

Abinit5.8.3 软件使用指南

2009 年 7 月

中国科学院计算机网络信息中心超级计算中心

目录

Abinit5.8.3 软件使用指南	1
目录	2
1. 软件介绍	3
2. 软件的安装与测试	3
2.1 安装目录及安装信息	3
2.2 测试结果	3
3. 软件的运行使用方法	4
3.1 串行	4
3.2 mpirun	4
3.3 bsub	5
4. 运行相关	5

1. 软件介绍

ABINIT 是由 Xavier Gonze 所领导、世界上众多电子结构计算研究人员集体开发的平面赝势法电子结构计算程序包。可以进行如下的计算：

- 1、通常的电子结构计算（晶格参数、结合能、体弹性模量、能带结构、电子态密度和电荷密度分布）
- 2、分子动力学模拟
- 3、晶体磁性和磁结构的计算
- 4、基于线性响应或密度泛函微扰理论计算声子色散曲线、声子态密度和热力学量，介电性质、Bohr 有效电荷、压电系数和弹性常数、电-声耦合常数
- 5、计算线性和非线性的光学性质
- 6、采用 GW 近似对半导体的 LDA 带隙进行修正。
- 7、基于含时密度泛函理论计算体系的激发态的性质

ABINIT 程序包是基于密度泛函理论（Density Functional Theory, DFT），采用赝势和平面波基矢的方法来处理由电子和核所组成的体系（分子和具有周期性结构的固体），它可以计算体系的总能、电荷密度以及电子结构。ABINIT 也可以按 H-F 力和压力来优化体系的几何结构，或进行根据这些力进行分子动力学模拟或计算得到动力学矩阵、Born 有效电荷及介电张量。在含时密度泛函理论的框架下可以计算分子体系的激发态，也可以基于多体微扰论（GW 近似）来处理激发态。另外，除了 ABINIT 的主要计算模块外，程序包也提供了一些不同的工具模块用来处理计算结果和数据。

2. 软件的安装与测试

2.1 安装目录及安装信息

源代码位置： /home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/abinit/SRC

安装后可运行程序的目录为： /home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/abinit/5.8.3/bin

2.2 测试结果

由于 abinit 并行的特殊性，最好先阅读相关说明（http://www.abinit.org/documentation/helpfiles/for-v5.8/tutorial/lesson_parallelism.html）

测试 1：

tests/tutorial/Input/tgw1_9.in: 用于验证 k 点并行的效果

CPU 数	Wall Time	CPU Time	CPU 并行效率	CPU 加速比
1(abinis)	542s	542s		
1	511s	511s		
2	264s	264s		
2(1,1)	278s	278s		
4	133s	133s		
4(2,2)	154s	154s		

8	71s	71s		
8(4,4)	107s	107s		
8(4,4):lustre-fullstripe	77s	77s		
16(8,8)	81s	81s		
18(6,6,6)	98s	98s		
18(6,6,6): lustre-fullstripe	49s	49s		
24(8,8,8)	108s	108s		
24(8,8,8):lustre-fullstripe	44s	44s		

测试 2:

tests/tutorial/Input/tparal_2.in: 用于验证 spin 并行的效果

CPU 数	Wall Time	CPU Time	CPU 并行效率	CPU 加速比
1	11s	11s		
2	5.7s	5.7s		
2(1,1)	5.9s	5.9s		

测试 3:

tests/tutorial/Input/tparal_3.in: 用于验证 band 并行的效果

CPU 数	Wall Time	CPU Time	CPU 并行效率	CPU 加速比
1	16.2s	16.2s		
2	10.5s	10.5s		
2(1,1)	10.1s	10.1s		

3. 软件的运行使用方法

进入数据所在目录（目录下有*.file 和*.in 文件，其中*.file 中包含了对计算数据文件和输出文件等的指定，用绝对路径或相对路径皆可）

3.1 串行

/home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/abinit/5.8.3/bin/abinis < Data

Data: 数据文件 (*.file)

3.2 mpirun

mpirun -machinefile HOSTFILE -np NPROCS

/home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/abinit/5.8.3/bin/abinip < Data

HOSTFILE: 进程 mapping 文件

NPROCS: 进程数

Data: 数据文件 (*.file)

3.3 bsub

登录到 LB 结点之后, 在\$HOME/.bashrc 文件里面加入下面内容:

```
export PATH=$PATH: /home_soft/soft/x86_64/apps/OpenSoft/abinit/5.8.3/bin/
```

用 bsub 提交作业:

```
bsub -W MIN -n NPROCS -a intelmpi -q QUEUE -e %J.err -o %J.out mpirun.lsf "
run.para DATA"
```

MIN: 为作业估计的运行时间 (分钟)

NPROCS: 作业进程数

QUEUE: 目标队列

DATA: 数据文件 (*.file)

4. 运行相关

输出文件: 在输入文件 (*.file) 中指定

耗时统计: 在输出文件末尾有统计

文件读写: 建议选择性能较好的文件系统