

QueueTask 第一性原理 VASP 自动化计算软件 使用手册

目录

目录..... 1

文 件 修 订 记 录..... 2

1. 总体功能描述..... 3

2. 运行环境..... 4

3. 软件安装说明..... 5

4. 软件运行框架..... 6

5. 软件使用方法..... 7

文件修订记录

版本号	生成日期	作者	修订内容
V1.0	2024-10-29	黄青锋	初始版本

1. 总体功能描述

系统采用线性双层结构，该系统是为了使得操作者在运行 VASP 计算时更加便捷，由于 VASP 第一性计算程序被广泛安装并运行在 Linux 操作系统上，本软件系统的主程序是由 Linux 原生 Shell 语言开发，使用 Linux 原生 Bash 编译器运行，只有少部分后处理程序是由 Python 语言开发，该系统框架能在保证运行效果的同时高效且节能地帮助操作者更便捷地进行 VASP 计算。

系统已经过不同运行环境的测试，目前已更新至 1.0 正式版本，在可移植性方面已有不错的表现。由于利用了 Linux 底层编译语言，系统在安装时不需要额外编译，只需要简单地设置一些运行路径即可，一些可自定义的参数可选择性设置。

系统经过正确的安装后，可将 Quee.sh 主运行文件移动至工作文件夹下，并使用 Bash 编译器执行 Quee.sh 文件，另外也可以将库目录增添至环境变量路径中，即可使用自定义的指令运行主程序。

系统主程序正确运行后，系统会出现如下提示：

```
phy@phy:~/CP/C/152/1272$ ./Quee.sh
欢迎使用Quee快捷VASP程序
<Info> 前置软件包Slurm已检验安装
<Info> POSCAR文件已检验

QUEE TASK

请输入操作代号
101 进行SR操作
102 进行SR和SCF操作
103 进行SR和SCF及BS操作 ->输出BS.png
104 进行SR和SCF及BS, DOS操作 ->输出BS.png, *_LDOS.png

201 进行SCF操作
202 进行BS操作 ->输出BS.png
203 进行DOS操作 ->输出*_LDOS.png

301 ->输出BS.png
302 ->输出*_LDOS.png

31 更改绘图参数

0 退出程序
```

操作员可输入相应的操作代号以执行相应的操作。

2. 运行环境

硬件要求：

类 别	基 本 要 求
服务器端	CPU 8G 内存 16G 以上；硬盘剩余空间不低于 64G；

软件要求：

类别	名 称	基本环境
服务器端	操作系统	支持 Linux
	前置软件	Slurm 任务系统、Vaspkit、Python（可选）

3. 软件安装说明

本软件使用 Linux 底层语言开发，不需要额外编译，下载并解压源文件后，将源文件全部拷贝至同一文件夹下，该文件夹将作为软件的库文件目录。

库文件目录中编辑主操作文件 Quee.sh,在顶端设置有五个自定义参数，如下图所示：

```
1  #!/bin/bash
2
3  Path_Queue='/opt/Quee/'
4  partition='phy'
5  Details='#'
6  Path_vasp='vasp_std'
7  Path_python='python3'
8
9
10
```

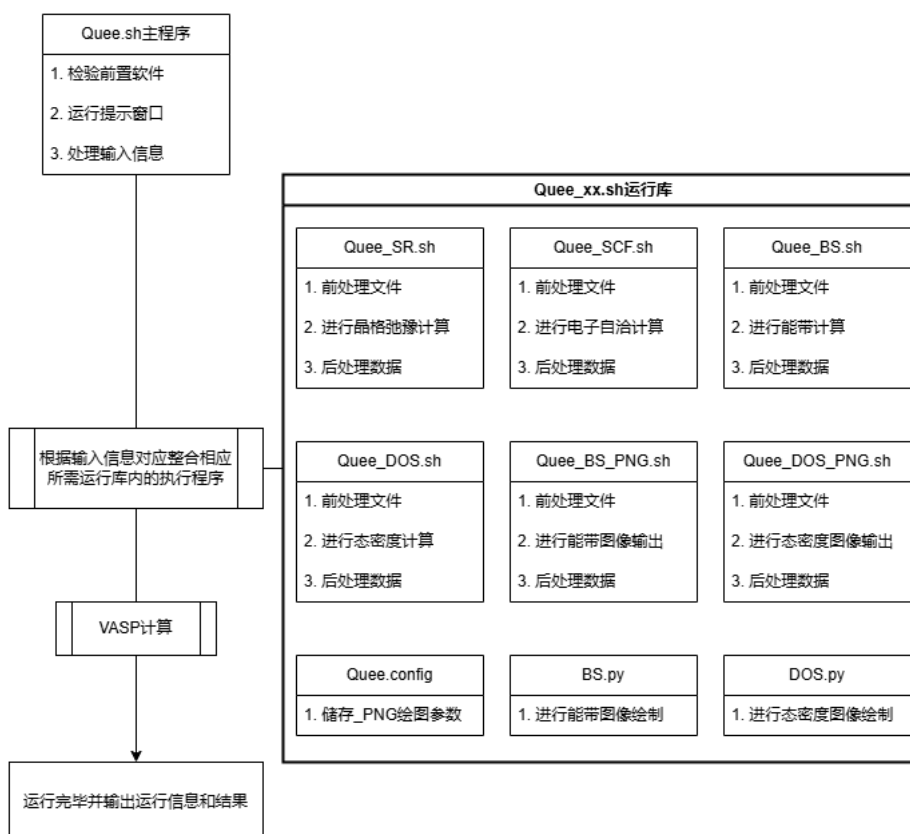
其中 Path_Queue 参数设置为软件库文件目录；partition 参数设置为在 Slurm 任务系统中你需要运行的目标队列名称；Details 参数为可选自定义参数，默认设置为‘#’，它会在 Slurm 任务系统中的执行脚本添加参数相应的效果；Path_vasp 参数设置为 VASP 程序执行路径，若已将其添入系统环境参数路径中，即可相应设置为执行命令，如默认值‘vasp_std’；Path_python 设置为 Python 程序执行路径，若已将其添入系统环境参数路径中，即可相应设置为执行命令，如默认值‘python3’。

另外，操作员需要检测是否已安装前置软件（Slurm、Vaspkit、Python[可选]）。主操作程序会在执行时首先自动检验是否已安装相应的前置软件，若检测已安装则可继续运行，反则自动终止程序。

4. 软件运行框架

程序采用线性设计，具体设计框架如下图所示：

QueeTask程序运行流程



5. 软件使用方法

在正常运行主程序 Quee.sh 后，程序将输出内置提示窗口，以序号开头列出可执行的操作类别，如图所示：

```

phy@phy:~/CP/C/152/1272$ ./Quee.sh

欢迎使用Quee快捷VASP程序
<Info> 前置软件包Slurm已检验安装
<Info> POSCAR文件已检验

QUEE TASK

请输入操作代号
101 进行SR操作
102 进行SR和SCF操作
103 进行SR和SCF及BS操作->输出BS.png
104 进行SR和SCF及BS, DOS操作->输出BS.png, *_LDOS.png

201 进行SCF操作
202 进行BS操作->输出BS.png
203 进行DOS操作->输出*_LDOS.png

301 ->输出BS.png
302 ->输出*_LDOS.png

31 更改绘图参数

0 退出程序

```

操作员可输入相应的操作代号以执行相应的操作。

在输入对应计算操作代号后（演示以 101 代号为例），程序会自动提示输入执行分配 CPU 核心数目，如下图所示：

```

101
请输入执行分配CPU核心数目

```

操作员可输入需要用于计算使用的核心数量。

在输入所需计算的核心数后（演示以 16 为例），程序会自动提示输入任务名称（直接输入回车即默认为 Quee_Task），如下图所示：

```

16
请输入任务名称（默认为Quee_Task）

```

操作员可输入需要用于计算的任务名称。

在输入任务名称后（演示以默认为例），程序将自动进入计算过程并提示 Slurm 任务系统的任务代号（演示中为 1244），可通过 Slurm 任务系统的指令 squeue 进行查看运行情况，如下图所示：


```

请输入任务名称（默认为Queue_Task）

未自定义任务名称，设为默认Queue_Task
Submitted batch job 1244
phy@phy:~/CP/C/152/1272/test$ squeue
      JOBID PARTITION    NAME    USER ST     TIME  NODES NODELIST(REASON)
      1244      phy Q_____SR    phy  R       0:06      1 phy
    
```

至此程序的输入信息已全部处理完毕，进入 VASP 计算过程。

若在程序输入窗口内需要退出程序，可输入 0 以退出程序，如下图所示：



在程序运行结束后，可在 Queue_OUTPUT 文件夹中找到 Queue.info 和 Queue.out 两个程序输出文件，Queue.info 中记录程序在每一步计算前后的操作记录和结果检验记录，Queue.out 中记录程序在调用前置软件的过程中产生的输出信息，如下图所示：

```

<Info> Queue输出文件夹已自动创建
<Info> 前置软件包Vaspkit已检验安装
<Info> 前置软件包Slurm已检验安装
<Info> POSCAR文件已检验
-----SR-----
<Info> SR文件夹已自动创建
<Info> POSCAR文件已复制至SR文件夹下
<Info> 生成KPOINTS时设置mesh为 0.02
<Info> ENMAX值设置为 780
<Info> 用户选择自定义NCORE为 4
<Info> SR程序开始运行
<Info> SR程序运行完毕
-----检验SR结果-----
<Info> OUTCAR文件已检索
<Info> SR已收敛
<Info> OUTCAR中SIGMA展宽已检索
<Info> 体系原子总数目为 21
<Info> 体系SIGMA展宽值合理，E/num_atoms = 0.000122 < 0.001
-----
<Info> Queue输出文件夹已存在，将自动绑定路径
<Info> 前置软件包Slurm已检验安装
-----SCF-----
<Info> SCF文件夹已自动创建
<Info> SR文件已检索
<Info> SR中CONTCAR已获取，转移到SCF中作为POSCAR
<Info> 复制SR中INCAR文件，转移到SCF文件夹
<Info> 复制SR中POTCAR文件，转移到SCF文件夹
<Info> 复制SR中KPOINTS文件，转移到SCF文件夹
<Info> SR输出完整，所需文件已全部转移完毕
<Info> 用户选择自定义NCORE为 4
<Info> SCF程序开始运行
<Info> SCF程序运行完毕
<Info> SCF文件OUTCAR已检索
<Info> SCF已收敛
-----
<Info> Queue输出文件夹已存在，将自动绑定路径
<Info> 前置软件包Vaspkit已检验安装
<Info> 前置软件包Slurm已检验安装
-----BS-----
<Info> BS文件夹已自动创建
<Info> SCF文件已检索
<Info> SCF文件OUTCAR已检索
<Info> SCF已收敛
<Info> 复制SCF中POSCAR文件，转移到BS文件夹
<Info> 复制SCF中INCAR文件，转移到BS文件夹
<Info> 复制SCF中POTCAR文件，转移到BS文件夹
<Info> 复制SCF中CHGCAR文件，转移到BS文件夹
<Info> SCF输出完整，所需文件已全部转移完毕
<Info> 用户选择自定义NCORE为 4
<Info> BS程序开始运行
<Info> BS程序运行完毕
<Info> BS.png开始输出
<Info> BS.png输出完毕
<Info> 开始FTP连接服务器上传BS.png
<Info> 上传完毕
    
```

另外，通过面板输入 31 可进入绘图参数的修改页面，如下图所示：

```
31
-----
请输入操作代号
311 修改BS_dpi
312 修改DOS_dpi
313 修改DOS图横坐标x最小值x_min
314 修改DOS图横坐标x最大值x_max
315 修改DOS图纵坐标y最小值y_min
316 修改DOS图纵坐标y最大值y_max

310 退回上一级
0   退出程序
```

操作员通过输入对应操作代号即可修改相应的绘图参数，输入 310 可返回上一级页面。