

Materiały: VASP Obliczenia

Krótki opis usługi

Usługa przewidziana jest dla wszystkich osób pracujących z programem VASP i posiadających ważne licencje na ten program. Daje ona możliwość zlecenia zadań na pomocą przeglądarki internetowej. Usługa oparta jest o pracę z [portalem UNICORE](#). Dzięki temu rozwiązaniu użytkownik otrzymuje dostęp do infrastruktury jedynie za pomocą loginu i hasła. Usługa umożliwiła przyjazne zlecenie zadań dzięki przejrzystemu graficznemu formularzowi.

Aktywowanie usługi

Aby aktywować usługę należy:

- zarejestrować się w [portalu PLGrid](#) i założyć konto użytkownika (patrz: [Pierwsze kroki](#)),
- zalogować się do portalu i założyć grant obliczeniowy (w przypadku jeśli nie chcemy korzystać z niewielkiego grantu osobistego),
- zawnioskować o aktywację usługi *VASP - Obliczenia* przez [Katalog Aplikacji i Usług](#),
- przedstawić wymaganą licencję dla programu VASP.

Informację o posiadaniu licencji sugerujemy zawrzeć bezpośrednio w motywacji podczas aktywacji usługi. Dostawca usługi skontaktuje się w celu jej weryfikacji. Użytkownik oczywiście może zgłosić się poprzez [Helpdesk](#) z załączonym skanem dokumentu w celu przyspieszenia weryfikacji.

Pierwsze kroki

Po aktywacji usługi można z niej skorzystać logując się do portalu [UNICORE](#). W spisie modułów po lewej stronie należy wybrać zakładkę VASP. Mamy wówczas dostępny panel dedykowany do zlecania zadań w programie VASP widoczny na poniższym obrazku (należy kliknąć w celu powiększenia).

NAME	EXT	SIZE	MODIFIED
UNICORE_SCRIPT_EXIT_CODE		2 Byte	2015-03-17
hosts file	file	28 Byte	2015-03-17
KPOINTS		53 Byte	2015-03-17
stderr		54 Byte	2015-03-17
PCDAT		234 Byte	2015-03-17
INCAR		541 Byte	2015-03-17
XDATCAR		918 Byte	2015-03-17
POSCAR		932 Byte	2015-03-17
IBZKPT		957 Byte	2015-03-17
OSZICAR		1855 Byte	2015-03-17

Panel użytkownika usługi *VASP - Obliczenia* składa się z trzech części:

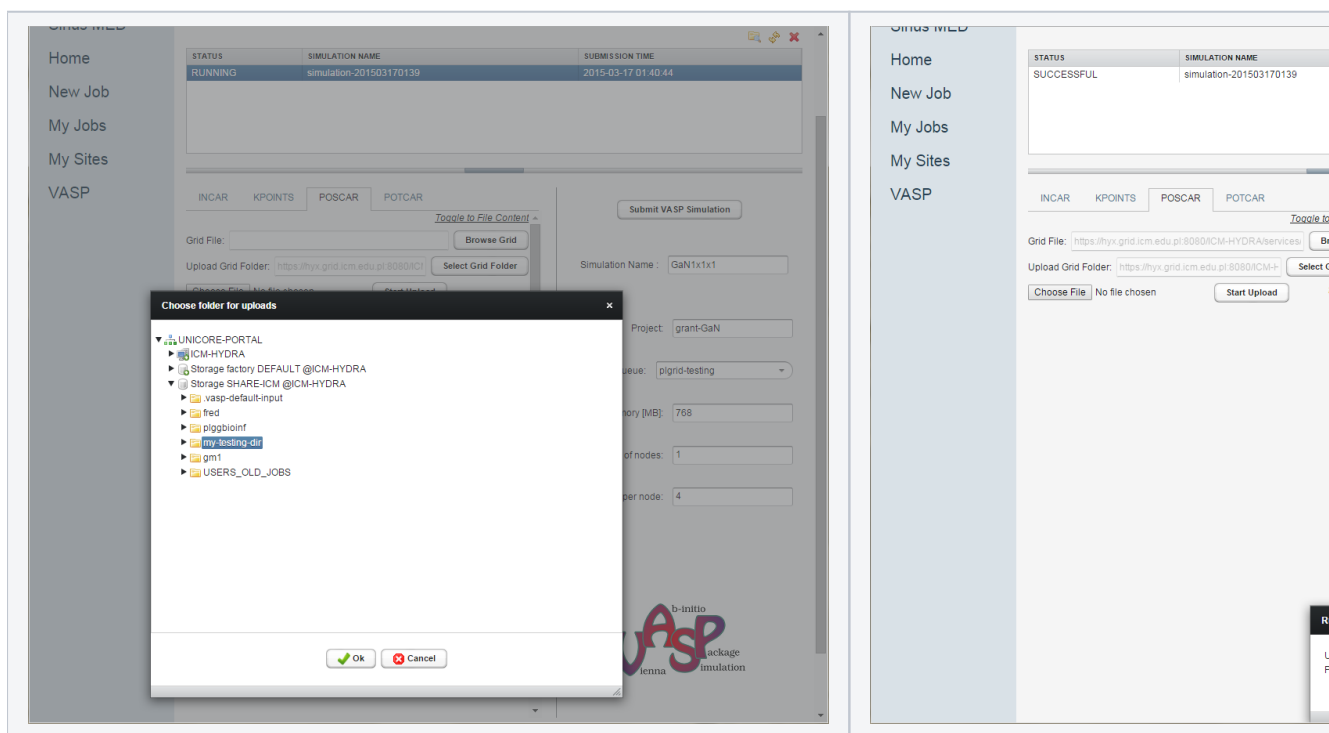
- u góry widzimy listę dotychczas przeprowadzonych obliczeń wraz z ich statusem oraz czasem zlecenia,
- w dolnej części, po prawej, widzimy dane potrzebne do specyfikacji zadania podczas zlecenia obliczeń,
- po lewej stronie mamy zakładki umożliwiające edycję czterech podstawowych plików wejściowych dla programu VASP.

W każdej chwili możemy podejrzeć katalog dowolnych obliczeń wyświetlonych powyżej (niezależnie od aktualnego statusu). Należy w tym celu wybrać ikonkę *Open job directory* znajdującą się w prawym górnym rogu całego widoku. Dodatkowo umiejscowione są tam jeszcze przyciski odświeżenia listy obliczeń oraz usunięcia zaznaczonych.

Dane wejściowe

Program VASP potrzebuje czterech plików wejściowych, aby przeprowadzić obliczenia. Są to:

- INCAR zawierający parametry obliczeń (przykładowy plik INCAR),
- KPOINTS zawierający parametry siatki wykorzystywanej podczas obliczeń (przykładowy plik KPOINTS),
- POSCAR zawierający m.in. geometrię przestrzenną z ewentualnymi wartościami początkowymi (przykładowy plik POSCAR),
- POTCAR zawierający parametry atomów cząsteczki wykorzystywanej w obliczeniach (przykładowy plik POTCAR).



Podział na pliki ma swoje odzwierciedlenie w panelu usługi, gdzie każdy z plików konfigurowany jest w osobnej zakładce. W każdym z nich możliwe jest:

- wklejenie zawartości pliku wykorzystywanego w obliczeniach w polu tekstowym,
- wybór pliku znajdującego się na gridzie (czyli w dowolnej z udostępnionych przez UNICORE przestrzeni dyskowych),
- wgranie własnego pliku na dowolną z powyższych przestrzeni dyskowych.

W przypadku ostatniej opcji wymagany jest wcześniejszy wybór katalogu docelowego, a dopiero potem możliwe jest przesłanie lokalnego pliku. Po udanym zapisaniu pliku pole tekstowe *Grid File* zostanie automatycznie uzupełnione zdalnym adresem wgranego pliku.

i Sam interfejs graficzny usługi *VASP Obliczenia* został zainicjowany powyższymi przykładowymi plikami wejściowymi umożliwiając początkowemu użytkownikowi po prostu uruchomienie pierwszej symulacji, która pozwoli zaznajomić się z procesem zlecania obliczeń do infrastruktury PLGrid. Nie są konieczne żadne dodatkowe parametry.

Zlecenie obliczeń

W widoku usługi *VASP Obliczenia* użytkownik posiada do dyspozycji przycisk *Submit VASP Simulation*, który zleca przeprowadzenie obliczeń na infrastrukturze PLGrid. Użytkownik ma możliwość ustawienia następujących parametrów prezentowanych przez powyższe obrazki:

- nazwa symulacji widoczna na liście obliczeń użytkownika,
- nazwa grantu wykorzystywanego w trakcie obliczeń,
- wybór kolejki w zależności od szacowanego czasu obliczeń,
- wielkość pamięci na poszczególnych węzłach oraz liczbę węzłów i procesorów na poszczególny węzeł.

W przypadku ostatniego punktu należy zwrócić szczególną uwagę na zgodność z indywidualną polityką określonego ośrodka. Szczegółowe informacje można w sekcji [Uruchamianie zadań bezpośrednio przez system kolejkowy \(SSH\)](#). Niekiedy wymagane jest zapoznanie się z informacjami rozszerzonymi, z których np. możemy się dowiedzieć, że w ICMie w przypadku większej liczby węzłów powinniśmy specyfikować wartości tak, żeby wykorzystywały wszystkie rdzenie węzła.

i W celu poprawnego wykonania zadania konieczna jest wcześniej aktywacja usługi *VASP Obliczenia* w portalu PLGrid. W przeciwnym wypadku program wypisze na standardowe wyjście tylko komunikat o jej braku z odnośnikiem do opisu usługi.

Wyniki obliczeń

Po udanym zakończeniu symulacji na górnej liście obliczeń (po uprzednim jej odświeżeniu przyciskiem w prawym górnym rogu) powinniśmy posiadać kolejny wpis ze statusem oznaczającym sukces. Możemy wówczas przejrzeć katalog zadania z wynikowymi plikami i pobrać te, które nas interesują.

Dla użytkownika programu VASP niewątpliwie jednym z ciekawszych plików jest **OUTCAR**, który zawiera zarówno energię końcową obliczeń oraz wynikową strukturę przestrzenną. Poniżej prezentujemy obrazki przedstawiające podgląd tekstowy pliku, a także graficzną wizualizację cząsteczki po jej uprzednim pobraniu z wykorzystaniem darmowego programu **Jmol**.

The image displays two screenshots from the UNICORE Portal. The left screenshot shows the 'New Job' page with a table of simulation jobs. The job 'simulation-201503170139' is marked as 'SUCCESSFUL'. A browser window shows the 'OUTCAR.txt' file content, including the free energy of the ion-electron system and the final structure parameters. The right screenshot shows the 'OUTCAR - OUTCAR' window with a 3D ball-and-stick model of a molecule. The model parameters are: $a = 3.248 \text{ \AA}$, $b = 3.248 \text{ \AA}$, $c = 4.000 \text{ \AA}$, $\alpha = 90.000^\circ$, $\beta = 90.000^\circ$, $\gamma = 120.000^\circ$. The 'Grid directory' table lists files like 'OUTCAR', 'POTCAR', and 'CHG' with their sizes and submission times.

STATUS	SIMULATION NAME	SUBMISSION TIME
SUCCESSFUL	simulation-201503170139	2015-03-17 01:40:44
QUEUED	GaN1x1x1	2015-03-17 07:41:21

```
1.62401 0.93763 26.27199 0.000000 0.000000 0.051454
0.00000 1.87525 28.91380 0.000000 0.000000 0.094418
1.62401 0.93763 31.55411 -0.000000 -0.000000 -0.811262
1.62401 0.93763 32.61195 0.000000 -0.000000 0.078000
1.62401 0.53762 10.81747 0.000000 0.000000 0.331197
total drift: -0.010832 -0.019007 -0.003090

FREE ENERGIE OF THE ION-ELECTRON SYSTEM (eV)
free energy TOTEN = -105.103268 eV
energy without entropy = -105.108383 energy(sigma->0) = -105.104973

POTLOK: cpu time 0.40: real time 0.40

writing wavefunctions
LOOP+: cpu time 443.53: real time 446.47
4ORBIT: cpu time 0.00: real time 0.00

total amount of memory used by VASP on root node 147149. kBytes
base : 30000. kBytes
nonl-proj : 48009. kBytes
fftplans : 11078. kBytes
grid : 28689. kBytes
```

NAME	SIZE	DATE
OUTCAR	110 kByte	2015-03-17 01:39:26
POTCAR	582 kByte	2015-03-17 01:31:37
CHG	14 MByte	2015-03-17 01:39:22

Gdzie szukać dalszych informacji?

Po udanym przeprowadzeniu przykładowych obliczeń, czas na własne eksperymenty. Dodatkowe informacje o portalu UNICORE można znaleźć w sekcji [UNICORE Portal](#). W przypadku samych parametrów aplikacji VASP, należy zapoznać się ze stroną internetową www.vasp.at.

W razie problemów oczywiście służymy pomocą. Wystarczy skorzystać z [Helpdesku](#) zaznaczając w nim kolejkę UNICORE.