## 第 2.1 节 Graphic Instructor 介绍

• 本章简介:

Graphic Instructor 是一款服务器、超级电脑图形操作系统。Graphic Instructor 提供用户和服务器、 超级电脑之间的图形接口代替传统的 console 模式操作远程服务器、超级电脑的方式,使用户拥 有更友善的工作环境和界面。Graphic Instructor 也为其他本地和服务器软件提供了接口,使得应 用程序更容易被用户使用,并最小化服务器、超级电脑的负载。Graphic Instructor 可支持多款量 化计算软件。本章将重点介绍其对 VASP 的应用。

- 本章重点(内容):
- 1. 远程连接
- 2. 文件列表
- 3. 程序运行
- 4. VASP INSTRUCTOR
- 5. 任务递交
- 6. 项目管理
- 7. 数据处理

## 1. 连接远程服务器:

人们在材料模拟、量化计算等实际应用过程中,越来越依赖计算机的计算能力。随着模拟 (计算)体系的不断复杂化,早已不能忍受 PC 机的计算速度,从而需要仰仗更多 CPU 的集群服 务器,甚至是超级计算机。对于大部分计算软件来说,均是基于 LINUX/UNIX 服务器的并行计算, 因此用户首先必须连接到集群服务器或者超级电脑。目前用户端-服务端之间的交互连接主要是基 于 telnet 或者是 SSH 协议的。

Graphic Instructor 内嵌了 SSH 协议,可以直接连接服务器:

Servers: 10.250.112.33:22:gx • Edit
Host: 10.250.112.33 Port: 22
User: (gx Pass: •••••••
Keyfile
Connect Disconnect

图 2.2.1 登录窗口

图 2.2.1 是 GI 中服务器的登录界面,会自动保存曾经登录过的服务器,也可以通过 Edit 来编辑服务器的相关设定(见 8.1)。支持 user-password 认证,或者是 user-key 认证。点击 Connect 就可以登录服务器。

## 2. Remote Explorer 文件列表:

服务器登录以后,界面会自动跳转到 Remote Explorer (图 2.2.2):

🌯 📡 🛛								
ogin Remote Explorer Remote Cr	nds Log							
/home/gx/gx/test1/	- gx@10.250.112.33: /home/gx/gx/test	1/						
10.250.112.33	Modified Time							
/home/ax/					(.48)			
2015.11.21/	2015-11-21 15:4;				VA3			
and/	2015-11-21 16:07				OUTPO			
bin/	2017-09-25 15:08	DOC/ laws	land land the					
📕 chgcar/	2015-12-19 19:15	DOS/ long	_iong_ion sta	tic/ 12.0658	CHG	CHGCAR	CONTCAR	
📜 cxl/	2016-04-24 00:01							
Demos/	2016-01-24 14:5:						(1)	
Density/	2017-03-22 12:3(	<u> </u>		SY 15Y		1 _ ~	1051	
Desktop/	2015-06-05 14:12		Nr Nr	TRUT NOT	INCAR		V. WUT	
Documents/	2017-02-21 21:3:	—		50°. 00°.	Editor			
Downloads/	2015-10-27 10:25 CON	TCAR vesta	DOSCAR FIGE	NVAI IBZKPT	INCAR	job pbs	KPOINTS	
ENCUT/	2015-11-21 16:0;	I CAR. Vesta		INVAL IDZAL	INCAN	100.005	KI OINI S	
▲ fj/	2016-05-17 11:31							
⊨ FJ/	2016-06-02 20:3:	(8)	(8)	2		AAA		
∽ <b>g</b> x/	2016-04-27 11:56	IAJ.	IAS' JA	?`				
Au13/	2016-12-15 09:5:	OUTPUT	OUTPUT	NUTHON II		Pa		
FeSe/	2017-07-07 14:51					Ø Ø		
SdAS/	2015-12-05 11:10	OSZICAR (	DUTCAR PC	DAT POSCAR	POTCAR	PROCAR	test64.e122	
tect1/	2017-09-28 10:05							
DOS/	2017-09-20 10.00							
	long folder/ 2017-09-25 09:5:	/ASP	9	LR ( LR				
static/	2015-11-28 17:01	itandard	$\equiv   \eta_b$	VA-				
12.0658	2015-12-04 12:12	Dutput		JUTY OUT		I = I		
CHG	2015-11-07 16:37				ي ز	ي		
CHOCAR	2015-11-07 16:37 ¥	asp.out va	sprun.xml WAV	ECAR XDATCAR	y.e321	y.0321		

图 2.2.2 Remote Explorer

**RE** 会自动列出在服务器上 HOME 目录里所有的文件夹和文件,左边是树形图,右边是图标图。点击树形图的图标,或者双击图标图中的目录图标,均可以进入这个目录,并列出该目录下所有的文件夹和文件。对于 VASP 作为 Calculator, GI 已经内嵌了分析软件,如同 2.2.2 中,有特殊图标表示的文件均可以双击,会出现相对应的编辑分析软件(稍后详述)。

## 预存工作目录:

为方便起见, RE 提供 Saved Working Dirs 来存储常用的目录(图 2.2.3),通过选择下拉菜单的目录, RE 可以直接跳转到相关目录。可以通过旁边的加减号按钮来添加或者删除存储的目录,也可以通过服务器信息表来添加或删除(8.1)



图 2.2.3 存储的工作目录

#### RE 最左侧动作条:

提供了一些常用操作,并随着右侧选中对象的改变而提供不同的动作条。如选中的是目录,则显示图 2.2.4,如选择的文件,则根据当前 Calculator 和文件名来决定提供哪些操作。



图 2.2.4 RE 左侧动作条

#### 右键菜单栏:

在文件列表中选中任何对象右击,均会跳出右键菜单。同样,目录和文件会有不同的菜单栏出现,图 2.2.5 是文件夹和文件的右击后的菜单,提供比左侧动作条更多的功能。





## 3. 程序运行

## 菜单栏和顶部动作条:

Tool	Boxes	View			Settings	Calcu	lator	Help
PJ	Projects & Jobs Manager	Draw 🔸	$\checkmark$	Atom	Calculators Settings		QE	
	DOS Siever	Resolution •	~	Bond	Atomic Properties	~	VASP	
	Bands Builder	View along Axises	ž	Cell Axis	Remote Server Commands Settings		Siesta Custo	m1
	Trajectory Tracer		~	Force	Edit Saved Computational Servers		Custo	m2
36	Charge Viewer		~	Fixmode	Set Defaults			
$\square$	UT NEB Analysis		×.	Symbols				
	Fermi Surface		~	Distances				
	FileEditor							
	Shown on ToolBar							

#### 图 2.2.6 菜单栏

顶部菜单栏提供了快速进入内嵌程序,以及一些系统设置的按钮。ToolBoxes 是 Graphic Instructor 内嵌的的工具程序,有 Project & Jobs Manager 可分类管理服务器递交的任务;支持 VASP 后处理 中 DOS、Bands Structure、Trajectory, Charge 和 UT NEB 等等。View 是设置原子构型中图形显示的 一些设置,比如选择显示哪些性质(原子成键,受力等等);Settings 是系统设置;Calculator 菜 单可选择当前的'计算器',即选择当前的服务器计算软件(可自定义)。

其中 Settings 可以控制和扩展、保存更多设置。

(a) Calculator Settings:

打开界面如下:

<b>G</b> Settings for Calculators		?	×
C:/Program Files (x86)/Graphic Instructor/s	settings/calculators/	Open	
Custom1 VASP			
Affiliated Files			
Filename (RegExp)	External Program	Parameters	
\w+\.input O Local Remote	~/bin/my.exe	\$Filename 2 2 2	
w+\.contcar	~/bin/expcell	\$Filename 2 2 2	
W+\.vesta Cocal	vnloads\VESTA-win64\VESTA-win64\VESTA.exe	\$Filename	
W+\.xy O Local	Program Files\OriginLab\Origin9\Origin9_64.exe	\$ORIGINFILE	
icon Cocal			
icon Cocal			
icon Cocal			
icon Correction Correc			
Save		OK Cance	!

图 2.2.6-1 Calculators 的设定界面

显示了当前设置的 Calculators,该页面中的 calculators 由目录 "C:\Program Files (x86)\Graphic Instructor\settings\calculators"中的文件夹决定。如:

] >	This F	PC > Windows (C:) > Program Files (x86) > Graphic I	nstructor 🔉 settings 🔉 🤉	alculators >
:	^	Name	Date modified	Туре
		Custom1	10/19/2017 2:51 PM	File folder
		📙 Universal	10/19/2017 2:51 PM	File folder
		VASP	10/19/2017 2:51 PM	File folder

此种情况下,有两个 Calculators 的设定,一个是 VASP,另一个是自定义的 Calculator,名 字为 Custom1。Universal 是对所有 Calculator 均适用的设置。每个 calculator 目录里,应有一个 settings.txt 文件,负责该 calculator 的文件关联和设定,另一个是图标文件夹,存储 有 png 格式的图标文件,用于 Remote Explorer 中显示。

📜 > This PC > Windows (C:) > Program Files (x86) > Graphic Instructor > settings > calculators > Custom1 >

^	Name	Date modified	Туре	Size
	ICONS Generalized as the setting state	10/19/2017 2:51 PM	File folder	2 KB
	Settings.txt	9/23/2017 5.51 PW	IXI File	Z ND

Setting.txt 可以通过图 2.2.6-1 来指定相关文件的图标、打开方式。例如:

Filename (RegExp)	External Program	Parameters
\w+\.input © Eoui	~/bin/my.exe	\$Filename 2 2 2

第一个按钮可以选择文件相关的图标,第二个输入框输入正则表达的文件名,图中 \w+\.input 是 windows 中文件\*.input 的正则表达,意为后缀名 input 的所有文件。第三个 选择 Local/Remote 为打开该文件是相关的程序,是本地的(Local)还是服务器端的 (Remote)。图中是服务器端。第四个输入框是关联程序的路径。第五个是打开程序是使用 的参数,其中\$Filename 代表所选中的文件名,(Origin 9 由于无法直接打开 ascii 数据文 件,Graphic Instructor 定义了\$ORIGINFILE 自动导入到 Origin 中的工作表格)。

#### (b) Atomic Properties:

😭 Atomic Prope	erties		? ×	POSCAR Editor #1		- 🗆 🗙
save		Restore Defaults		◆		
u •	R	Fe	R	Inome/users/gx/FeSe/NEB/         Open           Local        /CONTCAR         Save to Local           Image: full damappec.or:        /CONTCAR         Save to Serve           Vired: >Cartesia         Recentering         Ures	Single Atom: Dispalcement: x Gelect Mode v Mouse Drag z Show bonded atoms in Neighbor images	Multi Atoms: Area Pick Del T F X V Y Z
130 98 Size Bond	B	156 140 Size Bond	B	Lossocompositionen en la construcción de la constru		
Se	R G			0 0.494/212402-05740 0.2012/1242-0571/21 0.1012/0124/2014088 0.74962254902 0.0012/1242-0571/21 0.1012/012409 0.749622549025380 0.7512/17495532224 0.2496257280238 0.7496212890256 0.521251944490121 0.74964149701207 0.00000054-00 0.00000054-0 0.00000024-00 0.00000054-00 0.00000054-0 0.00000054-0 0.00000054-00 0.00000054-00 0.00000054-0 0.00000054-0 0.00000054-00 0.00000054-00 0.00000054-0 0.00000054-0 0.00000054-00 0.00000054-00 0.0000054-0 0.00000054-0 0.00000054-00 0.00000054-0000054-000054-0000054-000054-0000054-000054-0000054-0000054-000054-0000054-00005		
103 115 Size Bond	-B-			AFM - MAGMOM of IN- Co		

Atomic Properties 是代开相关晶体结构后,编辑相关元素性质(球的大小、成键距离)等参数。

(c) Edit Saved Computational Servers:

添加或编辑已存储的服务器的信息,有地址、端口、用户名、密码、VASP 的是函数存储 目录、该服务器的类型、曾使用的递交任务的命令、保存的工作目录等等。

New		Server : User	fudannhpcc.cn:13999:	gx	▼ DELETE
Host:	fudannhpcc.cn		PBS TYPE:	PBS_Linux	Choose Types
Port:	13999			~/qsub/run_qsub 1 12	v1
User:	gx			~/qsub/qsub qe.pbs	
Password:	•••••		OSub Cmds:		
	Use keyfile		Qui cinus.		
Keyfile:	false				
VASP:					
BIN Pat	n:			/home/users/gx/test	wtest/
POTCARs_Di	r: /home/users/	gx/vasp/pot/		/home/users/gx/test/test/	/ +2/
Q.E.:			Saved Working Dirs:	/home/users/gx/Demo/	Bands/CdSe-bands/
BIN Pa	th:			/home/users/gx/test/my	/newtest/
Pseudo Pot D	ir:			NewFolder/	
Siesta:					
BIN Path:				ulimit -s unlimited	1
				# Setup the OpenMPI to	opology
			Script Part I (head):	n_proc=\$(cat \$PBS_NO	DEFILE   wc -l)
				cd \$PBS_O_WORKDIR	
			Scrint Dart II		
			(mpirun cmd line):	nca btl openib,self -np \$	n_proc \${QE_bins}
				View PBS	Script

## (d) Set defaults:

Dialog		?	$\times$
Systems QE	VASP Siesta		
Local Storage Path:	D:/Local_Storage	Select	
	Save /	All Cance	el

此处设置本地存储目录 Local Storage Path 以及一些 calculator 的默认设置。

#### (e) Remote Server Commands Settings:

🖁 Remote Server Co	mmands Settings			?	$\times$
		Remote Server	Type: PBS_Linux	[	•
PBS Commands Settin	gs:				
q	stat: qstat	qstat	t -u: qstat -u		
q	sub: qsub	qsta	ıt -f: qstat -f		
q	del: qdel	qsta	t -a: qstat -a		
Regular Expressions fo	or rephrasing the infomation	on:			
Jobid from Submitted	info:				
(^\d+)\.?					
Job Path from qstat ir	ifo:				
$\binit_work_dir\s?=\$	s?([a-z0-9A-Z_/]*) \bPBS_	_O_WORKDIR\s?=\s?([a-z0-9/	A-Z_/]*)		
Job Name from qstat	info:				
\bJob_Name\s?=\s?(	\w+)?\b				
SAVE & UPDATE			ОК	Can	cel
前支持 Linux-LSF、	_inux-PBS 和银河超算	的 SLURM 系统,相关设置	置文件在目录中	':	
C:\Program Files (x86)\Gr	aphic Instructor\preset_files\P	BS_Servers			
∧ Name	^	Date modified	Туре	Size	
🖐 LSF_Linux.tx	t	11/6/2016 2:06 PM	TXT File		1 K
PBS_Linux.tx	t	9/2/2017 3:36 PM	TXT File		1 K
😗 SLURM_Yinł	le.txt	11/6/2016 2:03 PM	TXT File		1 K

顶部动作条上有打开 putty、winscp 和当前本地存储目录的按钮,还有打开 Project&Jobs Manager 的按钮。



设置不同的服务器类型,以及递交任务的命令和处理方式。

### 远程命令:



图 2.2.8 远程命令

远程命令可以执行非交互式的远程命令,并将结果输出。右侧记录历史命令和组常用命令,可双 击直接运行。

# 4. VASP INSTRUCTOR 以及任务递交

当选择一个目录并按<sup>1</sup> 按钮或者右键菜单点击"Perform VASP Calculation"时,会打开"VASP INSTRUCTOR"(图 2.2.9),如果服务器上当前目录已经存在 VASP 的输入文件时,会有下载窗口 提示(图 2.2.10)是否使用已有输入文件,如果不使用则 VASP INSTRUCTOR 会打开全新的输入文件,如果使用则会下载并打开。

<b>(</b> VASP INSTRUCTOR					- 0
Settings View					
Local:         D:/Local_Storage/10.250.112.33//ho <ul></ul>	me/gx/gx/test9/				
INCAR					
	Preset INCAR Types: All All Relaxations 7	Static/NonSCF / M	Iolecular Dynamics // Bands	Structure \	Reload local INCAR
	INCAR Keywords Settings:	Expand All			
	Ionic		Precisions:	System set SYSTEM: NPAR: NCORE: KPAR: ISTART:	
	Electronic		LDA+U	Write Flags van der Wa	als
			Molecular Dynamics	UT NEB Others	
Save					Pre Nevt
Servi					iveat

## 图 2.2.9 VASP INSTRUCTOR 里的 INCAR Editor

🔮 Download Dilaog		×
Downloading from Server: 10.250.112.3	33	
<ul> <li>/home/gx/gx/test8/INCAR</li> <li>/home/gx/gx/test8/POSCAR</li> <li>/home/gx/gx/test8/KPOINTS</li> </ul>		
	✓ Overwrite	Download 0%
Local:		
		Exit

图 2.2.10 下载输入文件

VASP INSTRUCTOR 的第一页是 INCAR Editor (图 2.2.9),可以编辑 INCAR。编辑好 INCAR 之后按 next,会出现 POTCAR Editor(图 2.2.11),可以选择使用的化学元素,以及相应的赝势。同样进入 next,会出现 POSCAR Editor(图 2.2.22),可以编辑 POSCAR。再按 next,出现 KPOINTS Editor (图 2.2.23),编辑 KPOINTS,按 next,出现 PBS Server 页(图 2.2.24),此页会总结 4 个输入文件的主要参数,并可递交给服务器的任务管理系统(如 PBS)。关于 INCAR Editor, POTCAR Editor, POSCAR Editor 和 KPOINTS Editor 的具体操作会在下面几节分别详解。

如果服务器上当前目录已经准备好了输入文件,那么可以使用另一种递交计算任务的方法,直接 递交任务。点击 <sup>500</sup> 会直接进入 PBS Server,选择或输入正确的递交命令,就可以把任务递交给 任务作业系统(如 PBS,具体信息产看 8.2)。当成功递交任务后会出现添加任务至项目任务管理器 (图 2.2.25),选择或创建(子)项目,将刚刚递交的任务加入该(子)项目。

Local: Remote:	D:/Loca 10.250.	l_Storage 112.3: //	/10.250.11 iome/gx/g	2.33//hon x/test9/	ne/gx/gx/t	est9/											_
CAR P	OTCAR																
udo Poten	tials Dir:																
Н							Pseud	o Type	в:		•		Peri	odic 1	Table		He
Li	Be					Used E	ements:	)				В	С	Ν	0	F	Ne
Na	Mg											AI	Si	P	s	CI	Ar
κ	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Мо	Тс	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Те		Xe
Cs	Ba	*	Hf	Та	W	Re	Os	lr.	Pt	Au	Hg	TI	Pb	Bi	Po	At	Rn
Fr	Ra	**	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn						
	*	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Но	Er	Tm	Yb	Lu	
	**	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr	

图 2.2.11 VASP INSTRUCTOR 里的 POTCAR Editor

Settings         View           Local:         D:/Local_Storage/10.250.112.33//home/gx/gx/test8/           @ Remote:         10.250.112.33 [/home/gx/gx/test8/	1	*
NCAR POTCAR POSCAR Direct->Cartesian ReCentering Open POSCAR	Select Mode	X Multi Atoms: Area Pick Del Y T F z X y z
		7
MAGMOM In INCAR:	Ŀ	Pre Next

图 2.2.12 VASP INSTRUCTOR 里的 POSCAR Editor





VASP INSTRUCTOR     Settings View		-	
Local:         D;/Local_Storage/10.250.112.33//home/gx/gx/tests/ <ul></ul>	8/		2
Incar     Precision       IBRION = 2     EDIFF = 1E-06       Symmetry ON     Guassian-Smearing       ISYM = 1     ISMEAR = 0	Write Files		
Cell         a = 3.818; b = 3.811           Elements:         2 Si; total atoms: 2	POTCAR PAW PBE Si 5 5	<u>ग्राइ)</u> hod: Monk i 5	:horst
Server  Use Individual Script: Use Generated Script:	Saved Scripts for QSub: gsub job.pbs Cmds Line for submission: gsub job.pbs QSUB	•	Edit
	Pre Close		

图 2.2.24 VASP INSTRUCTOR 里的 PBS Server

🕜 Add QSubbed job to Pi	roject	?	$\times$
Enroll job to Projects	Manger		
Projects:	Project:		
<ul> <li>✓</li></ul>	qe tt tt		
test1			
	Job Details:		
	ОК	Car	ncel

图 2.2.25 添加刚递交的任务到项目任务管理器

# 5. 项目任务管理器

项目任务管理器可以管理不同服务器、不同账号下的任务,并按项目分类。可以通过点击 顶部菜单栏 PD 按钮调用。

Projects & Jobs Manager					_		$\times$
nenu Snow	(M)						
Projects: > TTT = newtest = mytest > QEtest	Project: TTT/ JobName	Time	Server	User	Server: 10.250 User: gx ALL Today Yesterday Last 7 day 2017-09 2017-08 2017-06	0.112.33 S	•
	🔂 Ref	lesh	Check Jobs S	Status			
	JobName job job job	Time 2017-09-28 15:40 2017-09-26 15:58 2017-09-26 15:50	Server 10.250.112.33 10.250.112.33 10.250.112.33	User gx gx gx			

图 2.2.26 项目任务管理器



图 2.2.27 项目管理器动作条

项目管理器动作条提供了多个按钮,刷新状态、创建新项目、创建新的子项目、重命名、

Project: TTT/T1/			
JobName	Time	Server	User
vasp_test	2017-09-02 15:06	10.250.117.18	gx
job	2017 00 26 15.50	10 250 112,33	gx
	Delect job		
	Find Job on Server		
	Copy Jobpath to Clip	board	
<			>

图 2.2.28 项目内任务列表及其右键菜单



图 2.2.29

在右键菜单栏里提供了 5 个数据处理的选项: Analyze Density of States (DOS), Analyze Bands Structures, Analyze Trajectory, Analyze Charge Density 和 UT NEB Analysis。

### 6.1 DOS

VASP 输出文件的 DOS 处理,可以双击 DOSCAR,打开 DOS Siever,Graphic Instructor 会自 动下载此目录下的 DOSCAR, INCAR 和 CONTCAR 并读取相关信息。



Settings					
Local e/fudannt     Remote //home/us	hpcc.cn/home/users/gx/l sers/gx/Demo/DOS//	Demo/DOS// Open	x range: -20 - 8	y range:	Auto Fit Apply
DOSCAR Acquired Total N = 24 SPIN Polarized NOO = 9 Spin up spin up spin All Atoms Decomposed - Species	INCAR Acquried ISPIN = 2 LORBIT = 11	CONTCAR Acquired 2 Species Mn,O	4.8 4 3.2 8 2.4 1.6 0.8		
Mn 1-8			-18	-13.5 -9 -4.5 Energy (eV)	0 4.5
All Orbitals				••••	
Uncheck All	y _ pz 3 _ d4 _ d5				16

有关 DOS Siever 的具体功能和操作,请参见实例(???)

## 6.2 电荷密度图

🔮 Download Dilaog	
Downloading from Server: fudannhpcc.cn	
/home/users/gx/Demo/chg/chg/CHGCAR	
_	
✓ Overwrite	Download
	15%
44.6 kB/s	
Local:	
	Exit



具体实例请参见(???)

6.3 bands structure

计算能带 Bands structures, 可通过直接点击 CHGCAR 来打开 Bands Builder





#### 6.4 Trajectory

Analysis Trajectory 可以分析计算的每一个离子步的信息,特别是分子动力学(molecular dynamics)和结构弛豫的过程。系统会自动下载相关文件(OUTCAR, CONTCAR 等)。Trajectory 可以可视化分析每一步的能量一节各个原子的受力、电荷、磁性等信息。



6.5 UT NEB



UT NEB 可以分析 NEB 计算的结果,实例参见(???)

# 7. 其他相关内容