

# 材料模拟计算软件WIEN2K

● 张 挺 上海超级计算中心 上海 201203 tzhang@ssc.net.cn

## 摘要：

本文WIEN2K的发展背景和程序使用方法进行初步介绍，并描述WIEN2K在上海超级计算中心曙光4000A上的移植过程，同时其在曙光4000A上的使用方法。

## 1. 背景介绍

WIEN2K是第一个有版权的使用完全势线性增强平面波的代码来计算晶体的程序包，目前的最新版本是2008版。该方法被认为是密度泛函理论中电子结构计算中最准确的方法之一，已经有超过30年的历史了。WIEN最早的版本发布在Comput.Phys. Commun. 59, 399 (1990)，作者是P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, and S. B. Trickey，随后又相继公布了一系列改进的UNIX版本：WIEN93、WIEN95、和WIEN97。目前最新的版本是WIEN2k，增加了很多特性和功能，提高了运行速度和用户友好性。

WIEN2K是用FORTRAN90语言编写的，需要在UNIX操作系统上执行，因为它用C-Shell脚本来运行程序的。它已成功部署在下列平台上：Linux、IBM RS6000、HP、SGI、Compac DEC Alpha和SUN，并且可运行在任何现代的UNIX (LINUX) 系统上。对于粗粒度的并行计算，百兆网的通讯就足够了；对于细粒度的计算，更快的通讯网络会更好。

WIEN2K是一个由很多研究组共同发展的程序包。这些研究组分布在奥地利、德国、法国、瑞典、波兰、乌克兰等等。它的主要作者是奥地利维也纳的Vienna University of Technology和Inst. of Physical and Theoretical Chemistry的P. Blaha、K. Schwarz、G. Madsen、D. Kvasnicka和J. Luitz

## 2. 软件功能

WIEN2K使用增强平面波和局域轨道计算晶体性质，也就是用密度泛函理论计算固体的电子结构。线性增强平面波(L)APW被认为是密度泛函理论中电子结构计算的最准确的方法之一。

用于计算晶体的完全势（线性）增强平面波

(L)APW代码在WIEN出现之前已经有超过20年的发展历史了。WIEN就是基于这个方案——完全势（线性）增强平面波(L)APW+局域轨道(lo)方法来开发的，在它的密度泛函方法中可以使用局域（自旋）密度近似(LDA)或广义梯度近似(GGA)。WIEN2k使用了全电子方案，包含了相对论影响。

WIEN2K由一系列脚本工具和各个功能模块的源文件组成。SRC开头的目录为各个功能模块的源文件和相应的Makefile文件。编译完成后，不同的功能形成不同的可执行模块，然后通过一系列C-Shell脚本来调用这些模块。

WIEN2K的程序结构如图1所示，左图中表示的是单个CPU运行的一个自洽场Self-consistent-field (SCF)迭代的过程，右图表示并行模式下一个自洽场(SCF)迭代的过程。

模块功能：

LAPW0：根据给定的电子密度来计算出势；

LAPW1：计算本征值和波函数；

LAPW2：根据LAPW1计算出的波函数来计算电子密度；

LCORE：计算原子区域内的波函数和电子密度；

MIXER：混合输入输出的电子密度。

从图1的左图看出，LAPW1与LAPW2所开销的时间占整个循环的95%，因此在并行中只考虑将LAPW1与LAPW2这两部分并行化。WIEN中的这两个模块的并行是根据K-point来分配计算量，因此在并行结束后，还要根据K-point来求和，这一任务有SUMPARA来完成。不过根据K-point来分配计算任务并行化容易导致各个计算节点负载不均衡，所以在计算设置K-point的时候需要慎重。

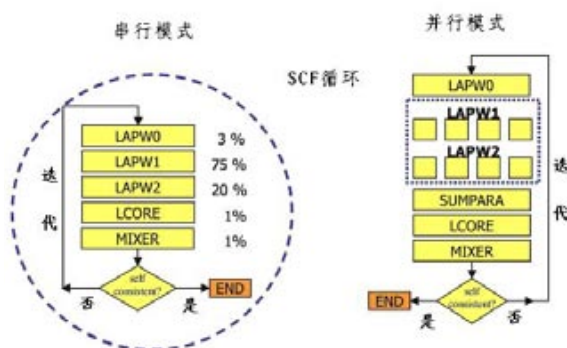


图1 WIEN2K的程序结构

程序的主要功能如下：

- 能带和密度态
- 电子密度和自旋密度、X射线结构因子
- Baders的“atoms-in-molecule”概念
- 总能量、作用力、平衡结构、结构优化、分子动力学
- 声子，与K.Parlinski的PHONON程序的接口
- 电场梯度、异构体位移、超精细场
- 自旋极化（铁磁性和反铁磁性结构）、自旋-轨道耦合
- X射线发射和吸收谱、电子能量损失谱
- 光学性质
- 费米面
- LDA、GGA、meta-GGA、LDA+U、轨道极化
- 中心对称和非中心对称晶格、230个内置的空间群
- 图形用户界面和用户指南

### 3. 移植和安装

用户需要付费购买，学术版价格大约在400欧元。

具体可参见<http://www.wien2k.at/order/index.html>。下文给出WIEN2K\_08版在上海超级计算中心曙光4000A集群上的移植过程。

#### 3.1 软硬件要求

硬件要求：推荐512MB以上的内存和1GB以上的硬盘空间；百兆以上计算通讯网的通讯。

操作系统：LINUX或UNIX

通讯库：MPI

编译器：FORTRAN 90编译器 C编译器

数学库：BLAS, ATLAS, ScaLAPACK, BLACS

其他软件：perl5或更高版本（用于w2web模块）；Tcl/Tk-Toolkit（用于Xcrysden模块）

#### 3.2 上海超级计算中心曙光4000A软硬件环境

硬件环境：曙光4000A集群系统，每节点四路Opteron 850 CPU、8G内存，Myrinet2000互联计算网络。

操作系统：Turbo Linux 8.0

编译器：PGI 6.0.8

数学库：ACML 3.0.0, ScaLAPACK 1.7, BLACS 1.1

通讯库：MPICH 1.2.6+GM2.1.2

#### 3.3 软件的安装编译

安装好上面所需的编译器和数学库后，开始进行安装。

3.3.1 拷贝WIEN2k\_08.tar到自己的安装目录(~/.WIEN2k\_08)，解压文件：

```
mkdir ~/.WIEN2k_08
cp WIEN_2k.tar ~/.WIEN2k_08
cd ~/.WIEN2k_08
tar -xvf WIEN2k_08.tar
gunzip *.gz
./expand_lapw
```

这时会出现一个选择提示你将覆盖你以前安装的WIEN，然后询问你continue(y/n)，按y。解压完成。出现提示，执行./siteconfig\_lapw命令进行设置和编译，出现

```
*****
*                               *
*               W I E N         *
*               site configuration *
*                               *
*****

Last configuration: Mon Mar 31 11:46:16 CST 2008
Wien Version: WIEN2k_08.1 (Release 14/12/2007)

System: linuxpgi

S  specify a system
C  specify compiler
O  specify compiler options, BLAS and LAPACK
P  configure Parallel execution
D  Dimension Parameters
R  Compile/Recompile
U  Update a package
L  Perl path (if not in /usr/bin/perl)
Q  Quit

Selection:
```

3.3.2 根据提示，按照上面的步骤分别设置与安装。

3.3.2.1 specify a system

选择 L Linux (PGI compiler)

3.3.2.2 specify compiler

选择 pgf90

3.3.2.3 specify compiler options, BLAS and LAPACK

### 选择 默认的设置

#### 3.3.2.4 configure Parallel execution

a. Shared Memory Architecture? (y/n): 选择 n  
b. Remote shell (default is ssh) = 选择 rsh  
c. Do you have MPI and Scalapack installed and intend to run finegrained parallel? (This is useful only for BIG cases)! (y/n): 选择 y

d. parallel f90 compiler: 选择mpif90

f. RP\_LIB(SCALAPACK+PBLAS):

/<SCALAPACK安装目录>/libscalapack.a

/<BLACS安装目录>/LIB/blacs\_MPI-LINUX-

0.a

/< BLACS安装目录>/ LIB/blacsCinit\_MPI-LINUX-0.a

/< BLACS安装目录>/ LIB/blacsF77init\_MPI-LINUX-0.a

/< ACML安装目录>/libacml3-0-0\_pgi64.a

连接已安装好的ScaLAPACK、acml和BLACS函数库。

#### 3.3.2.5 Dimension Parameters

选择1 lapw1 (e.g. NMATMAX, NUME)

设置 NMATMAX=20000 ==> 2GB (real) (==> cells with about 160-300 atoms/unitcell) 根据不同的计算系统的内存来设置。

#### 3.3.2.6 Compile/Recompile

选择A Compile all programs

编译完成。

## 4. 使用方法

在曙光上使用WIEN2K进行计算模拟，用户需要准备输入文件。

### 4.1 建立输入文件

4.1.1 WIEN2K首先需要建立以struct为扩展名的初始体系文件，例如：coo.struct。一般在本地机上建立然后上传至曙光4000A。需要注意的是，本地机上构建初始体系文件所使用的WIEN2K版本要与曙光上的版本一致，否则会出现无法正常计算的错误。

#### 4.1.2建立计算目录

mkdir coo (目录名与初始体系文件名应一致)，将coo.struct复制到目录中。

#### 4.1.3设置初始文件

在计算节点(anode002)上运行init\_lapw，对初始文件coo.struct进行一系列计算所需的参数设置。设置

的过程是交互的。

具体各参数的说明可以查看WIEN2K使用手册。

### 4.2 建立作业递交脚本

上海超级计算中心的曙光4000A使用的是PLATFORM公司的LSF作业调度系统，因此需要建立一个LSF脚本文件来递交作业。但是，LSF作业调度系统与WIEN2K的并行计算存在一定程度的不兼容，因此我们编写作业脚本递交脚本如下：

```
#!/bin/sh
APP_NAME=debug
NP=8
NP_PER_NODE=4
RUN= " RAW "
export SCRATCH=./
export WIENROOT=<WIEN2K的安装目录>
export PATH=$PATH:$WIENROOT:.
#start creating .machines
echo ' granularity:1 ' >.machines
echo " lapw0: " `echo $LSB_HOSTS |cut -d " " -f1` >> .machines
for i in `echo $LSB_HOSTS`
do
    echo " 1: " $i >> .machines
done
echo ' extrafine:1 ' >>.machines
echo " ----- "
# Run the parallel executable " WIEN2K "
run_lapw -p -so -i 80 -fc 0.001 >out&
此脚本文件相对复杂，使用者一般只修改第二行的队列名称，第三行使用CPU的数目以及最后一行run_lapw后面运行的参数。
```

建立好作业递交脚本后(此处为WIEN2K.lsf),使用chmod u+x WIEN2K.lsf将此文件属性变为可执行。然后使用bsub ./WIEN2K.lsf递交计算。

## 5. 总结

WIEN2K是全电子势的方法，划分电子势的方法，即采用MT球的方法，球内采用球斜函数展开，间隙用平面波。和其他软件比较起来，WIEN2K耗时，但是更精确，因此预测电子结构，化学键比较准确，当然做其他性质的计算也是很精确的。在有足够的资源支持下，而且体系不大，WIEN2K是很好的选择。

参考文献：

[1] <http://www.wien2k.at/>