

# Własności strukturalne tlenków - Obliczenia

## Krótki opis usługi

Utworzony portal przeznaczony jest dla osób zajmujących się badaniem właściwości materiałów tlenkowych. Umożliwia w prosty sposób uruchamianie symulacji w programie **Quantum ESPRESSO** infrastrukturze PLGrid przez przeglądarkę internetową. Portal przygotowany jest w technologii **Responsive Web Design**, pozwalając na wygodny dostęp do obliczeń także na urządzeniach mobilnych, takich jak tablet lub smartfon.

## Aktywowanie usługi

Aby aktywować usługę należy:

- zarejestrować się w [portalu PLGrid](#) i założyć konto użytkownika (patrz: [Pierwsze kroki](#)),
- założyć grant obliczeniowy (w przypadku jeśli nie chcemy korzystać z niewielkiego grantu osobistego),
- zawnioskować o aktywację usługi *Własności strukturalne tlenków - Obliczenia* poprzez [Katalog Aplikacji i Usług](#).

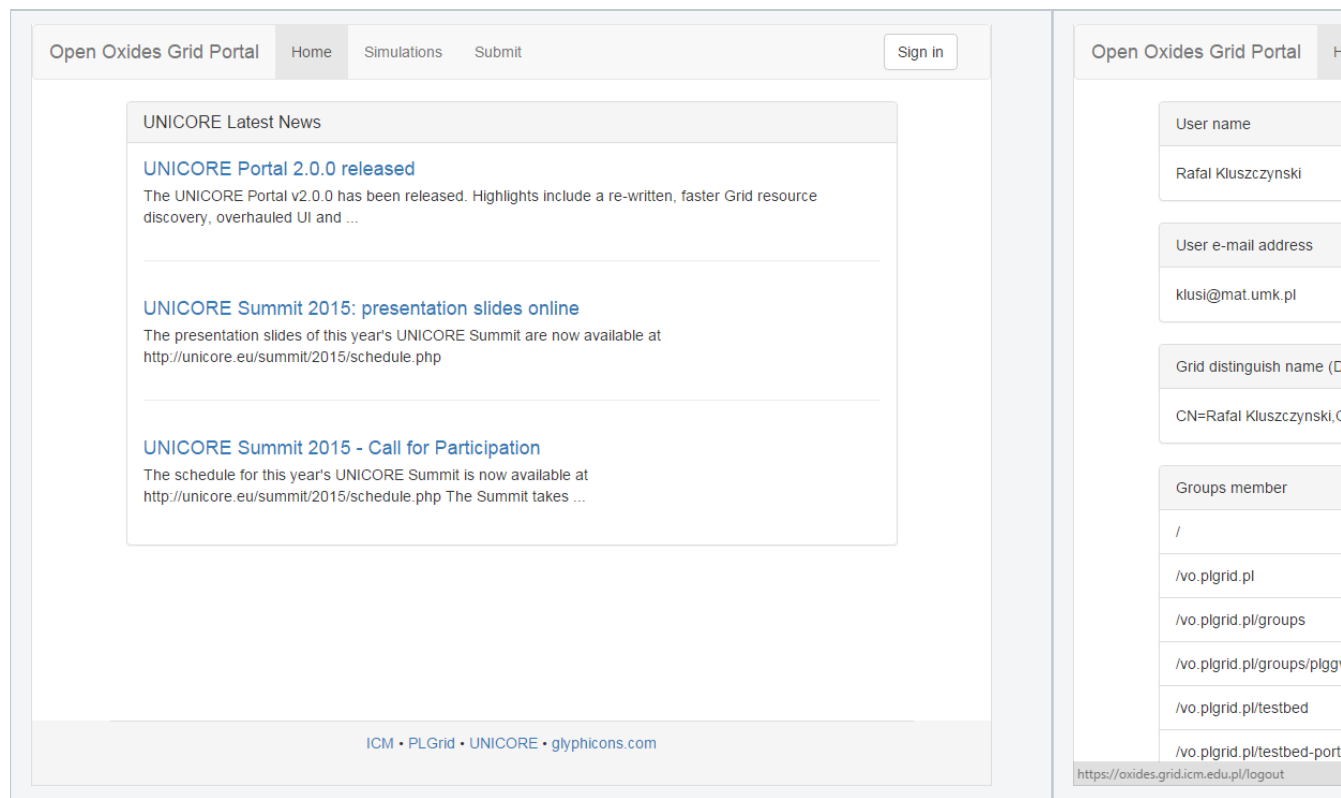
W momencie aktywacji usługi, użytkownik zostanie o tym poinformowany poprzez *e-mail*.

## Pierwsze kroki

Po aktywacji usługi można z niej skorzystać logując się do portalu symulacji tlenków dostępnego pod poniższym adresem.

<https://oxides.grid.icm.edu.pl>

Na głównej stronie znajdują się najnowsze informacje (RSS) dotyczące oprogramowania wykorzystywanego przez portal użytkowników *Open Oxides* (w tym przypadku jest to m.in. oprogramowanie pośredniczące **UNICORE**). W prawym górnym rogu znajduje się przycisk umożliwiający zalogowanie do portalu. Po jego kliknięciu zostaniemy przekierowani do usługi **Unity IDM** integrującej różne źródła uwierzytelniania, gdzie należy się zalogować z wykorzystaniem nazwy i hasła użytkownika portalu PLGrid.



The screenshot displays the 'Open Oxides Grid Portal' interface. The top navigation bar includes 'Home', 'Simulations', 'Submit', and a 'Sign in' button. The main content area features a 'UNICORE Latest News' section with three items: 'UNICORE Portal 2.0.0 released', 'UNICORE Summit 2015: presentation slides online', and 'UNICORE Summit 2015 - Call for Participation'. The footer of the main content area contains the text 'ICM • PLGrid • UNICORE • glyphicons.com'. On the right side, there is a sidebar for user profile information, including fields for 'User name' (Rafal Kluszczynski), 'User e-mail address' (klusi@mat.umk.pl), 'Grid distinguish name (D)' (CN=Rafal Kluszczynski, C), 'Groups member' (a list of groups including /vo.plgrid.pl and /vo.plgrid.pl/testbed), and a 'logout' link at the bottom.

Po udanym zalogowaniu, w miejscu przycisku pojawi się imię i nazwisko użytkownika. Jest ono równocześnie rozwijalnym menu zawierającym opcje prezentującą szczegóły użytkownika (adres e-mail, pełna nazwa certyfikatu oraz przynależne do użytkownika grupy w usłudze **Unity IDM**) oraz opcję wylogowania użytkownika. Oba widoki są prezentowane powyżej (należy kliknąć na obrazek w celu jego powiększenia).

## Zarządzanie symulacjami

W panelu nawigacyjnym portalu mamy do dyspozycji dwie pozycje:

- *Simulations*, która prowadzi do widoku umożliwiającego przeglądanie listy symulacji użytkownika,
- oraz *Submit*, po której kliknięciu pojawia się widok formularza zlecenia nowych obliczeń.

W obu przypadkach użytkownik musi być zalogowany, w przeciwnym przypadku zostanie przekierowany do okna logowania usługi [Unity IDM](#). Poniżej prezentowane są omówione widoki.

The screenshot displays the 'Open Oxides Simulations' interface. At the top, there are navigation tabs: 'Home', 'Simulations', and 'Submit'. A user profile 'Rafal Kluszczynski' is visible in the top right. The main content area is titled 'Open Oxides Simulations' and includes a 'Refresh' button. Below this is a table with the following data:

Name	Status	Submission Time	Actions
new simulation of BeO	RUNNING	2015-11-05 10:55:12	Files Details Destroy ✕
simulating BeO again...	SUCCESSFUL	2015-11-05 00:09:49	Files Details Destroy ✕
testing again	SUCCESSFUL	2015-11-02 01:50:15	Files Details Destroy ✕
testing qe	SUCCESSFUL	2015-10-29 20:46:09	Files Details Destroy ✕
testing	SUCCESSFUL	2015-10-29 16:47:45	Files Details Destroy ✕

The footer of the main panel contains the text: 'ICM • PLGrid • UNICORE • glyphicons.com'. On the right side, there is a sidebar titled 'Quantum Espresso' with input fields for 'Name', 'Project', 'QE Input', and 'Files'. The 'QE Input' field shows a list of values: 6.4, 1.8, 1.8, ATOM, Be 9., O 15., ATOM, O C, Be (, K\_PC, 8 8 8. The 'Files' field has radio buttons for 'E' and 'C', and buttons for 'Choose' and 'Reset'.

W przypadku prezentacji listy zleconych poprzednio symulacji (zakończonych lub trwających), użytkownik ma możliwość:

- odświeżenie pełnej listy symulacji użytkownika (przycisk *Refresh*),
- wyświetlenie plików pojedynczej symulacji (przycisk *Files*),
- wyświetlenie szczegółów określonej symulacji (przycisk *Details*),
- usunięcie wybranej symulacji z listy wraz z jej plikami (przycisk *Destroy*).

Natomiast podczas zlecenia obliczeń przez użytkownika, posiada on możliwość ustawienia następujących parametrów:

- nazwa symulacji widoczna na liście obliczeń użytkownika,
- nazwa grantu wykorzystywanego w trakcie obliczeń,
- plik konfiguracyjny programu *Quantum ESPRESSO*,
- dodatkowe pliki wykorzystywane podczas obliczeń (np. potencjały atomów),
- inne zaawansowane parametry (domyślnie ukryte) jak: nazwa kolejki, wielkość pamięci na poszczególnych węzłach, liczba węzłów i procesorów na poszczególny węzeł oraz typ węzła.

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 ICM w przypadku większej liczby węzłów powinniśmy specyfikować wartości tak, żeby wykorzystywały wszystkie rdzenie węzła.

## Przykład symulacji

Zaprezentujemy teraz przykład opisanego w poprzedniej sekcji zlecenia obliczeń. W tym celu wybierzemy [tlenek berylu \(BeO\)](#). W pierwszym kroku pobieramy gotowe pseudo-potencjały:

- atomu berylu: [Be.pbe-s-hgh.UPF](#),
- atomu tlenu: [O.pbe-hgh.UPF](#).

Nazwy tych plików są podawane w pliku konfiguracyjnym programu *Quantum ESPRESSO* (wiersze 38 i 39), dlatego w przypadku zmiany nazwy należy także zmodyfikować poniżej zaprezentowany plik wejściowy.

## Przykład pliku konfiguracyjnego symulacji Quantum Espresso

```
&CONTROL
  calculation = 'relax' ,                               ! 'scf', 'nscf', 'bands', 'relax', 'vc-relax', 'vc-md'
  restart_mode = 'from_scratch' ,
  pseudo_dir = '.' ,
  verbosity = 'default' ,
  tstress = .true. ,
  tprnfor = .true. ,
  prefix = 'BeO' ,
  nstep = 1 ,                                           ! number of ionic steps
  etot_conv_thr = 1.0E-5 ,
  forc_conv_thr = 1.0D-4 ,
  iprint = 1 ,
/
&SYSTEM
 ibrav = 0 ,
  nat = 2 ,
  ntyp = 2 ,
  ecutwfc = 147.06 ,                                  ! en-cut
  occupations = 'smearing' ,
  smearing = 'gauss' ,                                ! 'gauss', 'mp', 'mv', 'fd'
  degauss = 0.005 ,
/
&ELECTRONS
  electron_maxstep = 4000 ,                            ! max iterations in scf step
  conv_thr = 1.0d-7 ,
  diagonalization = 'david' ,                          ! 'david', 'cg'
/
&IONS
/
&CELL
!cell_factor = 2.2
/
CELL_PARAMETERS angstrom
 6.407416850000000e-08  1.81766268344163e+00  1.81766265471145e+00
 1.81766268365327e+00  2.597890000000000e-08  1.81766265449981e+00
 1.81766268365327e+00  1.81766265449981e+00  -2.751278900000000e-09
ATOMIC_SPECIES
Be 9.01218 Be.pbe-s-hgh.UPF
O 15.9994 O.pbe-hgh.UPF
ATOMIC_POSITIONS {crystal}
O 0.500000000000000 0.500000000000000 0.500000000000000
Be 0.000000000000000 0.000000000000000 0.000000000000000
K_POINTS automatic
8 8 8 1 1 1                                           ! kpoints
```

Następnie w formularzu zlecenia obliczeń (menu *Submit* w panelu nawigacyjnym portalu) należy:

- wpisać wymaganą nazwę symulacji widoczną na liście obliczeń,
- podać identyfikator grantu (w przypadku nie wypełnienia zostanie wykorzystany grant domyślny użytkownika),
- umieścić treść pliku wejściowego polu tekstowym **QE Input**,
- wgrać pliki pseudo-potencjałów w sekcji **Files**,
- dodatkowo należy wpisać w polu **Nodes Property** typ węzła *westmere* (jest to pole zaawansowane, dostępne po kliknięciu przycisku *Show Advanced Parameters*).

Ewentualnie w celu przyspieszenia obliczeń można wpisać w polu **CPUs / Node** przykładowo wartość 12.

W momencie, gdy wypełnimy wszystkie interesujące nas pola, możemy kliknąć przycisk *Submit Simulation*, który zleci przeprowadzenie obliczeń na infrastrukturze PLGrid. O sukcesie zlecenia zadania zostaniemy poinformowani komunikatem w prawym górnym rogu strony formularza.

## Przeglądanie wyników

Portal *Open Oxides* pozwala na przeglądanie utworzonych podczas symulacji plików. W tym celu należy przejść do widoku listy symulacji (*Simulations* w górnym pasku nawigacyjnym). Następnie, po wybraniu symulacji, należy kliknąć przycisk *Files* w wierszu tej symulacji. Zostanie załadowany nowy widok umożliwiający przeglądanie plików danej symulacji (co może odbywać się także trakcie samych obliczeń).

Podczas przeglądania plików, w górnej części okna, mamy zawsze widoczną jej ścieżkę. Umożliwia ona powrót do dowolnego katalogu znajdującego się na ścieżce aktualnie przeglądanej. Poniżej użytkownik widzi listę plików i katalogów aktualnej lokalizacji. Przy każdym z elementów są do dyspozycji odpowiednie akcje:

- w przypadku plików, jest możliwość pobrania zawartości (otwieranej w nowym oknie przeglądarki),

- w przypadku katalogów, mamy możliwość przejścia do danego katalogu,
- jeśli natomiast jednym z elementów jest plik w formacie **Jmol** (rozszerzenie pliku *\*.mol* lub *\*.jmol*) pojawi się dodatkowy przycisk umożliwiający wizualizację struktury.

Poniżej prezentowany jest przykładowy widok listy plików oraz przykład wizualizacji.

/BeO.wfc3	Show
/BeO.wfc4	Show
/BeO.wfc5	Show
/BeO.wfc6	Show
/BeO.wfc7	Show
/BeO.wfc8	Show
/BeO.wfc9	Show
/input	Show
/O.pbe-hgh.UPF	Show
/result.mol	View Show
/simulation.in	Show
/simulation.out	Show
/stderr	Show
/stdout	Show
/TSl_script_file_19178	Show
/UNICORE_SCRIPT_EXIT_CODE	Show

Simulation: 968

Simulation Directory / r

ICM • PLGrid • UNICORE • glyphicons.com

## Gdzie szukać dalszych informacji?

Po udanym przeprowadzeniu przykładowych obliczeń, czas na własne eksperymenty. 🍷

Dodatkowe informacje o samym oprogramowaniu Quantum ESPRESSO można znaleźć na stronie [www.quantum-espresso.org](http://www.quantum-espresso.org):

- [dokumentacja programu](#),
- baza gotowych do użycia [pseudo-potencjałów atomów](#).

W razie problemów wystarczy skorzystać z [Helpdesku](#) informując w treści, że problem dotyczy gridu dziedzinowego **Open Oxides**.