



科学与工程计算中心

Center for Computational Science and Engineering

“太乙”

Gpaw

手

册

编写时间：2020 年 11月

1. 目录

一、 介绍.....	3
1.1. 简介.....	3
1.2. 太乙的GPAW.....	3
二、 作业样例.....	3
3.1. 准备文件1:	3
3.2. 准备文件2:	4
3.3. 输入文件和数据集:	4
3.4. 作业脚本文件.....	4
3.5. 提交并查看作业.....	5
3.6. 作业结果.....	5
三、 注意事项.....	5
4.1. 关于测试样例.....	5
4.2. 联系方式.....	5

一、介绍

1.1. 简介

GPAW是一种基于投影增强波 (PAW) 方法和原子模拟环境 (ASE) 的密度泛函理论 (DFT) 的Python代码。

波函数可以用以下方式描述:

- 平面波 (pw)
- 实空间均匀网格, 多重网格方法和有限差分近似 (fd)
- 以原子为中心的基函数 (lcao)

更多GPAW内容, 请参考官方网站: <https://wiki.fysik.dtu.dk/gpaw/>。

1.2. 太乙的GPAW

目前太乙集群的公共目录上已安装好Python 3.7.0, 这个python平台包含了: GPAW 20.1.0, 用户可以直接用如下方法使用:

- 第一步: 加载相关的环境变量

```
[ccse-xiezy@login01 gpaw]$ source gpaw_env.sh  
[ccse-xiezy@login01 gpaw]$
```

其中gpaw_env.sh的下载路径为:

/share/apps/python/3.7.0/lib/python3.7/site-packages/gpaw-20.1.0-py3.7-linux-x86_64.egg/gpaw_env.sh

- 第二步: 加载python 3.7.0

```
[ccse-xiezy@login01 ~]$ module load python/3.7.0  
[ccse-xiezy@login01 ~]$
```

- 第三步: 验证

```
[ccse-xiezy@login01 ~]$ gpaw info  
python-3.7.0 /share/apps/python/3.7.0/bin/python3  
gpaw-20.1.0 /share/apps/python/3.7.0/lib/python3.7/site-packages/gpaw-20.1.0-py3.7-linux-x86_64.egg/gpaw/  
ase-3.19.2 /share/apps/python/3.7.0/lib/python3.7/site-packages/ase/  
numpy-1.19.2 /share/apps/python/3.7.0/lib/python3.7/site-packages/numpy/  
scipy-1.3.0 /share/apps/python/3.7.0/lib/python3.7/site-packages/scipy/  
libxc-4.3.4  
_gpaw /share/apps/python/3.7.0/lib/python3.7/site-packages/gpaw-20.1.0-py3.7-linux-x86_64.egg/_gpaw.cpython-37m-x86_64-linux-gnu.so  
MPI enabled yes  
scalapack yes  
Elpa yes; version: 20191110  
FFTW yes  
libvdwxc yes  
PAW-datasets 1: /usr/local/share/gpaw-setups  
2: /usr/share/gpaw-setups
```

二、作业样例

3.1. 准备文件1:

文件位置: /share/apps/anaconda3/5.2.0/conda_env.sh

```
# >>> conda initialize >>>  
# !! Contents within this block are managed by 'conda init' !!
```

```
__conda_setup="$(('/share/apps/anaconda3/5.2.0/bin/conda' 'shell.bash' 'hook' 2> /dev/null)"
if [ $? -eq 0 ]; then
    eval "$__conda_setup"
else
    if [ -f "/share/apps/anaconda3/5.2.0/etc/profile.d/conda.sh" ]; then
        . "/share/apps/anaconda3/5.2.0/etc/profile.d/conda.sh"
    else
        export PATH="/share/apps/anaconda3/5.2.0/bin:$PATH"
    fi
fi
unset __conda_setup
# <<< conda initialize <<<
```

3.2. 准备文件2:

文件位置: /share/apps/anaconda3/5.2.0/gpaw_env.sh

```
#!/bin/bash
export C_INCLUDE_PATH=/share/base/gpaw_necessary/elpa-2019/include/elpa-
2019.11.001.rc1:/share/base/gpaw_necessary/libxc/include:/share/base/gpaw_necessary/libvdxwxc/inclu
de:/share/base/gpaw_necessary/libxc/include:$C_INCLUDE_PATH

export
LD_LIBRARY_PATH=/share/base/gpaw_necessary/libxc/lib:/share/base/gpaw_necessary/libvdxwxc/lib:/shar
e/base/gpaw_necessary/scalapack/lib:/share/base/gpaw_necessary/elpa-
2019/lib:/share/intel/2018u4/compilers_and_libraries_2018.5.274/linux/compiler/lib/intel64_lin:/sh
are/base/fftw/3.3.8-double-avx512-
impi/lib:/share/apps/anaconda3/5.2.0/envs/gpaw_env/lib:$LD_LIBRARY_PATH

export
LD_PRELOAD=/share/apps/anaconda3/5.2.0/envs/gpaw_env/lib/libmkl_core.so:/share/apps/anaconda3/5.2.
0/envs/gpaw_env/lib/libmkl_sequential.so

export GPAW_SETUP_PATH=/share/base/gpaw_necessary/gpaw-setups-0.9.20000
module load mpi/intel/2018.4
conda activate gpaw_env
```

3.3. 输入文件和数据集:

文件位置: /share/apps/gpaw, 可以把该目录下所有文件拷贝到用户自己的目录下

```
$ mkdir gpaw
$ /bin/cp -Rf /share/apps/gpaw/* ~/gpaw/
```

3.4. 作业脚本文件

提交脚本文件为test.lsf, 脚本内容:

```
#!/bin/bash
#BSUB -q short
#BSUB -n 40
#BSUB -e %J.err
```

```
#BSUB -o %J.out
#BSUB -J gpaw
#BSUB -W 72:00
source /share/apps/anaconda3/5.2.0/conda_env.sh
source /share/apps/anaconda3/5.2.0/gpaw_env.sh
mpirun -np 40 gpaw python mygpaw.py
```

3.5. 提交并查看作业

```
$ bsub < test.lsf
Job <884692> is submitted to queue <short>.
```

```
$ bjobs
JOBID  USER  STAT  QUEUE  FROM_HOST  EXEC_HOST  JOB_NAME  SUBMIT_TIME
674975 ccse-zh RUN    ser     login04   40*r01n09  gpaw_test  Sep 28 15:27
```

3.6. 作业结果

结果文件为mol.out,mol.gpaw

```
1.8K Nov 25 15:12 884634.out
232 Nov 25 15:41 test.lsf
54K Nov 25 15:41 884687.err
1.7K Nov 25 15:41 884687.out
746 Nov 25 15:44 mygpaw.py
199 Nov 25 15:46 energy.txt
2.5K Nov 25 15:46 opt.traj
5.5M Nov 25 15:46 mol.gpaw
24K Nov 25 15:46 mol.out
0 Nov 25 15:46 884692.err
1.7K Nov 25 15:46 884692.out
```

三、 注意事项

4.1. 关于测试样例

- 本文档测试样例，只是验证改软件能正常运行。
- 欢迎使用该软件的用户，提供更加好的样例，以便提高该软件的使用效率。

4.2. 联系方式

- 本文档由科学与工程计算中心编写，联系邮箱：hpc@sustech.edu.cn, 联系人：谢作扬，电话：0755-88015831