

\*推荐项目管理方式:

- VASP Studio 和 Material Studio 共享同样的目录, 指定一个超算上的目录, 一一对应。

\*注意事项:

- 随时按 Ctrl+S 保存!

## 目录

Notice .....	2
投 Job 流程 .....	2
1.创建或者打开一个项目 .....	2
2.准备创建 INCAR 和配置信息等库文件 .....	4
3.创建 Text File Lib.....	5
4.创建 File Lib .....	6
5.创建 TF Function Lib .....	7
6.创建 Key Value Lib .....	8
7.搭建一个投 Job 的配置 .....	9
8.工作窗口和状态介绍.....	11
9.状态流程总述.....	12
10.批量投 job .....	12
任务管理流程.....	13
1.文件关联.....	13
2.信息提取和结构导出.....	16
3.和 Material Studio 协作.....	19
4.用好 Mark.....	20
5.文件删除.....	21
流水线的使用方式 .....	21
1.完成一个 BEEF 动力学计算项目的文件准备, 与 CRN 无缝衔接 .....	21
目前遇到的 bug 和解决方法: .....	24

## Notice

- 1.软件目前只支持 ssh 登录 Linux 系统进行投 job
- 2.只支持利用 Material Studio 制作结构，并投 VASP 的 job
- 3.建议边看本文档边操作测试，完全理解所有内容后进行充分测试再进行正式的操作，如有 bug，请通过 github-issues 提交或 fork 项目，自行修复后 pull request
- 4.除了投 job 之外，任何配置创建和信息提取，job 状态改变的操作都不会自动保存，有小概率软件崩溃，所以请务必随时 Ctrl+S 保存项目
- 5.软件采用左上角菜单栏下面的竖排选项卡切换工作区域。

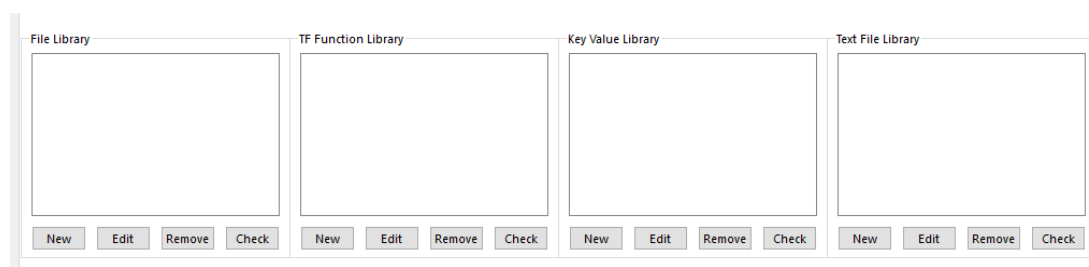
## 投 Job 流程

### 1.创建或者打开一个项目

Project-NewProject，选择一个 xsd 文件的嵌套目录，推荐 Material Studio 项目的 Documents 目录



## 2.准备创建 INCAR 和配置信息等库文件



库文件一共有 4 种，分为：Text File Lib，File Lib，TF Function Lib 和 Key Value Lib。

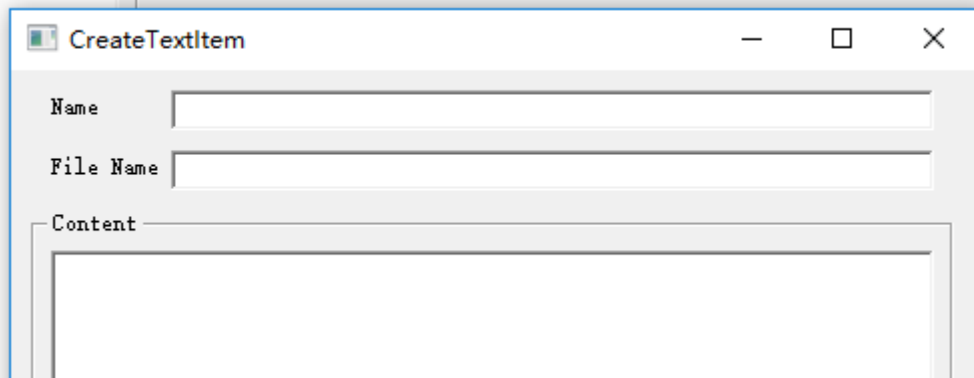
投 job 所需要的 INCAR，POSCAR 等文本文件在 Text File Lib 中创建，其中 POSCAR 和 fort.188（如果需要）文件有固定模板，后文会给出。

如果不是文本文件或者是 Linux 的脚本文件（不适合在 Windows 下作为文本文件），则需要创建 File Lib，File Lib 会让用户选择文件路径，投 job 时这个文件会复制到 VASP 运行文件夹中。

TF Function Lib 是 POSCAR 中设定 TTT FFF 条件的函数，后文讲解。

Key Value Lib 是固定的配置信息，比如设置 POTCAR 路径，投 job 命令等，后文讲解。

创建窗口一般是这样：

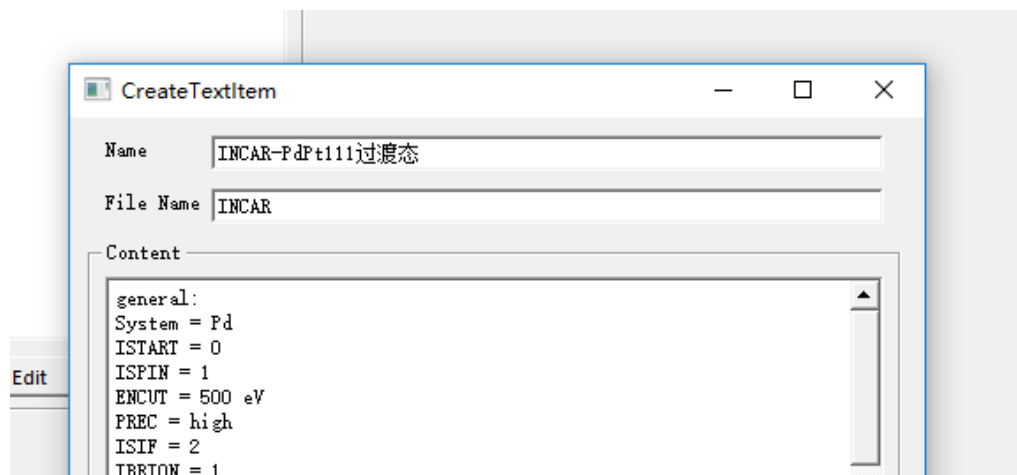


每一个 Lib 的创建窗口第一个都是 Name，是引用库文件所用的键值，所以所有 Lib 文件的 Name 都不能出现重名（出现重名会提示）

目前 check 按钮无效

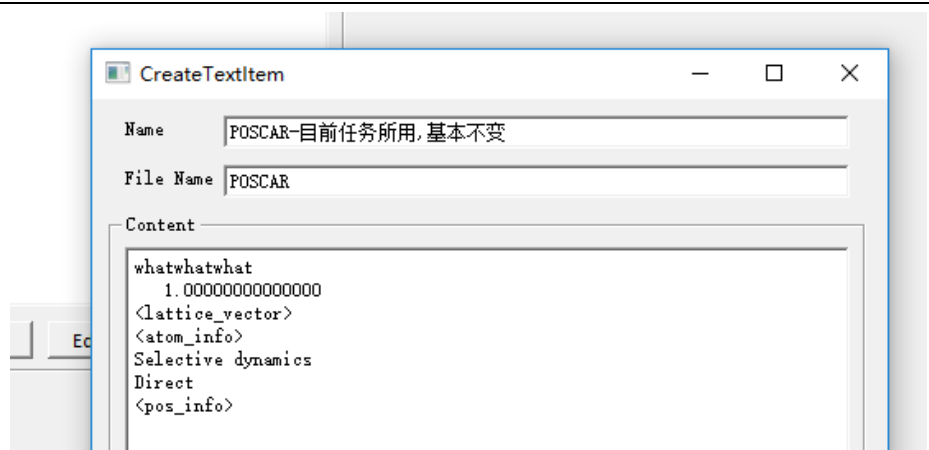
### 3.创建 Text File Lib

这里的创建的项目，在投 job 时会创建一个内容为 Content，名为 File Name 的文件放在 VASP 运行的文件夹中（所以 File Name 要设置正确），创建例子：



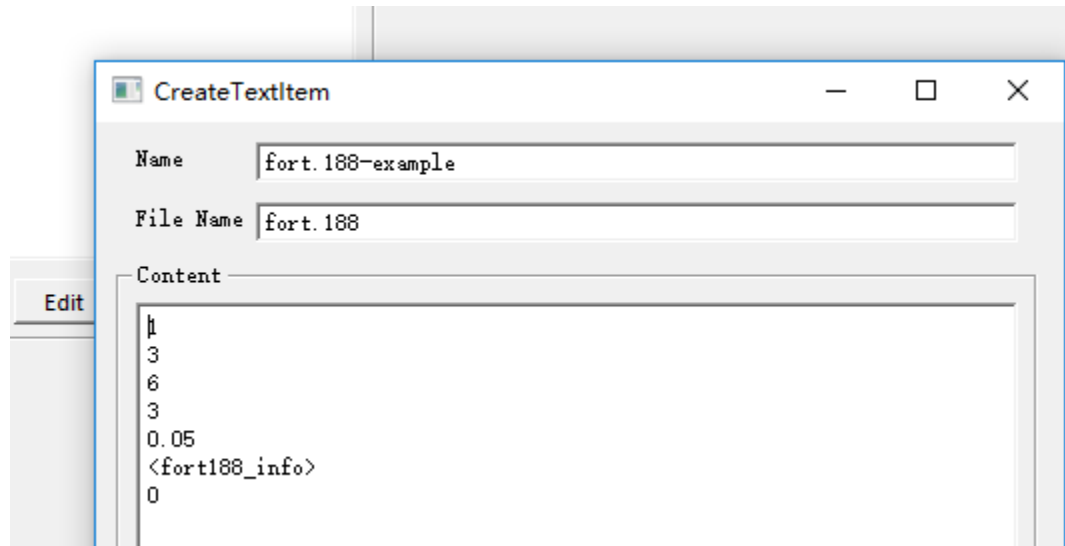
同样按照这个方法创建 INCAR 和 KPOINTS。

POSCAR 是比较固定内容，需要留<pos\_info>等占位符：



whatwhatwhat  
1.000000000000000  
<lattice\_vector>  
<atom\_info>  
Selective dynamics  
Direct  
<pos\_info>

如果使用有 fort.188 的过渡态，fort.188 的文件同样需要留出占位符。

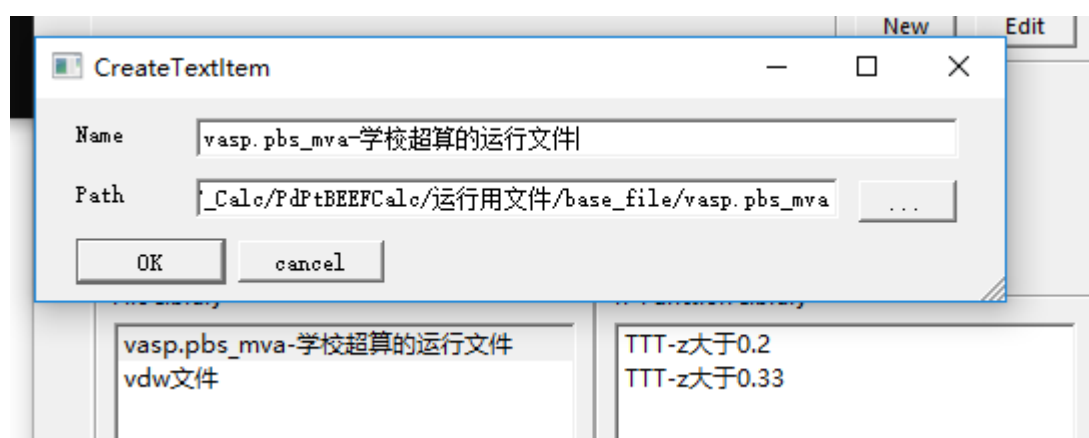
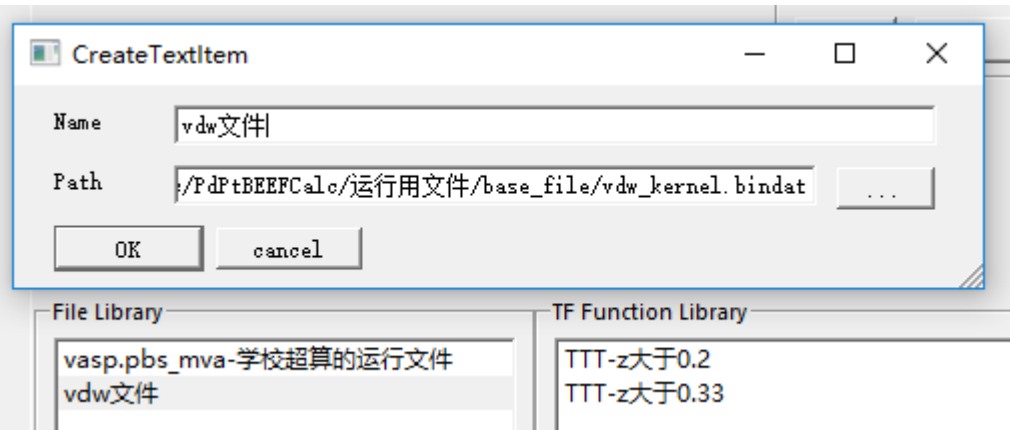


除了<...>占位符的内容和位置，其他可以根据需要随意改

#### **4.创建 File Lib**

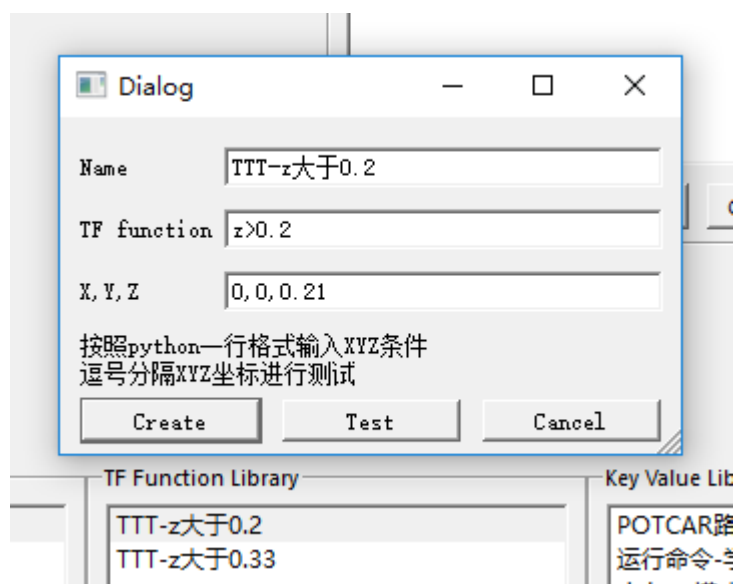
选择一个二进制文件或者.sh 等脚本文件，.sh 文件之所以是 File Lib

而不是 Text File Lib 是因为 windows 下创建.sh 不兼容。



## 5.创建 TF Function Lib

用于在 POSCAR 中判断 TTT 还是 FFF，比如：



TF function 接受  $x y z$  三个变量，需要符合 python 语法，比如  $x > 0.5$  or  $y < 0.1$  or  $z > 2$ ，之后可以在 X,Y,Z 中输入坐标，用英文逗号分隔，按 Test 测试是 TTT 还是 FFF，测试好后点 Create 创建。

## 6.创建 Key Value Lib

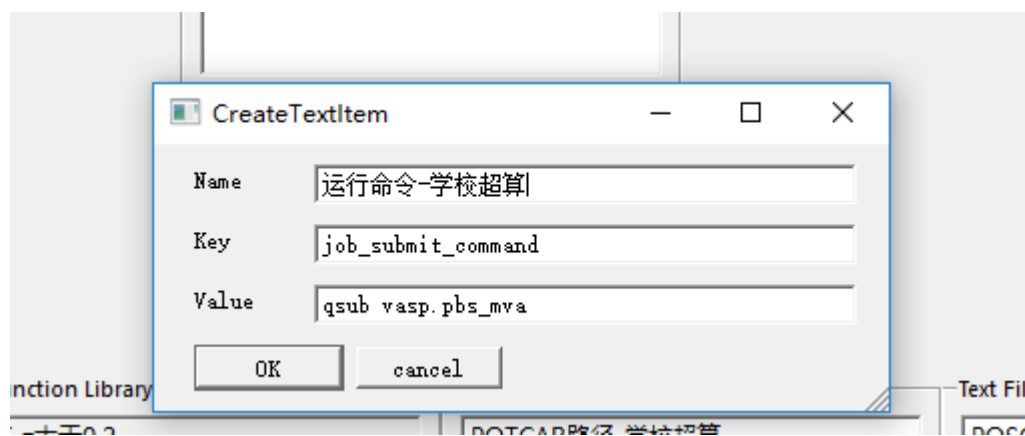
KeyValue Lib 存放一些不是特别通用的配置设定，能够提高软件的扩展性。使用 Key->Value 了，来进行配置，一般对 VASP 来讲，**必须创建**的 Key Value 如下：

1.在 Key 中填入 remote\_base\_POTCAR\_dir，然后 Value 为自己的 POTCAR 路径



2.Key 中填入 job\_submit\_command，给一个自己适用的执行命令，一般为 qsub ...，或者 sh ...



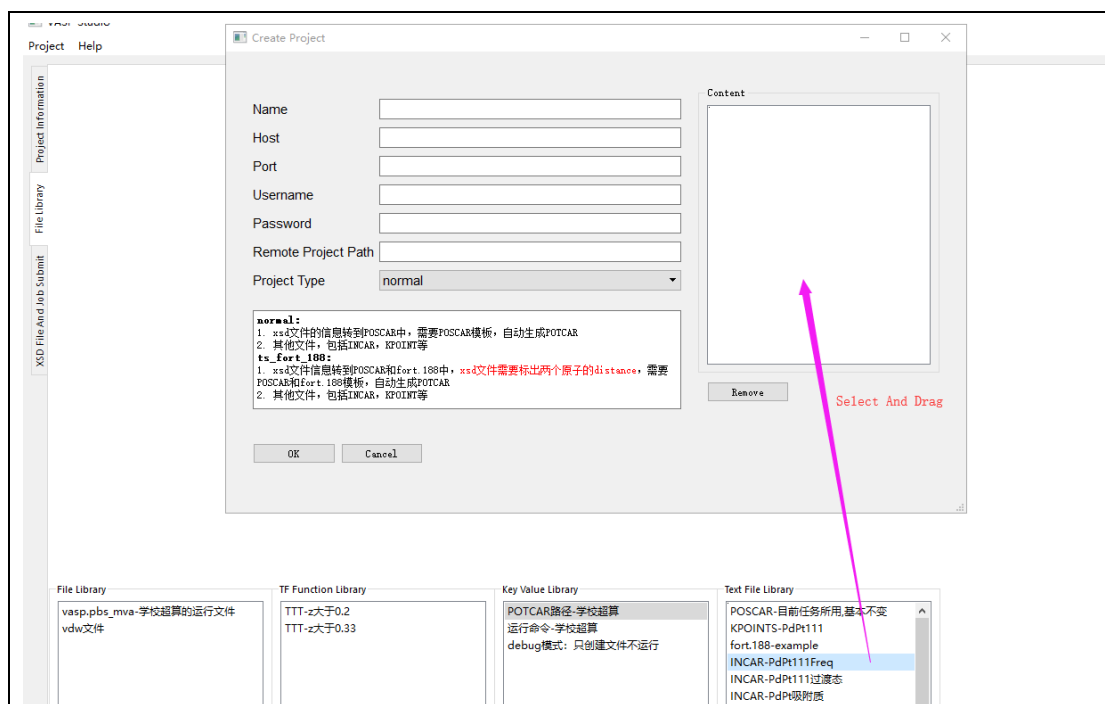


## 7. 搭建一个投 Job 的配置

下面这个是创建完成所有 Lib 文件的一个例子：



这些库文件可以看作是基础组件，可以任意创建，之后创建 Submit Job 配置文件时会像这样引用这些 Lib，通过拖动把 Lib 放到 content 中：



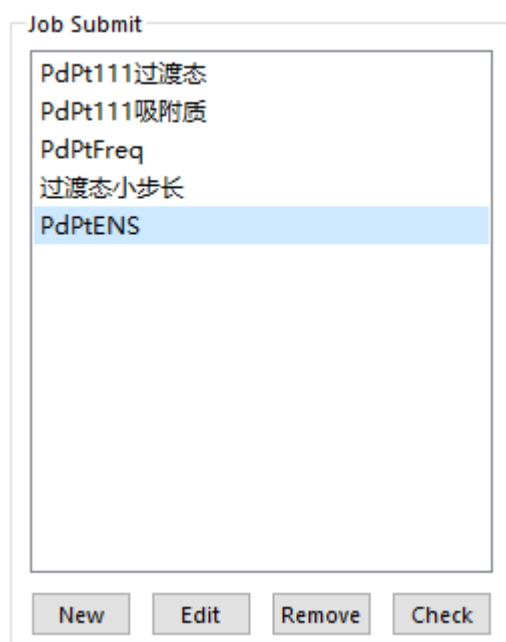
其他设置, Host, Port, Username 和 Password 都是 ssh 和 sftp 登录的必要信息, Remote Project Path 是 Linux 上创建 VASP 文件夹的顶端文件夹, 之后所有 Job 会嵌套地创建在这里面, **最好每种任务单独给一个空文件夹, 比如过渡态为 vsJob/TS/, 频率为 vsJob/Freq/等, 否则可能出现同名覆盖现象**。Project Type 大部分情况是 normal, 如果使用 fort.188 方式求过渡态, 就选择另一个。

根据任务不同, Job 配置文件中的 Content 不同, 确保添加够了必要的 Content:, 比如:

```
Content
POTCAR路径-学校超算
运行命令-学校超算
INCAR-PdPt吸附质
POSCAR-目前任务所用,基本不变
KPOINTS-PdPt111
vdw文件
vasp.pbs_mva-学校超算的运行文件
TTT-z大于0.2
```

通过排列组合的方式创建其他适用于不同任务的配置, 比如创建成

这样：



## 8. 工作窗口和状态介绍

Project Help										
File	Status	Type	Mark	Energy	Final RMS	Work Node	Job	Match State		
PLH-COH_OConvergence.xsd	Submitted	Convergence - VASP	None	-120.62434008	0.04774	160821.no...	PdPtENS	None		submit_job
PLH-COH.xsd	Convergence	Artificial Structure				146505.no...	PdPt111t...	41/40		PdPt111吸附质
PLH-CO_Convergence.xsd	Freq Check Pass	Convergence - VASP				152629.no...	PdPtFreq	None		local_vasp_dir
PLH-CO_2_Convergence.xsd	Freq Check Pass	Convergence - VASP				152628.no...	PdPtFreq	None		energy
PLH-CO_2.xsd	Convergence	Artificial Structure		-117.23806569	0.04591	152127.no...	PdPt111t...	40/39		final_RMS
PLH-CO_OConvergence.xsd	Submitted	Convergence - VASP	None			160822.no...	PdPtENS	None		type
PLH-CO.xsd	Convergence	Artificial Structure		-117.34375079	0.04935	152128.no...	PdPt111t...	40/39		Artificial Structure
PLH-CHOH_OConvergence.xsd	Freq Check Pass	Convergence - VASP				146666.no...	PdPtFreq	None		status
PLH-CHOH_Convergence.xsd	Submitted	Convergence - VASP	None			160823.no...	PdPtENS	None		Not Submit
PLH-CHOH.xsd	Convergence	Artificial Structure		-124.20088375	0.04800	146506.no...	PdPt111t...	42/41		note
PLH-CHO_N1_Convergence.xsd	Freq Check Pass	Convergence - VASP				152630.no...	PdPtFreq	None		
PLH-CHO_N1.xsd	Convergence	Artificial Structure		-120.41945681	0.04854	152132.no...	PdPt111t...	40/40		
PLH-CHO_Convergence.xsd	Freq Check Fail	Convergence - VASP				146664.no...	PdPtFreq	None		
PLH-CHO_OConvergence.xsd	Submitted	Convergence - VASP	None			160824.no...	PdPtENS	None		

窗口最上边的 header 是可以调节大小的，同时点击可以进行排序，有 File, Status, Type, Mark 等信息。

Status 目前有 NotSubmitted, Submitted, FinishedAndLinked, NotConvergence 和 Convergence 这几种

Type 有默认的 Artificial Structure, 以及 NotConvergence 和 Convergence 这几种。

## 9.状态流程总述

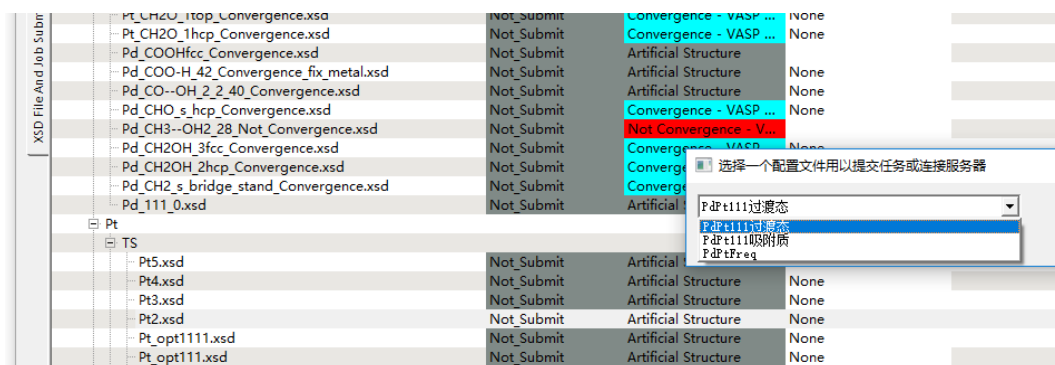
这里先总述状态改变的条件，之后会具体讲解

如果是新文件，Status 是 NotSubmitted，如果投了 Job，本地端无 bug，Status 会变为 Submitted，跑完了 Job 下载到本地后，使用 Link 关联相应的 VASP 文件夹，Status 变为 FinishedAndLinked，提取 RMS 的信息，会要求输入一个阈值，如果 RMS 小于阈值（收敛），则 Status 变为 Convergence，否则为 NotConvergence

不管有没有收敛，都可以导出结构，如果导出结构成功，Type 会变为 Convergence 或者 NotConvergence 用来和人为摆出的结构区分，因为 Convergence 的结构之后还会用来投其他 job(如计算频率等)，所以这里和 Status 区分出来。

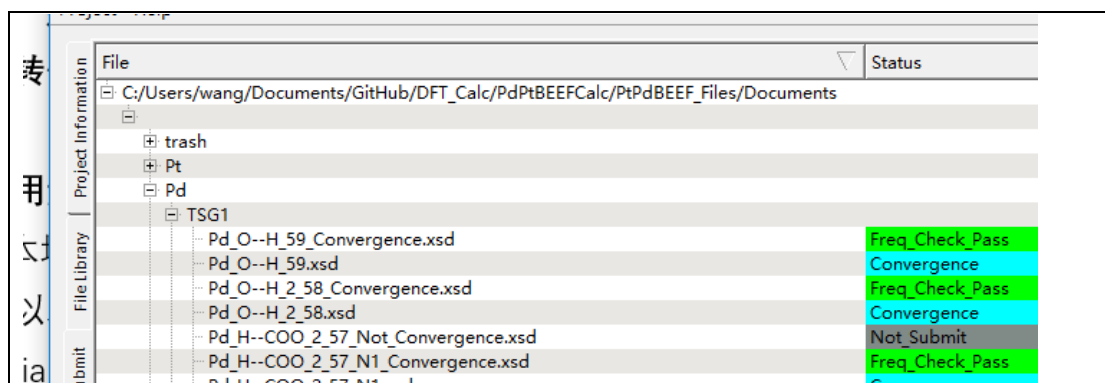
## 10.批量投 job

创建完成之后，转到第三个选项框，选中（可以使用 ctrl+A，ctrl，shift 等）需要投的 job，右键选择 submit job，选择一个配置投 job



接着确认一下投的内容，弹出提示窗口点掉，等待投 job，如果成功投 job，WorkNode 会显示所投 job 的节点

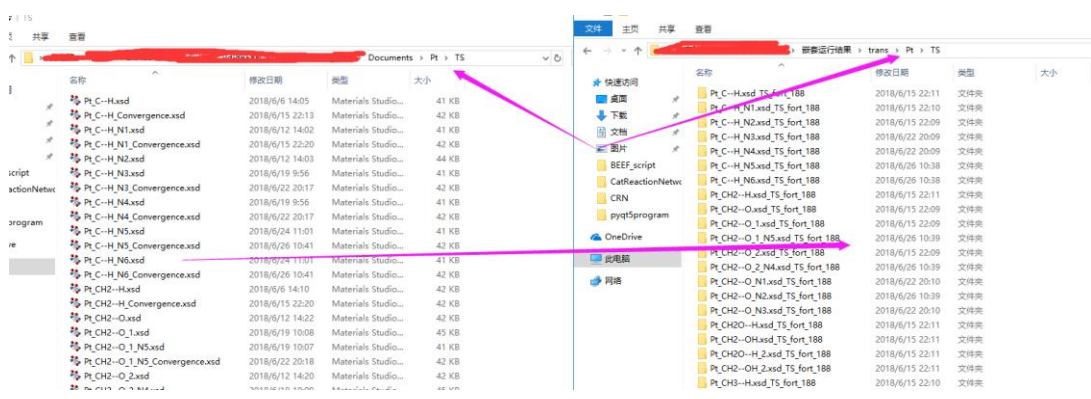




然后我把 Linux 上的 vsJob 下载到:

C:\Users\wang\Desktop\vsJob 即可

C:/Users/wang/Documents/GitHub/DFT\_Calc/PdPtBEEFCalc/PtPdBEEF\_Files/Documents 里面的嵌套结构要和 vsJob 一样, 前者里面有.xsd 文件, 后者里面都是对应的.xsd\_...的文件夹, 装着 OUTCAR 等信息。



之后便可以创建 Link, 将 xsd 文件和 VASP 项目文件夹 Link 起来, 首先选中需要 Link 的 xsd 项目, 右键点击 Local Link-By Path, **By Path** 的意思是指相对路径是完全一样的 (VASP 文件夹.xsd 及其后面的内容可以忽略), 比如需要 Link 一个 Documents/Pd/TSG1/C.xsd 的项目, 然后 VASP 文件夹在 Freq/Pd/TSG1/C, 于是就可以选择 Freq 文件夹。

Pt_H-CHO_Convergence.xsd	Freq_Check_Fail	Convergence - \
Pt_H-CHO_0Convergence.xsd	Submitted	Convergence - \
Pt_H-CHO.xsd	Convergence	Artificial Structur
Pt_H--CH2OH_N1_Convergence.xsd	Freq_Check_Pass	Convergence - \
Pt_H--CH2OH_N1_0Convergence.xsd		Convergence - \
Pt_H--CH2OH_N1.xsd		Artificial Structur
Pt_H--CH2OH_Convergence.xsd		Convergence - \
Pt_H--CH2OH.xsd		Artificial Structur
Pt_H--CH2O_4.xsd		Artificial Structur
Pt_H--CH2O_3_Convergence.xsd		ence - \
Pt_H--CH2O_3.xsd		Structur
Pt_H--CH2O_2_Convergence.xsd		Convergence - \
Pt_H--CH2O_2.xsd		Artificial Structur
Pt_H--CH2O.xsd	Not_Convergence	Artificial Structur
Pt_CO--H_N4.xsd	Submitted	Artificial Structur

Mark
Submit Job
Status
Local Link
Information
Structure
File

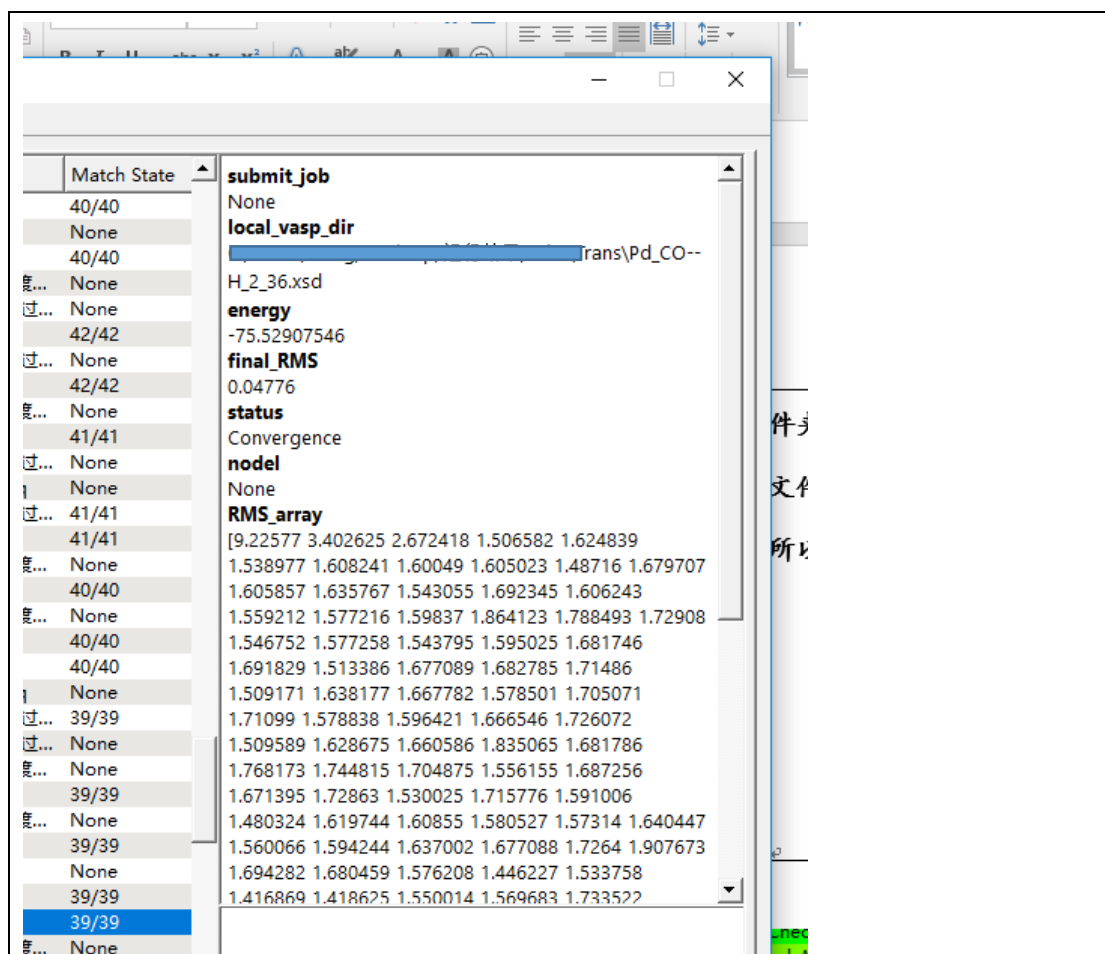
By Path
By Name

By Name 是指只要 xsd 文件名字和 VASP 文件夹名字一样就可以 Link, 但是如果重名就只会 Link 第一个, 所以不推荐, 除非文件名足够特殊。

Link 完成之后, 文件的状态是:

Pd_CO--O_3_39_Convergence.xsd	Freq_Check_Pass
Pd_CO--O_3_39.xsd	Finished_And_Linked

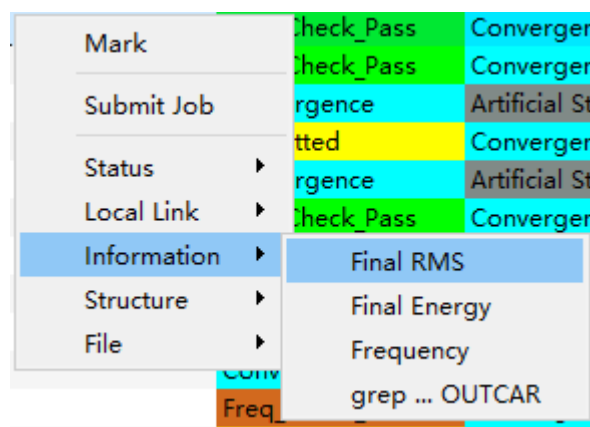
并且可以在右边看到 Link 的文件夹



如果 Link 过后修改了 Link 到的文件夹，那么需要重新 Link

## 2.信息提取和结构导出

Link 过后就可以右键选这些 Link 状态的项目，提取数据：



Final Energy 是最终的能量



Final RMS 是最终的收敛的力

Frequency 是频率，如果投的 job 是算频率的话

Final RMS 会让设置一个收敛阈值，一般是 0.05，收敛和不收敛的状态如下：

Convergence	Artificial Structure
Not Convergence	Artificial Structure

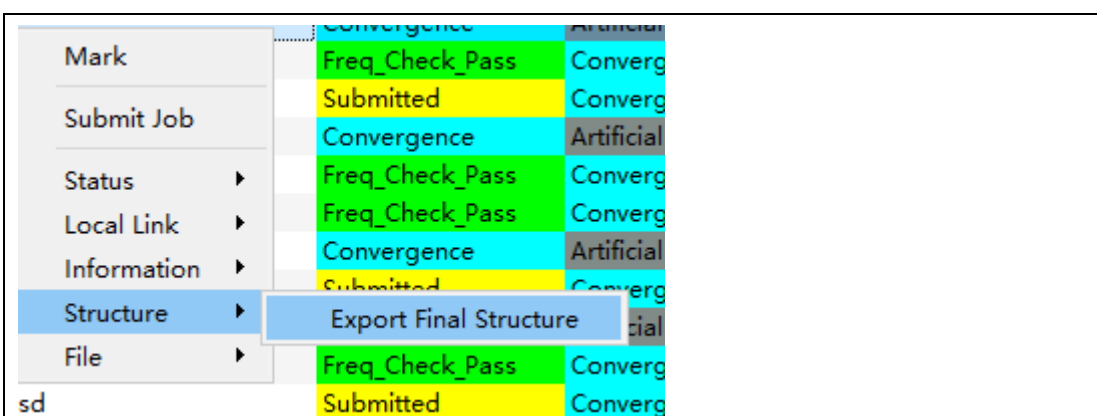
提取频率，会要求输入允许的频率数目，一般过渡态为 1，吸附质为 0，然后会得到频率的检测结果：

Not_Submit	Not Convergence - V...	
Convergence	Artificial Structure	
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...	
Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...	None
Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...	None
Submitted	Convergence - VASP ...	
Not_Submit	Not Convergence - V...	

提取这些过后，可以在右边看到实频虚频，每一步 RMS，energy 等信息：

Status	Type	Mark	Energy	Final RMS	Work Node	Job	Match State	submit job
Not Convergence	Artificial Structure		-86.08999420	0.06861	145821.no...	PdPt111过...	None	PdPt-过渡态Freq
Not Convergence	Artificial Structure			0.09270			42/42	local_vasp_dir
Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...		-82.58592483	0.33330	145997.no...	PdPt-过渡...	None	C:/Users/wang/Desktop/运行结果/谷歌运行结果/freq/
Convergence	Artificial Structure			0.04504			41/41	Pd/TSG1/Pd_CO--H_37_Convergence.xsd_normal
Submitted	Artificial Structure	None			149386.no...	PdPt111过...	None	energy
Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...				146667.no...	PdPtFreq	None	final RMS
Convergence	Artificial Structure		-82.59965946	0.04962	146448.no...	PdPt111过...	41/41	0.77103
Convergence	Artificial Structure		-82.58985499	0.04851			41/41	status
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...			0.45701	146109.no...	PdPt-过渡...	None	Freq_Check_Pass
Convergence	Artificial Structure		-80.85489653	0.04713			40/40	model
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...	Finished	-81.14862388	1.09703	145072.no...	PdPt-过渡...	None	146111.node1
Convergence	Artificial Structure	Finished	-81.15597522	0.04699			40/40	note
Convergence	Artificial Structure		-81.15524724	0.04958			40/40	type
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...				146354.no...	PdPtFreq	None	Convergence - VASP Opted Structure
Finished And Linked	Artificial Structure		-76.60075747	0.04300	145819.no...	PdPt111过...	39/39	real_freq
Not Convergence	Artificial Structure		-75.94733304	0.08930	145817.no...	PdPt111过...	None	[1476.665107, 1306.577287, 568.212648, 409.89273,
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...		-74.35035682	0.28256	144748.no...	PdPt-过渡...	None	393.312004, 365.736723, 216.97061, 146.733729]
Convergence	Artificial Structure		-74.35172410	0.04854			39/39	virtual_freq
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...			0.77103	146111.no...	PdPt-过渡...	None	[1551.357911]
Convergence	Artificial Structure		-75.49047157	0.04697			39/39	mark_text
Not Submit	Not Convergence - V...						None	RMS_array
Convergence	Artificial Structure		-72.66342647	0.17393			39/39	[0.038787 0.06193 0.103932 0.112041 0.158002
Convergence	Artificial Structure		-75.52907546	0.04776			39/39	0.151623 0.120179 0.208952 0.20195 0.298163
Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...		-75.58690600	0.67845	145071.no...	PdPt-过渡...	None	0.275192 0.733117 0.621748 0.087669 0.092929
Convergence	Artificial Structure		-75.59179115	0.03771			39/39	0.138605 0.137692 0.656905 0.771025]
Submitted	Artificial Structure	None	-69.68312823	0.04286	149364.no...	PdPt111过...	None	
Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...				146708.no...	PdPtFreq	None	

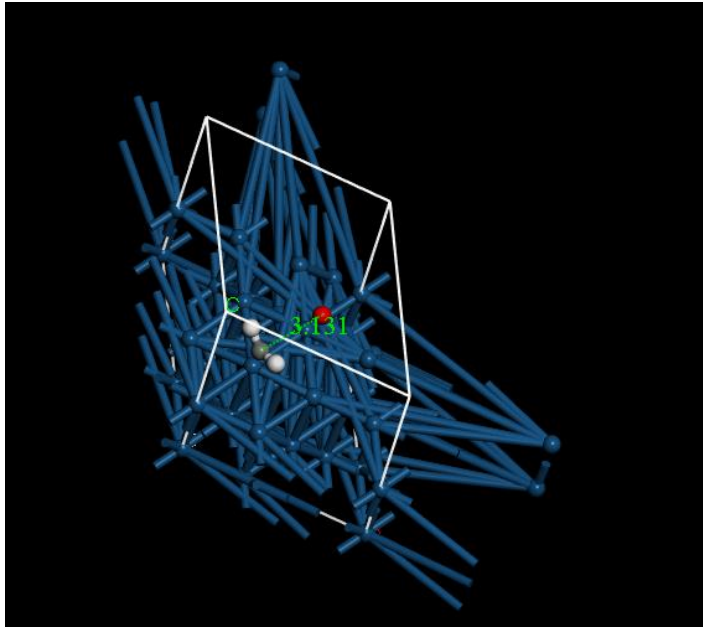
不管收没收敛，此时都可以右键 Structure-Export Final Structure 导出最终结构



此时新导出的文件是具有 Type 的（**注意 Type 的检测是根据文件后缀来的，所以希望或不希望出现某种 Type 可以通过更改后缀**），用于区分是导出的还是原来手摆的结构，**此时需要检查 Match State**，**Match State 需要大于 1**，才算作导出的结构是合理的。

rk Node	Job	Match State
950.no...	PdPtFreq	None
		43/42
		None
		None
375.no...	PdPtFreq	None
374.no...	PdPt111吸...	None
373.no...	PdPt111吸...	None
		42/41
		42/41
		42/41
		42/41
		None
		None
377.no...	PdPt111吸...	None
		41/40

导出的结构有时候键可能不正确，如：



但只要位置正确即可，可以通过 delete bonds 然后 Monitor bonding 重新构建

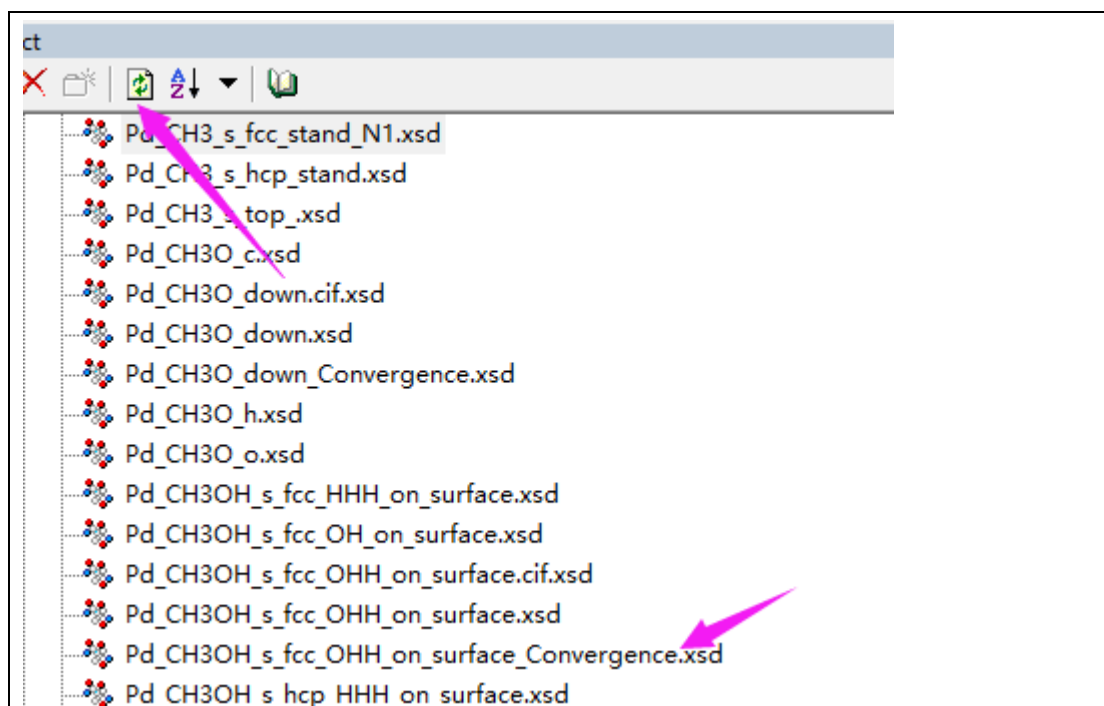
导出的结构会有 Type 以区分，此时可以继续投其他 Job，一般是频率，BEEF 等不需要再优化的 Job

### 3.和 Material Studio 协作

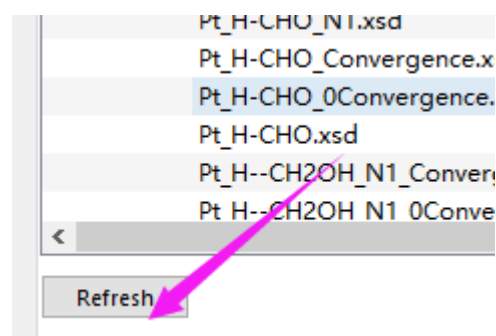
VASP Studio 和 Material Studio 可以进行无缝协作

比如：

- 1.使用 export 导出结构后在 Material Studio 中刷新立即查看。



2.导出的未收敛的结构可以在目前的基础上修改，然后重命名，通过 VASP Studio 的刷新检测新文件再立即投 job。



## 4.用好 Mark

任何时候，你都可以在右键菜单中使用 Mark 选一个颜色和文字进行标记，比如

Pt_UU_s_bridge.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-114.623474
Pt_CHOHplane2.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-121.472790
Pt_CHOHplane1_Convergence.xsd	Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...	完成	
Pt_CHOHplane1.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-121.470597
Pt_CHOHplane1.cif.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-121.470597
Pt_CHOHohcp.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-120.920406
Pt_CHOHofcc.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-120.910442
Pt_CHOHchcp.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-121.470105
Pt_CHOHcfcc.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-121.466276
Pt_CHOH22.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-121.277705
Pt_CHO_s_top_Convergence.xsd	Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...	正在投	
Pt_CHO_s_top.xsd	Convergence	Artificial Structure	正在投	-117.806588
Pt_CHO_s_top.cif.xsd	Convergence	Artificial Structure	正在投	-117.806588
Pt_CHO_s_hcp_1.xsd	Submitted	Artificial Structure	正在投	
Pt_CHO_s_hcp.xsd	Convergence	Artificial Structure	正在投	-117.809128
Pt_CHO_s_fcc.xsd	Convergence	Artificial Structure	正在投	-117.525266
Pt_CH3OH_s_hcp_OHH_on_surface_Convergence.xsd	Freq_Check_Pass	Convergence - VASP ...	完成	
Pt_CH3OH_s_hcp_OHH_on_surface.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-129.148671
Pt_CH3OH_s_hcp_OHH_on_surface.cif.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-129.148671
Pt_CH3OH_s_hcp_HHH_on_surface.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-128.988185
Pt_CH3OH_s_fcc_OHH_on_surface_Convergence.xsd	Freq_Check_Fail	Convergence - VASP ...	完成	
Pt_CH3OH_s_fcc_OHH_on_surface.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-129.164281
Pt_CH3OH_s_fcc_OH_on_surface.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-129.027902
Pt_CH3OH_s_fcc_HHH_on_surface.xsd	Convergence	Artificial Structure	完成	-128.992551

## 5.文件删除

如果有不需要的文件，右键 File-Delete，文件不会直接删除而是移动到目录下 Trash 文件夹中，需要手动清除。

## 流水线的使用方式

### 1.完成一个 BEEF 动力学计算项目的文件准备，与 CRN 无缝衔接

-CRN 是我的另一个项目，目前尚未开源  
-整个流水线除了 Material Studio 摆结构，SFTP 登录 Linux 下载文件关联以外，其余操作全在 VASP Studio 进行，无需手动处理 OUTCAR 或手动投 Job

1.准备好投过渡态，投吸附质优化，投频率，投 BEEF 能量这 4 个 Job 配置文件

2.Material Studio 摆好所有结构，投过渡态和吸附质优化

3.下载跑完的文件，检查收敛情况，没有收敛的导出结构 MS 微调结构，继续重新投。收敛的导出结构，用导出的文件（Type 为 Convergence）投频率 Job

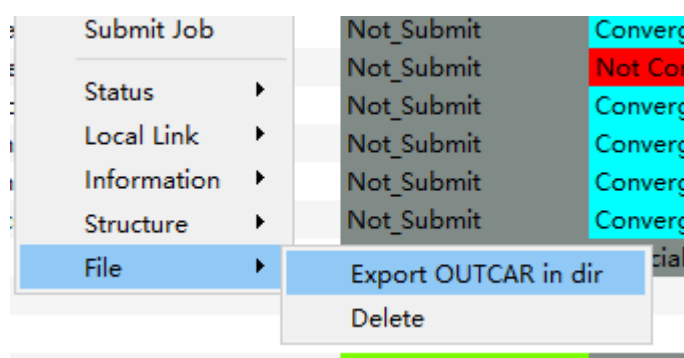
4.投完频率 Job 查看频率情况，过渡态有 1 个以上虚频或者吸附质有虚频需要重新摆结构优化，也就是回到 2 过程

5.完成了一个物种之后，用 Mark 标记为蓝色，有一个物种出现了未收敛，Mark 为红色

6.完成所有的频率计算，合格之后，Mark 所有为未检查，然后用 MS 进行最终结构检查，通过一个 Mark 一个通过，同时 Mark 出能量最低的结构

7.Mark 的能量最低结构**再次导出**（第一次导出是计算频率，这一次是用来计算 BEEF），投 BEEF 的 Job

8.用 File-Export OUTCAR in dir 导出所有的 BEEF OUTCAR



9.用 Information-Export Freq to dict file for catmap 导出 catmap 所需的频率文件。

10. 导出的 BEEF OUTCAR 和 Freq dict 就是 CRN 所需的输入文件，之后直接衔接到 CRN 软件运行。

## 目前遇到的 bug 和解决方法：

1. KeyValue Library 中运行命令加了个回车
2. 修改 Job Submit 配置时程序未响应：可能最近修改了底下 4 个 Lib 中文件的 Name，解决方法是删掉有问题的配置重新建立
3. 投过渡态失败，命令行提示 KeyError：在 Display Style-Lattice 中设置 Original，确认所有原子都在 slab 上面，把超出范围的原子拖回来，删除标的 distance，然后重新标。

