i '/LWAVE/d'
                           INCAR.lasp.external
 sed -i '/LCHARG/d'
                           INCAR.lasp.external
 sed -i '/IBRION/d'
                           INCAR.lasp.external
 sed -i '/NSW/d'
                           INCAR.lasp.external
 sed -i '/ISIF/d'
                           INCAR.lasp.external
 sed -i '/ISYM/d'
                           INCAR.lasp.external
                           INCAR.lasp.external
 sed -i '/NWRITE/d'
                           INCAR.lasp.external
 echo "ISTART = 1" >>
                           INCAR.lasp.external
 echo "LWAVE = .TRUE." >> INCAR.lasp.external
 echo "LCHARG = .TRUE." >> INCAR.lasp.external
 echo "IBRION = 0" >>
                           INCAR.lasp.external
 echo "ISYM = 0" >>
                           INCAR.lasp.external
 echo "NSW = 0" >>
                           INCAR.lasp.external
 echo "ISIF = 3" >>
                           INCAR.lasp.external
 echo "NWRITE = 2" >>
                           INCAR.lasp.external
cp -f INCAR.lasp.external INCAR
#---Prepare the "coordinate" input file here ---
echo " For LASP external use" >POSCAR
echo "1.0000" >>POSCAR
```

- 脚本执行程序
- 定义必要的变量,比如VASP的地址。VASP 并行计算的核数,machinefile等。
- 对输入文件的参数部分进行调整,总体来说要实现如下功能:
 - 1.重用上次的电子结构进行SCF计算
 - 2. 进行单点计算
 - 3. 如果要对晶胞进行优化需要计算应力
 - 4. 进行必要的输出(能量,力,应力)
- 如果准备好的INCAR中已经满足上述要求, 这一部分原则上可以为空白

LASP使用入门8-编写脚本使用外部程序计算能量

```
#---Prepare the "coordinate" input file here -
echo " For LASP external use" >POSCAR
echo "1.0000" >>POSCAR
head -3 external.coord >>POSCAR
a=(`qrep VRHFIN POTCAR |awk '{print $2}'|sed 's/=//'|sed 's/://'`)
echo ${a[*]} >> POSCAR
\rm -f lasp.coord.tmp
for i in ${a[*]}
 b[$j]=`grep "$i " external.coord|wc -l`
 grep "$i " external.coord >>lasp.coord.tmp
 let "j=$j+1"
echo ${b[*]} >>POSCAR
echo "C" >>POSCAR
cat lasp.coord.tmp|awk '{print " "$2" "$3" "$4}' >>POSCAR
#---Run the executable file here -----
if [ "$1" == "T" ]; then \rm -f CHGCAR WAVECAR; fi
mpirun -machinefile ./machinefile -np $nprocs $exec
```

- 利用external.coord文件生成VASP的 结构输入文件POSCAR
- 需要注意的是POSCAR是根据POTCAR的元素顺序排序的,因此或者在准备lasp.str文件时就预先调整好原子顺序,或者在生成POSCAR时要记住原子在external.coord中的顺序。

 调用VASP进行单点能计算。优化晶胞会导致VASP的计算误差,因此LASP认为有必要初始化电子结构计算时会在第一参数位置输出"T",此时应删除 CHGCAR和WAVECAR。("\$1"=="T")

LASP使用入门8-编写脚本使用外部程序计算能量

```
#---Extract energy here ------
grep TOTEN OUTCAR |tail -1|awk '{print $5}' >external.ene
#---Extract force here ------
for ((i=1;i<=\$n;i++))
 echo f.$i.f >>external.ene
let "n=\$n+1"
qrep -A$n TOTAL-FORCE OUTCAR |sed 1,2d|awk '{print $4" "$5" "$6}'>lasp.force.tmp
for i in `cat lasp.coord.tmp|awk '{print $NF}'`
 f=`sed -n "$j"p lasp.force.tmp`
 sed -i "s/f.$i.f/$f/" external.ene
done
#---Extract stress here ------
v=`qrep "volume of cell" OUTCAR|tail -1|awk '{print $NF}'`
for i in \{0...5\}
 c[\$i] = `echo "\$\{c[\$i]\}/\$v"|bc -1`
echo \{c[0]\} \{c[3]\} \{c[5]\} >>external.ene
echo $\{c[3]\} $\{c[1]\} $\{c[4]\} >> external.ene
echo ${c[5]} ${c[4]} ${c[2]} >>external.ene
```

- 从OUTCAR中提取能量
- 从OUTCAR中提取力
- 注意如果之前有调整原子顺序,则需要调整回来。

· 从OUTCAR中提取应力

lasp.external.sh脚本实例1: 调用Gaussian, 该脚本在Example/lasp-external/external-gaussian

```
#!/bin/bash
#---Provide any necessary defination here --
exec='a09'
inputfile='gaussian.inp'
outputfile='gaussian.out'
charge=0
multi=1
#mpirun=''
#machinefile=''
#nprocs=''
#---Prepare the "parameter" input file here --
cat $inputfile.pre >$inputfile
a=`grep '%chk' $inputfile.pre|sed 's/=/ /g'|awk '{print $2}'`
if [ -f "$a" ]; then echo "Guess=Read">>$inputfile;fi
echo "lasp external" >>$inputfile
echo "" >>$inputfile
echo $charge " " $multi >>$inputfile
#---Prepare the "coordinate" input file here ----
sed 1,3d external.coord|awk '{print $1,$2,$3,$4}' >>$inputfile
echo "" >>$inputfile
if [ -f "$inputfile.after" ]; then
 cat $inputfile.after >>$inputfile
echo "" >>$inputfile
echo "" >>$inputfile
```

将体系的电荷和多重度定义在这里

- 由于gaussian的参数和结构都定义在 同一个文件中。这里将输入文件拆 开成3部分:
- 1. 头部为gaussian.inp.pre, 预先准备好
- 中部为电荷、多重度和结构、动态 生成
- 3. 尾部为gaussian.inp.after,包含其他 信息,如溶剂化参数。如果没有可 以不准备。

LASP使用入门8-编写脚本使用外部程序计算能量

- 注意进行单位转换
- · Gaussian无应力计 算,可以空白。

关于队列系统:如果使用队列系统进行作业管理,则需要从队列系统获得资源信息并传递给执行脚本,以超算系统中常用的PBS队列系统为例:

```
#!/bin/bash -x
#PBS -1 nodes=1:ppn=20
#PBS -j oe
#PBS -N lasp-pbs
#PBS -q example
cd $PBS O WORKDIR
cat $PBS NODEFILE | wc -1 >./nprocs
cat $PBS NODEFILE
                    >./machinefile
exec=/xxx/xx/xx/lasp
./$exec
```

• 向队列系统申请资源,该资源用于外部程序(如VASP, SIESTA)的并行运算

- 将总核数记录下来
- 将分配的节点记录下来
- 定义LASP可执行文件的路径
- 串行运行LASP
- nprocs, machinefile用于lasp.external.sh中执行mpirun(见P4, P5)

注意事项:

- 1. 应力和力的符号!有些代码输出的梯度,力为梯度的负数!最好自己测试一下。
- 2. 注意单位转换
- 由于硬盘读写速度远慢于cpu运算速度,因此该方法不适用于运算量小的力场计算。
- 4. 由于是从输出文件中读取能量和力,因此精度受输出格式的影响。
- 5. 可以用任何语言实现,如python,fortran,c++等。如果是脚本语言,为以防万一 需在第一行定义脚本运行程序。