

如何在曙光超算上进行 **PHF(SUHF)**及 **PySCF** 计算

关帅 2024.10.23

目录

1. 环境配置
2. **PHF** 及 **PySCF** 计算实例
3. 运行方法
4. 本文中用到的输入文件及输出文件

1. 环境配置

登录后选择西北一区，在命令行依次运行以下命令：

```
module load anaconda3/5.2.0
```

```
source activate gs_env
```

2. PHF 及 PySCF 计算实例

在该例中，先后对 H_2 体系进行了 PHF, RHF, UHF, RHF, CASSCF 计算及其电子密度的计算，并输出了每个计算得到的轨道。计算文件内容如下：

```
from pyphf import suscf, guess

from pyscf import lib,scf,gto

from pyscf.tools import cubegen

import pyscf

lib.num_threads(32)      #PySCF 默认全核并行，此处可设置并行核数

xyz = '''

H 0.0 0.0 0.0

H 0.0 0.0 2.0

'''

bas = 'aug-cc-pVDZ'      #基组

spin_gs = 0              #此处为总自旋 2S 的值，2S=0 即单重态

mf = guess.mix(xyz, bas,spin_gs=spin_gs)#此步用于形成 PHF 的初猜，xyz
为构型，bas 为基组，spin_gs 为体系总自旋。

#mf = guess.mix(xyz, bas, cycle=0, spin_gs=spin_gs) 若作为 PHF 初猜的
```

UHF 结果易收敛到自旋未极化时的结果则无法用于 PHF 的计算, 需直接采用对称性破缺的初猜 (设置 cycle=0) 进行 PHF 计算

```
mf2 = suscf.SUHF(mf) #表明 mf2 是 SUHF 类的对象
```

```
mf2.kernel()          #运行 PHF 计算
```

```
u=mf2.dm_reg_gs[0,:,:]
```

```
l=mf2.dm_reg_gs[1,:,:]
```

```
r=u+l                  #以上三行是为了计算电子密度, 无需更改
```

cubegen.density(mf2.mol, 'phf.cube', r,nx=3,ny=3,nz=3)#调用 PySCF 中的 cubegen 函数进行电子密度的计算, mf2.mol 为欲计算的分子信息, 'phf.cube'为设定的输出的包含电子密度信息文件 (.cube 文件) 的文件名, r 为密度矩阵, nx、ny、nz 分别为三维空间中每个维度格点数目。

#PHF 及其电子密度计算完成, 下方为 UHF 计算

```
mol = gto.M(atom=xyz,basis='cc-pVDZ',spin = spin_gs)
```

```
mf3 = scf.UHF(mol)
```

```
mf3.kernel()
```

```
u=mf3.make_rdm1()  #获得 UHF 计算最终的密度矩阵
```

```
u1 = u[0,:,:]
```

```
u2 = u[1,:,:]
```

```
r = u1 + u2
```

```
cubegen.density(mf3.mol, 'uhf.cube', r , nx=3,ny=3,nz=3)
```

#UHF 及其电子密度计算完成, 下方为 RHF 计算

```
mol = gto.M(atom=xyz,basis='cc-pVDZ',spin = spin_gs)
```

```
mf4 = scf.RHF(mol)
```

```

mf4.kernel()

cubegen.density(mf4.mol, 'rhf.cube', mf4.make_rdm1(), nx=3, ny=3, nz=3)

#RHF 及其电子密度计算完成，下方为 CASSCF 计算

mycas = mf4.CASSCF(2,2)          #活性空间

mycas.verbose = 3                #控制输出详细程度，1-5 递增

mycas.fix_spin_(ss=spin_gs)      #锁自旋，使结果自旋必须为设定的 ss 值

mycas.kernel()

cubegen.density(mf4.mol, 'cas.cube', mycas.make_rdm1(), nx=3, ny=3, nz=3)

```

3. 运行方法

通过在命令行输入 `python input.py` 即可进行计算。

4. 本文中用到的输入文件及输出文件

①input.py:

```

from pyphf import suscf, guess
from pyscf import lib, gto, scf
from pyscf.tools import cubegen
import pyscf
lib.num_threads(32)
xyz = '''
H 0.0 0.0 0.0
H 0.0 0.0 2.0
'''
bas = 'aug-cc-pVDZ'
spin_gs = 0
mf = guess.mix(xyz, bas, spin_gs=spin_gs)
mf2 = suscf.SUHF(mf)
mf2.kernel()
u = mf2.dm_reg_gs[0, :, :]
l = mf2.dm_reg_gs[1, :, :]
r = u + l

```

```
cubegen.density(mf2.mol, 'phf.cube', r, nx=3, ny=3, nz=3)
```

```
mol = gto.M(atom=xyz, basis=bas, spin=spin_gs)
mf3 = scf.UHF(mol)
mf3.kernel()
u = mf3.make_rdm1()
u1 = u[0, :, :]
u2 = u[1, :, :]
r = u1 + u2
cubegen.density(mf3.mol, 'uhf.cube', r, nx=3, ny=3, nz=3)
```

```
mol = gto.M(atom=xyz, basis=bas, spin=spin_gs)
mf4 = scf.RHF(mol)
mf4.kernel()
cubegen.density(mf4.mol, 'rhf.cube', mf4.make_rdm1(), nx=3, ny=3, nz=3)
```

```
mycas = mf4.CASSCF(2,2)
mycas.verbose = 3
mycas.fix_spin_(ss=spin_gs)
mycas.kernel()
cubegen.density(mf4.mol, 'cas.cube', mycas.make_rdm1(), nx=3, ny=3, nz=3)
```

② 屏幕输出结果（需在其中自行查找）

Final E(SUHF) = -1.01663160

converged SCF energy = -0.925060242866402 $\langle S^2 \rangle = 3.6366465 \times 10^{-12}$ $2S+1 = 1$

converged SCF energy = -0.925060242866554

CASSCF energy = -1.01663160083322

③ 电子密度文件：

phf.cube

```
Electron density in real space (e/Bohr^3)
PySCF Version: 2.7.0 Date: Wed Oct 23 17:03:01 2024
  2  -3.000000  -3.000000  -3.000000
  3   3.000000   0.000000   0.000000
  3   0.000000   3.000000   0.000000
  3   0.000000   0.000000   4.889726
  1   0.000000   0.000000   0.000000   0.000000
  1   0.000000   0.000000   0.000000   3.779452
 8.55750E-06  7.55831E-05  8.55750E-06
 6.43560E-05  6.45227E-04  6.43560E-05
 8.55750E-06  7.55831E-05  8.55750E-06
 6.43560E-05  6.45227E-04  6.43560E-05
 6.78807E-04  1.62339E-02  6.78807E-04
 6.43560E-05  6.45227E-04  6.43560E-05
 8.55750E-06  7.55831E-05  8.55750E-06
 6.43560E-05  6.45227E-04  6.43560E-05
 8.55750E-06  7.55831E-05  8.55750E-06
```

uhf.cube

```
Electron density in real space (e/Bohr^3)
PySCF Version: 2.7.0 Date: Wed Oct 23 17:03:01 2024
  2  -3.000000  -3.000000  -3.000000
  3   3.000000   0.000000   0.000000
  3   0.000000   3.000000   0.000000
  3   0.000000   0.000000   4.889726
  1   0.000000   0.000000   0.000000   0.000000
  1   0.000000   0.000000   0.000000   3.779452
 1.71415E-05  2.00622E-04  1.71415E-05
 8.16947E-05  1.46511E-03  8.16947E-05
 1.71415E-05  2.00622E-04  1.71415E-05
 8.16947E-05  1.46511E-03  8.16947E-05
 6.03344E-04  2.75455E-02  6.03344E-04
 8.16947E-05  1.46511E-03  8.16947E-05
 1.71415E-05  2.00622E-04  1.71415E-05
 8.16947E-05  1.46511E-03  8.16947E-05
 1.71415E-05  2.00622E-04  1.71415E-05
```

rhf.cube

```
Electron density in real space (e/Bohr^3)
PySCF Version: 2.7.0 Date: Wed Oct 23 17:03:01 2024
  2  -3.000000  -3.000000  -3.000000
  3   3.000000   0.000000   0.000000
  3   0.000000   3.000000   0.000000
  3   0.000000   0.000000   4.889726
  1   0.000000   0.000000   0.000000   0.000000
  1   0.000000   0.000000   0.000000   3.779452
 1.71418E-05  2.00623E-04  1.71418E-05
 8.16953E-05  1.46511E-03  8.16953E-05
 1.71418E-05  2.00623E-04  1.71418E-05
 8.16953E-05  1.46511E-03  8.16953E-05
 6.03344E-04  2.75455E-02  6.03344E-04
 8.16953E-05  1.46511E-03  8.16953E-05
 1.71418E-05  2.00623E-04  1.71418E-05
 8.16953E-05  1.46511E-03  8.16953E-05
 1.71418E-05  2.00623E-04  1.71418E-05
```

cas.cube

```
Electron density in real space (e/Bohr^3)
PySCF Version: 2.7.0 Date: Wed Oct 23 17:03:03 2024
  2  -3.000000  -3.000000  -3.000000
  3   3.000000   0.000000   0.000000
  3   0.000000   3.000000   0.000000
  3   0.000000   0.000000   4.889726
  1   0.000000   0.000000   0.000000   0.000000
  1   0.000000   0.000000   0.000000   3.779452
8.83060E-06  9.01910E-05  8.83060E-06
6.39657E-05  7.69928E-04  6.39657E-05
8.83060E-06  9.01910E-05  8.83060E-06
6.39657E-05  7.69928E-04  6.39657E-05
6.58927E-04  1.93713E-02  6.58927E-04
6.39657E-05  7.69928E-04  6.39657E-05
8.83060E-06  9.01910E-05  8.83060E-06
6.39657E-05  7.69928E-04  6.39657E-05
8.83060E-06  9.01910E-05  8.83060E-06
```