

# ecalj/ecal\_auto

---

This is for automatic calculations for many POSCAR files.

ecalj\_atuo was used for generating ecaljdatabase

xxxxx followings are still under construction xxxxx

## dependency

We need

- `>python3.9`
- pandas
- seekpath
- spglib

```
pip install pandas seekpath spglib --user
```

## python のImportError が発生する場合

python の version や環境によって以下のようなエラーがでる場合がある(ISSP python3.6で発生)

```
Traceback (most recent call last):
  File
"/home/k0413/k041300/ecalj/ecalj_auto/OUTPUT/testSGA/start@20250410-
095838/job_mp.py", line 3, in <module>
    import pandas as pd
  File "/home/k0413/k041300/.local/lib/python3.6/site-
packages/pandas/__init__.py", line 17, in <module>
    "Unable to import required dependencies:\n" +
    "\n".join(missing_dependencies)
ImportError: Unable to import required dependencies:
pytz: No module named 'pytz'
```

この場合pythonのversion upを試す。

## mise を使用する場合.

以下を ~/.bashrc に記載 (zsh の場合は 2行目のbash を zsh とする)

```
type mise > /dev/null 2>&1 || curl https://mise.run | sh
eval "$( ~/.local/bin/mise activate bash )"
```

[!NOTE]

mise はパッケージ管理ソフトの一種であり、詳細は [mise](#) を参考にしてください。

その後 ~/.bashrc の再読み込みを行うと mise がインストールされ使用できるようになる。

```
source ~/.bashrc
```

ecalj\_auto があるディレクトリで以下を実行し, python をinstall する。

```
mise use python@latest
```

[!IMPORTANT]

ここでinstallされたpythonは, ecalj\_auto があるディレクトリより下位のディレクトリでのみ有効となることに注意。

ここでinstallしたpythonが使用するlibraryを以下で導入する。

```
pip3 install pandas seekpath spglib --user
```

## サーバーのコマンドに合わせてスクリプトの変更

### mpirun 関係

MPI の実行コマンドをサーバの使用に合わせて変更する。デフォルトは`mpirun`であり, 以下のスクリプトに記載されている。

ecalj/ecalj\_auto/auto/creplot.py

```
def run_lmf(self, fout, foute):
    command1 = ['mpirun', '-np', self.ncore, self.epath/'lmf',
self.num] + self.option_lmf
    command2 = ['tail', '-f', f'save.{self.num}']
    run_popen(command1, command2, fout, foute, 'a')
    return check_save(f'save.{self.num}')
```

`command1 = ['mpirun', '-np', self.ncore, self.epath/'lmf', self.num] + self.option_lmf` を修正する。

### SLURM の場合: 例 ISSP system B

On the slurm case: e.g., ISSP system B, Otthaka

```
command1 = ['srun', '-n', self.ncore, self.epath/'lmf',  
self.num] + self.option_lmf
```

## OpenMPI の場合: 例 ISSP system C

```
command1 = ['mpiexec', '--bind-to none', '-np', self.ncore,  
self.epath/'lmf', self.num] + self.option_lmf
```

## qsub 関係

ジョブの投入コマンドをサーバの使用に合わせて変更する。デフォルトはqsub であり, 以下のスクリプトに記載されている。

~/ecalj/ecalj\_auto/auto/joball.py L126

```
os.system(f'qsub {jobx}')
```

## SLURM の場合: 例 ISSP system B

はqsub をsbatchに変更する

```
os.system(f'sbatch {jobx}')
```

## Query

MPからのPROCARの取得方法

PROF

依存関係: 以下のpython ライブラリが必要

- pymatgen
  - mp-api
- インストールはpipから

```
pip3 install pymatgen mp-api --user
```

material project のAPI key が必要であり ecalj\_auto/config.ini に記載する