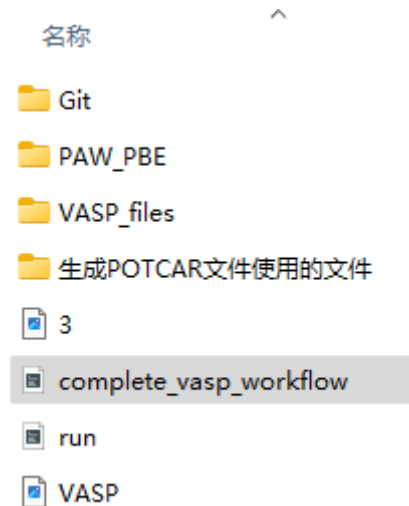


## VASP 计算程序使用手册

1: 安装“VASP 计算程序”:

1.1: 将“VASP 计算程序”的压缩包下载到本地, 并进行解压。

1.2: 解压完成后, 点击打开文件“assets”-“complete\_vasp\_workflow”。



1.3: 在“complete\_vasp\_workflow”文件第 6 行和第 7 行的双引号中添加自己服务器的用户名和地址, 在文件第 8 行和第 35 行的双引号中添加服务器中用于 VASP 计算的文件夹路径。

```
4
5  # 定义服务器的用户名和地址
6  SERVER_USER=""
7  SERVER_ADDRESS=""
8  SERVER_PATH=""
9
34
35  SERVER_PATH=""
36
```

1.4: 打开文件“assets” - “run”文件, 下图为文件的全部内容。

```
1  #!/bin/bash
2  #SBATCH -J AIMD
3  #SBATCH -p defq
4  #SBATCH -N 1
5  #SBATCH --ntasks-per-node=48
6  #SBATCH --cpus-per-task=1
7  #SBATCH --output=slurm-output.out
8
9  module add vasp/5.4.4
10 source /cm/shared/apps/intel/setvars.sh
11 mpirun vasp_std
```

### “run” 文件内容注意事项:

**作业调度系统:** 脚本适用于使用 Slurm 作业调度系统的集群。如果你的集群使用的是其他作业调度系统（如 PBS、LSF 等），你需要修改脚本中的调度命令（例如 `#SBATCH` 行）以符合你集群的作业调度系统要求。

**VASP 软件模块:** 脚本使用 “`module add vasp/5.4.4`” 来加载 VASP 软件。如果集群上安装了不同版本的 VASP 或使用不同的模块加载方法，你需要根据实际情况修改此命令。

**Intel 编译器环境:** 脚本通过 “`source /cm/shared/apps/intel/setvars.sh`” 来加载 Intel 编译器环境。如果集群使用的是其他编译器（如 GNU 或 Clang），可以修改此行来加载相应的编译器环境；如果集群上没有 Intel 编译器，或者不需要它，可以删除或注释掉这一行。

**MPI 配置:** 脚本使用 `mpirun` 来启动 VASP 并行计算，要求集群必须配置并支持 MPI。如果集群没有配置 MPI 或使用不同的 MPI 实现，可能会导致脚本无法运行。如果使用不同的 MPI 版本或命令，可能需要调整此命令。

1.5: 打开 “VASP 计算程序.py”，如下图所示为代码中所设置的人工

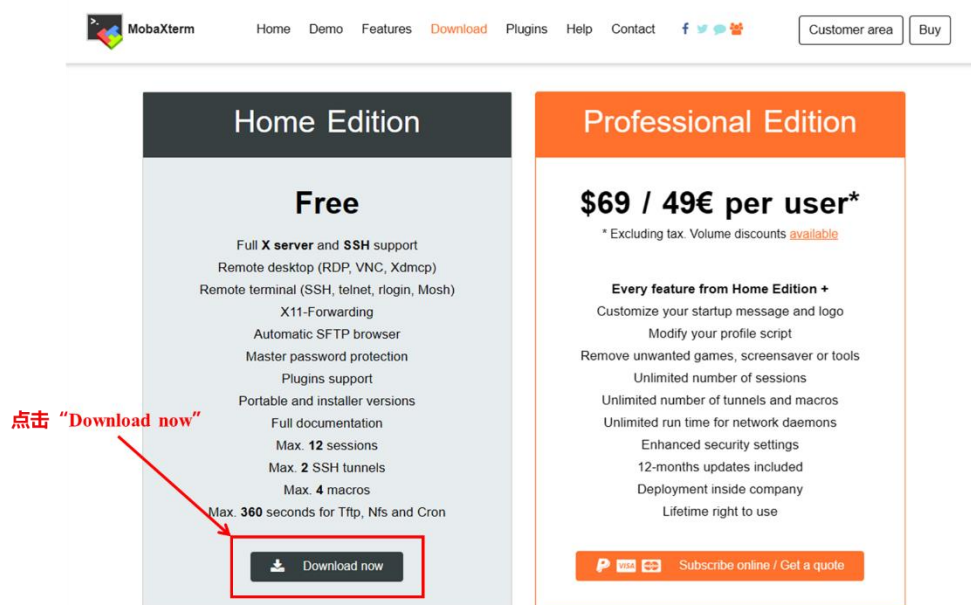
智能模型的 API 密钥以及 URL，你可替换自己熟悉的 API 来达到生成文件和分析文件的效果。

```
110 client = OpenAI(  
111     api_key='sk-aoLlexSH788Pi3YoC0158dEc6eB74211Ac1cCfAbD75670Cf', # 替换为您的 OpenAI API 密钥  
112     base_url="https://api2.aigcbest.top/v1" # 替换为您使用的 API base URL  
113 )  
  
417 client = OpenAI(  
418     api_key="sk-ysfmTMyaR0sACpKMSNLEh0Qw4cxN5H4l8FTATZ0I0NHsdL4m",  
419     base_url="https://api.moonshot.cn/v1" # 替换为您使用的 API base URL  
420 )  
  
489 client = OpenAI(  
490     api_key="sk-ysfmTMyaR0sACpKMSNLEh0Qw4cxN5H4l8FTATZ0I0NHsdL4m",  
491     base_url="https://api.moonshot.cn/v1" # 替换为您使用的 API base URL  
492 )
```

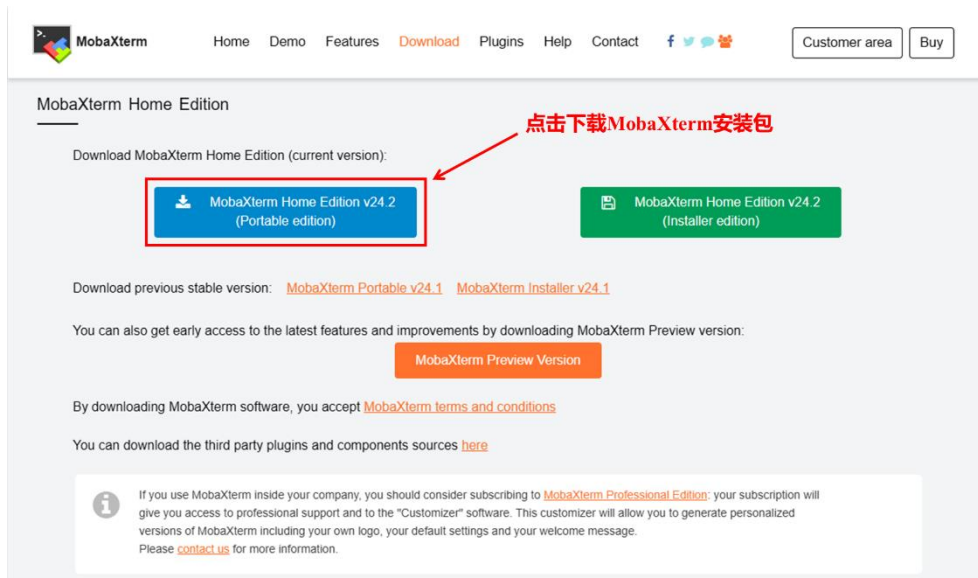
## 2: 服务器设置

### 2.1: 下载安装 MobaXterm:

复制下面的网址: <https://mobaxterm.mobatek.net/download.html> 进入到图片中的界面，点击“Download now”，跳转到下一个界面。



进入下一界面后，按图示点击下载 MobaXterm 安装包。



解压 MobaXterm 安装包，打开图示 MobaXterm 程序，登录服务器。

（若服务器中无 VASP，请自行查找教程进行安装）

名称	修改日期	类型	大小
CygUtils.plugin	2022/9/24 20:16	PLUGIN 文件	17,484 KB
MobaXterm backup	2023/7/21 15:21	压缩(zipper)文件...	2 KB
MobaXterm	2023/7/21 15:21	配置设置	4 KB
MobaXterm_Personal_23.0	2023/1/23 6:11	应用程序	16,502 KB

点击下载MobaXterm

2.2：配置服务器：

配置 SSH 公钥认证，实现无密码 SSH 连接。

2.2.1：生成 SSH 密钥对

在本地“win+R”，输入“cmd”按回车键打开终端，然后复制以下命令生成一个 RSA 密钥对：

```
ssh-keygen -t rsa -b 2048
```

出现图示信息，点击回车键。

```
C:\Users\28108>ssh-keygen -t rsa -b 2048
Generating public/private rsa key pair.
Enter file in which to save the key (C:\Users\28108/.ssh/id_rsa):
```

出现图示信息，输入“y”，点击回车键。

```
C:\Users\28108>ssh-keygen -t rsa -b 2048
Generating public/private rsa key pair.
Enter file in which to save the key (C:\Users\28108/.ssh/id_rsa):
C:\Users\28108/.ssh/id_rsa already exists.
Overwrite (y/n)?
```

出现图示信息，点击回车键。

```
C:\Users\28108>ssh-keygen -t rsa -b 2048
Generating public/private rsa key pair.
Enter file in which to save the key (C:\Users\28108/.ssh/id_rsa):
C:\Users\28108/.ssh/id_rsa already exists.
Overwrite (y/n)? y
Enter passphrase (empty for no passphrase):
```

出现图示信息，点击回车键。

```
Overwrite (y/n)? y
Enter passphrase (empty for no passphrase):
Enter same passphrase again:
```

### 2.2.2: 复制公钥到服务器

使用以下命令查看你的公钥内容：

```
type %USERPROFILE%\.ssh\id_rsa.pub
```

将显示的整行公钥内容完整复制。确保复制从 `ssh-rsa` 开始到行末尾的完整内容。

打开 MobaXterm，登录服务器。找到如图示中，服务器下用户目录中的 `.ssh/authorized_keys` 文件，打开该文件进行编辑。

Name	Size (KB)
..	
authorized_keys	1
id_ecdsa.pub	1
id_ecdsa	1

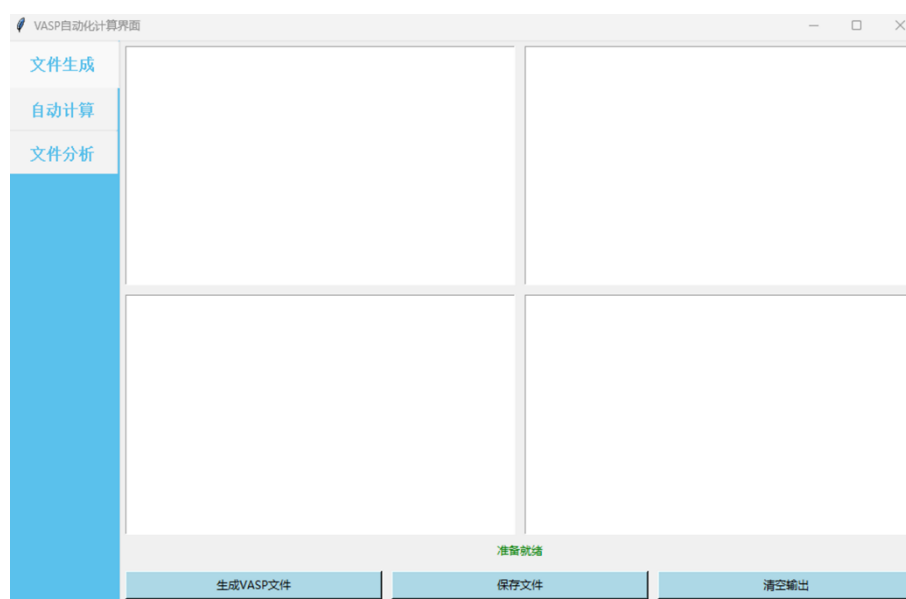
在编辑器中，移动到文件的新一行，粘贴之前复制的公钥内容。保存并关闭文件，即可实现无密码 SSH 连接。

### 3：运行 VASP 计算程序

3.1：完成上面的准备工作后，打开“VASP 计算程序.py”文件，点击运行代码。即可显示 VASP 计算程序的封面，封面包含了程序的标题和 VASP 的标志图片，还简要地介绍了程序的作用。点击“进入工具”按钮即可进入程序的应用界面。



3.2：“文件生成”界面，可根据提供的材料名称自动生成 INCAR、KPOINTS、POSCAR 和 POTCAR 等 VASP 计算所需文件。

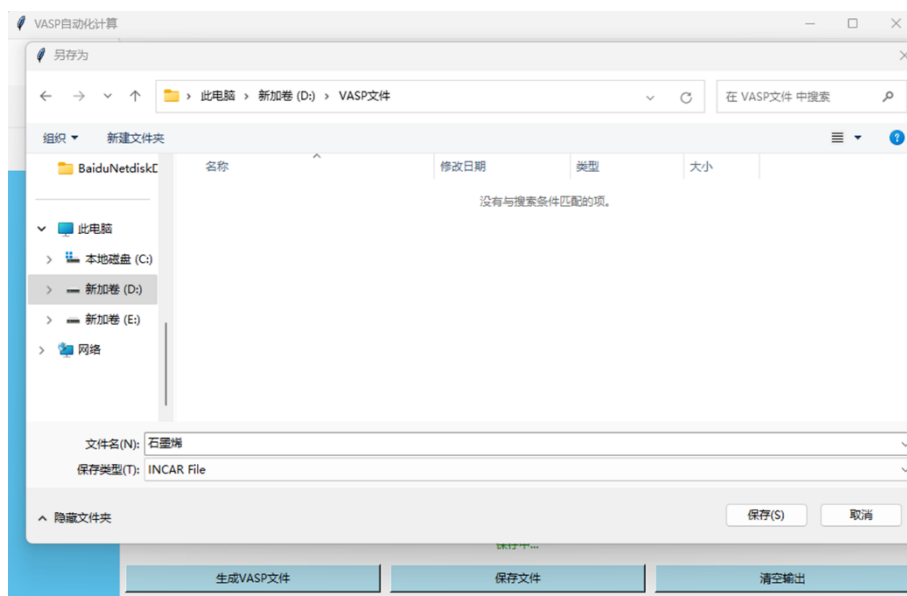


3.2.1: 点击“生成 VASP 文件”按钮，界面会显示弹窗，在弹窗中输入想要的材料及其性质（这里以“石墨烯”为例），点击“OK”按钮，等待一段时间即可生成所需的 VASP 计算文件。



3.2.2: 点击“保存文件”按钮，界面会弹出另存为界面，输入文件名后，点击“保存”按钮即可将文件保存到指定文件夹中。





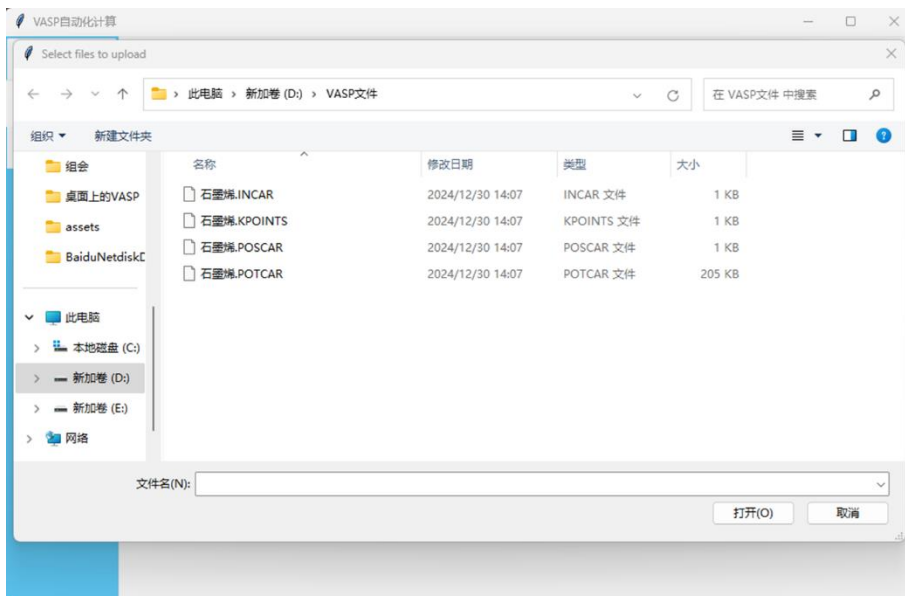
3.2.3: 点击“清空输出”按钮，可将界面中石墨烯的文件生成内容清空，再次用于生成其它材料的计算文件。

3.3: “自动计算”界面，程序将自动执行文件传输并在服务器上运行 VASP 计算，计算完成后，结果文件将被保存回本地。

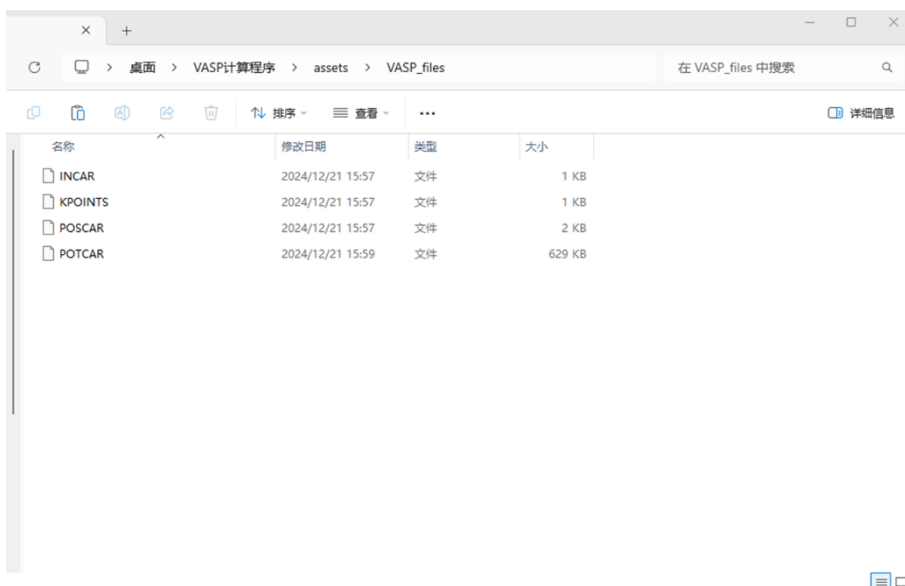


3.3.1: 点击“上传并重命名文件”按钮，选择需要修改的文件，点击“打开”按钮后程序即可为文件重命名并复制上传到 VASP 计算特定文件夹中。





点击“打开 VASP 文件夹”按钮即可看到重命名后的 VASP 计算文件。



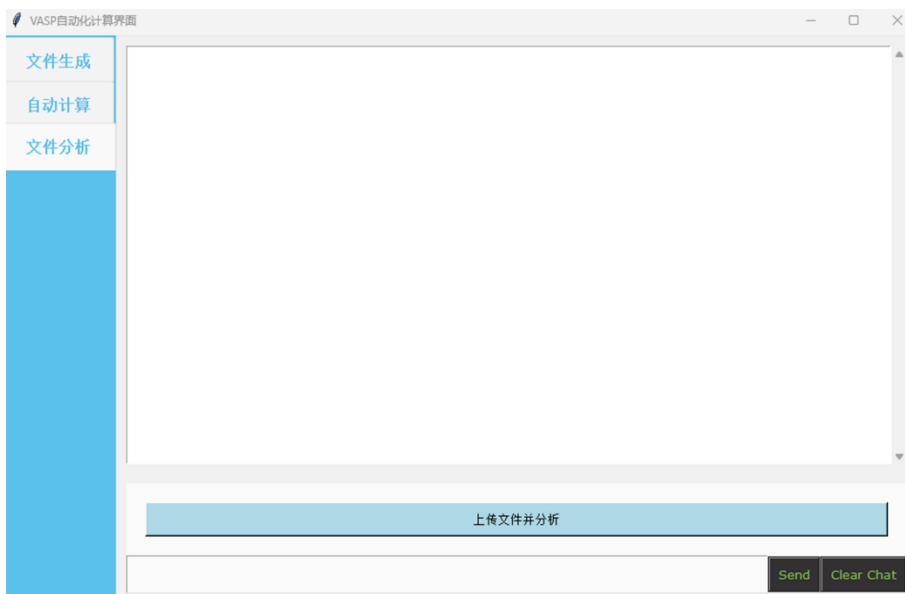
3.3.2: 完成重命名和上传任务后，点击“VASP 自动化计算”按钮，程序即可自动进行 VASP 计算。等到程序界面显示“VASP 计算已完成”的字样后，可点击“打开 VASP 文件夹”按钮打开文件夹查看结果文件。



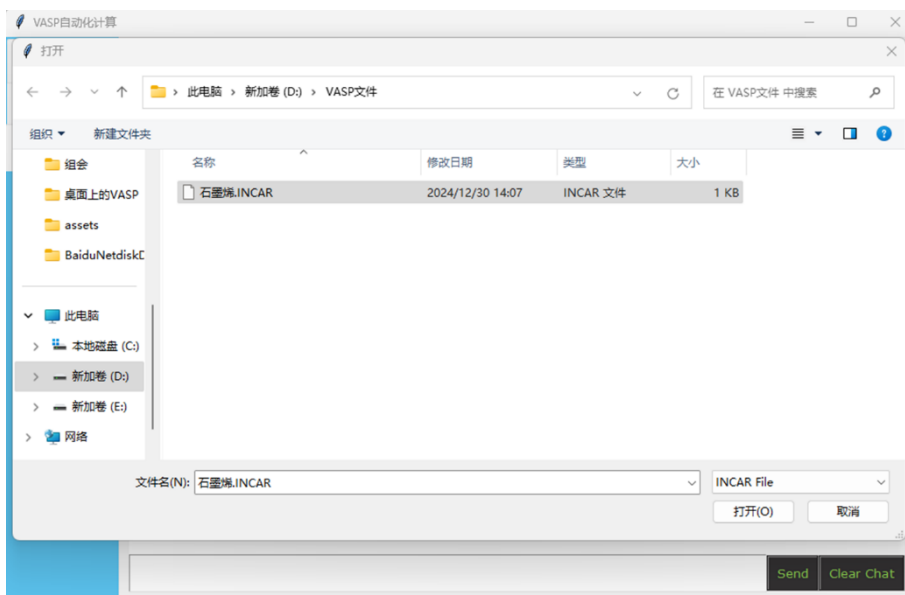
名称	修改日期	类型	大小
CHG	2024/12/30 14:22	文件	49,564 KB
CHGCAR	2024/12/30 14:22	文件	74,659 KB
CONTCAR	2024/12/30 14:22	文件	8 KB
DOSCAR	2024/12/30 14:22	文件	4,312 KB
EIGENVAL	2024/12/30 14:22	文件	55 KB
IBZKPT	2024/12/30 14:22	文件	1 KB
INCAR	2024/12/21 15:57	文件	1 KB
KPOINTS	2024/12/21 15:57	文件	1 KB
OSZICAR	2024/12/30 14:22	文件	3 KB
OUTCAR	2024/12/30 14:22	文件	1,565 KB
PCDAT	2024/12/30 14:22	文件	1 KB
POSCAR	2024/12/21 15:57	文件	2 KB
POTCAR	2024/12/21 15:59	文件	629 KB
PROCAR	2024/12/30 14:22	文件	9,509 KB
REPORT	2024/12/30 14:22	文件	0 KB
run	2024/6/22 15:01	SH 脚本文件	1 KB
slurm-output.out	2024/12/30 14:22	OUT 文件	7 KB
vasprun	2024/12/30 14:22	Microsoft Edge ...	15,792 KB
WAVECAR	2024/12/30 14:22	文件	0 KB
XDATCAR	2024/12/30 14:22	文件	8 KB

3.3.3: 完成 VASP 计算后，如果不需要使用文件，可点击“清除 VASP 文件”按钮将文件夹内关于此次计算的文件进行删除。

3.4: “文件分析”界面，程序不仅能提取结果文件中的关键参数和性质，还可以根据用户在对话框中的指示对计算文件进行必要的修改和优化，以满足进一步的计算需求。



3.4.1: 点击“上传文件并分析”按钮，程序会弹出一个文件夹，选择文件夹中的计算文件，程序即可自动分析，并给出文件内容的详细解释。





3.4.2: 用户还可以在下方的文本框中复制结果文件中的内容，并输入想要询问的问题，点击“Send”按钮，程序可根据内容进行解释回答。

以上为 VASP 计算程序的基础使用步骤，欢迎进行试用！