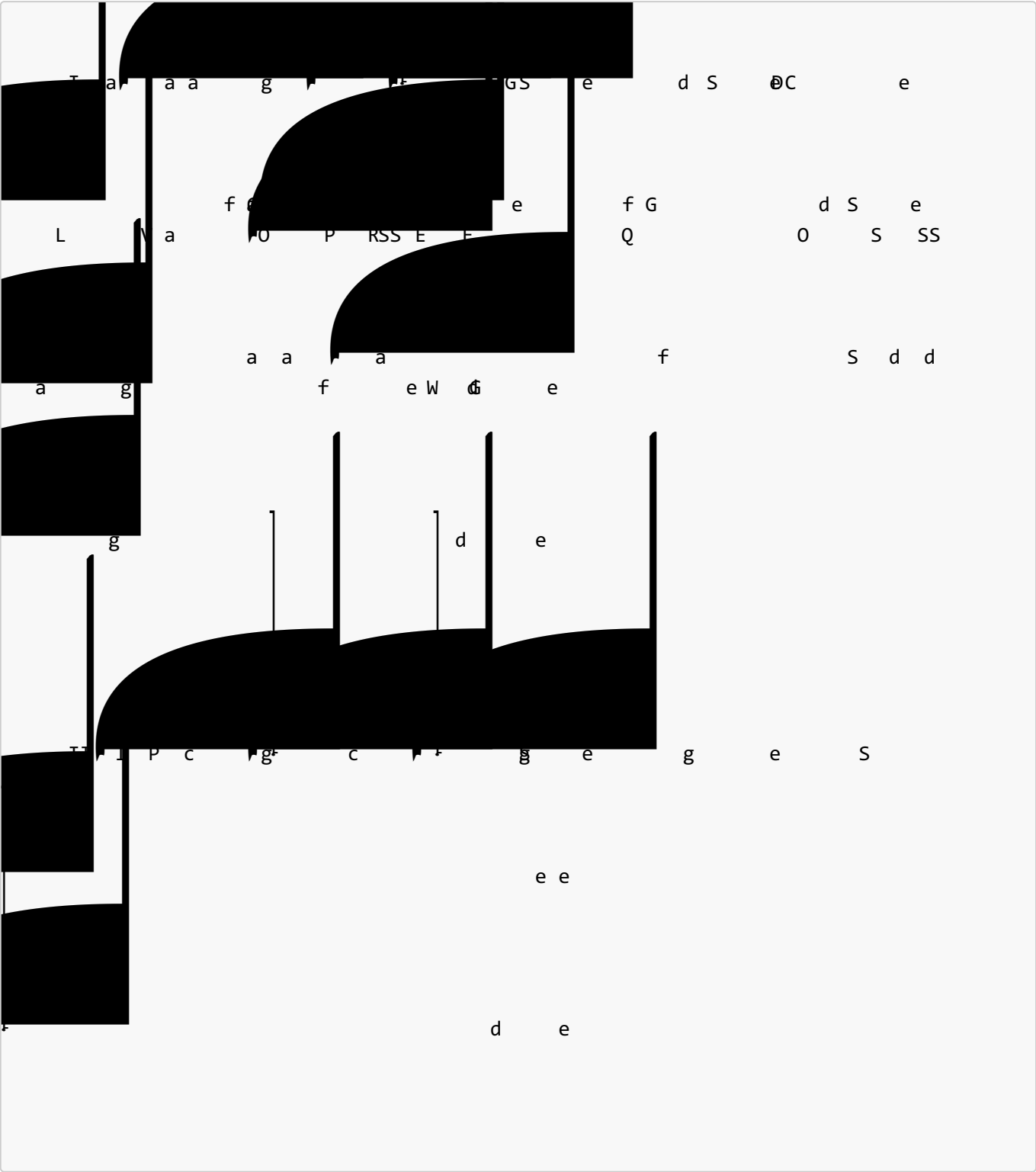
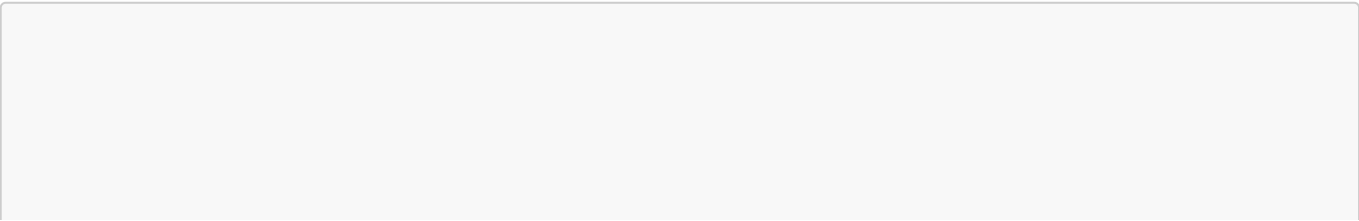


Workflow



+-----+ +-----+ | @GWinfo | | Config Struct | +-----+ +-----+
---+



待完成

- ☐ GWOptions.GWCal .GroundState 和 (不
- ☐ 需要给input_driver的一个输出

需讨论

- 讨论关于Coulomb里面的选择
- 自行查看minibzaverage.f90中怎么生成integrate的代码，对应vcoul_generator中的dvalue, 用于书写这里的construct_coulG0

单 • 如 ha 为 例 在 gve 减 1 /2) 将

Current framework

GWOptionsFramework/ Input/ # Input parsing and validation layer | | | read_input_param.m # Read and parse the input file into a config struct | | | allowed_param_list.m # Define valid blocks and parameter names | | | default_param_values.m # Provide default values for each parameter | | | set_default_values.m # Fill missing fields in config using defaults | | | ... | | | @GWOptions/ # Core class representing parameter configuration | | | GWOptions.m # Class definition with constructor | | | fromConfig.m # Convert struct (config) to GWOptions object | | | display.m # Customized display of essential parameters | | | ... # Additional methods for validation or shortcuts | | | examples/ # Example input files (optional) | | | input_example.in | | | README.md # Project documentation (this file)

Purpose

GW module 后，在 st GW我 一个 修
，弄 一 化 入 在 待 。 套
参 • 分成 GW module 一 对 一 关 将 功 应 。 个
参 • 取器 、 供 个 定 展 。
- • 参 mardown 个 户
• ☐

Transform the Input of other codes, such as QE for the ground-state calculation, or BGW for GW calculation, to the inputs form the code can accept.

Input description