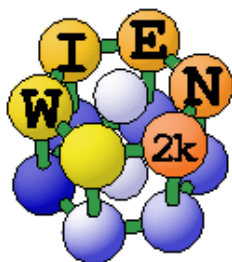


WIEN2k - FAQs

Problémy a řešení pro program Wien2k



Problémy

- [Chci počítat programem Wien2k na MetaCentru.](#)
Mám na svém počítači systém MS Windows a nemám nainstalovaný X-server pro X-windows.
- [Chci počítat programem Wien2k na MetaCentru.](#)
Mám na svém počítači systém Linux nebo Unix (mohu zobrazit grafický výstup z MetaCentra).
- [Při inicializaci špatně funguje procedura sgroup](#)
- [První cyklus skončil předčasně \(většinou hned po lapw0\) a v souboru case.dayfile se objevila hláška Segmentation fault](#)
- [Výpočet skončil chybovým hlášením L2main - QTL-B Error](#)
- [Používáte skutečně podporovanou verzi programu Wien2k-08? Pozor na kompatibilitu ...](#)
- [Mám jiný problém](#)
- [Chci jen rychle zkusit nějaký výpočet a nechce se mi čekat na frontu](#)
- [Jak spouštět výpočty pomocí fronty?](#)
- [Výsledky mých výpočtů zabírají příliš mnoho paměti](#)

Řešení

Q: Chci počítat v programu Wien2k na MetaCentru.

Mám na svém počítači systém MS Windows a nemám nainstalovaný X-server pro X-windows (např. X-Win32).

A: Jde to, ale nebudete schopni využít všech možností, které Vám MetaCentrum nabízí. Začněte tím, že si zařídíte účet na stroji skirit.ics.muni.cz. Ve svém domovském adresáři (například /home/manik/) si zřídíte adresář TiC a spusťte Wien2k.

Vaše příkazová řádka bude vypadat takto (místo manik si doplňte své uživatelské jméno):

```
$ pwd
/home/manik
$ mkdir TiC
$ cd TiC
$ module add wien2k
$ w2web
```

Postup při prvním spuštění w2web:

Počítač se Vás zeptá na přihlašovací jméno a heslo pro w2web (wien to web), které si zvolte netriviální. Ostatní údaje nechte takové, jaké jsou přednastavené. Jestliže počítač hlásí

```
w2web failed to bind port 7890 - port already in use!
```

```
You may want to try w2web -p portnumber
```

pak Vám nezbude než smazat profil .w2web zkusit to znovu takto:

```
$ rm -r ~/.w2web
```

```
$ w2web -p 7891
```

Můžete zadat i vyšší číslo portu, jestliže je port 7890 obsazen: `w2web -p číslo_portu`. Je-li port 7890 obsazený, tak je to nejspíš způsobeno jinými uživateli, kteří po sobě zapomněli proces **w2web** zabít. Neztěžujte prosím vy sami dalším uživatelům programu WIEN2k práci a vždy, když se po ukončení práce s w2web odhlásíte, zadejte ještě dva příkazy:

```
$ ps -u manik
```

```
PID TTY TIME CMD
```

```
19082 pts/0 00:00:00 bash
```

```
19141 ? 00:00:00 w2web
```

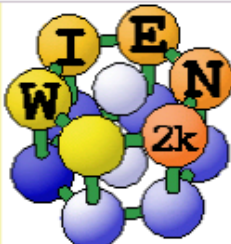
```
19142 pts/0 00:00:00 ps
```

```
$ kill 19141
```

Tím po sobě proces w2web zabijete.

Na svém vlastním počítači si pak spustíte internetový prohlížeč (Internet Explorer, Mozilla, Firefox, Opera...) a jako adresu zadáte `http://skirit.ics.muni.cz:7890`

popřípadě vyšší číslo portu (třeba 7894)



Execution >>
[StructGen™](#)
[initialize.calc](#)
[run SCF](#)
[single prog.](#)
[optimize\(V,c/a\)](#)
[mini.positions](#)

Utils. >>

Tasks >>

Files >>
[struct file\(s\)](#)
[input files](#)
[output files](#)
[SCF files](#)

Session Mgmt. >>
[change session](#)
[change dir](#)
[change info](#)

Configuration

Usersguide
[html-Version](#)
[pdf-Version](#)

Session: **TiC**
 /susi/pblaha/lapw/TiC

Tue May 24 09:17:06 2005
 STATUS: idle
[refresh](#) [norefresh](#)

StructEdit /susi/pblaha/lapw/TiC

StructGen™

You have to click "Save Structure" for changes to take effect!

Save Structure

Title:

Lattice:

P
F
B
CXY
CYZ
CXZ
R
H
1_P1

[Spacegroups from Bilbao Cryst Server](#)

Lattice parameters in Å

a=4.328000038	b=4.328000038	c=4.328000038
a=90.0000000	b=90.0000000	g=90.0000000

Inequivalent Atoms: 2

Atom 1: **Z=** **RMT=** [remove atom](#)

Pos 1: x= y= z= ← edit only this position!

Atom 2: **Z=** **RMT=** [remove atom](#)

Pos 1: x= y= z= ← edit only this position!

[add an atom](#)

Number of symmetry operations:

You have to click "Save Structure" for changes to take effect!

Save Structure

Po zadání svého uživatelského jména a hesla pro w2web už budete postupovat podle manuálu k programu Wien2k, který si lze stáhnout na adrese www.wien2k.at/reg_user/textbooks/ a v případě problémů se podívat do [FAQ](#) nebo zadat dotaz do [mailing-listu](#) (vše na stránkách www.wien2k.at).

**Q: Chci počítat v programu Wien2k na MetaCentru.
 Mám na svém počítači systém Linux (mohu zobrazit grafický výstup z MetaCentra).**

A: Začněte tím, že si zařídíte účet na stroji skirit.ics.muni.cz. Na tento stroj (nebo na jiný vámi preferovaný) se pak můžete přihlásit pomocí

```
$ ssh -X mojeUzivatelскеJmeno@skirit.ics.muni.cz
```

Přepínač -X u ssh (secure shellu) automaticky zajistí, že budete moci zobrazovat grafiku bez jakýchkoliv dalších nastavení.

Ve svém domovském adresáři (například /home/manik/) si zřídíte adresář TiC a spusťte Wien2k. Vaše příkazová řádka bude vypadat takto (místo manik si doplňte své uživatelské jméno):

```
$ pwd
/home/manik
$ mkdir TiC
$ cd TiC
$ module add wien2k
$ w2web
```

Postup při prvním spuštění w2web:

Počítač se Vás zeptá na přihlašovací jméno a heslo pro w2web (wien to web), které si zvolte netriviální. Ostatní údaje nechte takové, jaké jsou přednastavené. Jestliže počítač hlásí

```
w2web failed to bind port 7890 - port already in use!
```

You may want to try w2web -p portnumber

pak Vám nezbude než smazat profil .w2web zkusit to znovu takto:

```
$ rm -r ~/.w2web
```

```
$ w2web -p 7891
```

Můžete zadat i vyšší číslo portu, jestliže je port 7890 obsazen: w2web -p číslo_portu. Je-li port 7890 obsazený, tak je to nejspíš způsobeno jinými uživateli, kteří po sobě zapomněli proces w2web zabít. Neztěžujte prosím vy sami dalším uživatelům programu WIEN2k práci a vždy, když se po ukončení práce s w2web odhlásíte, zadejte ještě dva příkazy:

```
$ ps -u manik
```

```
PID TTY TIME CMD
```

```
19082 pts/0 00:00:00 bash
```

```
19141 ? 00:00:00 w2web
```

```
19142 pts/0 00:00:00 ps
```

```
$ kill 19141
```

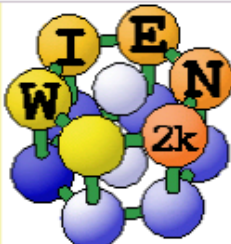
Tím po sobě proces w2web zabijete.

Dále spustíte na stroji skirit (nebo jiném vámi preferovaném stroji) prohlížeč Mozilla. Napište

```
$ module add mozilla
```

```
$ mozilla &
```

Spustí se prohlížeč Mozilla. Do pole adresy prohlížeče zadáte `http://skirit.ics.muni.cz:7890` popřípadě vyšší číslo portu (třeba 7894).



Execution >>
[StructGen™](#)
[initialize calc.](#)
[run SCF](#)
[single prog.](#)
[optimize\(V,c/a\)](#)
[mini. positions](#)

Utils. >>

Tasks >>

Files >>
[struct file\(s\)](#)
[input files](#)
[output files](#)
[SCF files](#)

Session Mgmt. >>
[change session](#)
[change dir](#)
[change info](#)

Configuration

Usersguide
[html-Version](#)
[pdf-Version](#)

Session: **TiC**
 /susi/pblaha/lapw/TiC

Tue May 24 09:17:06 2005
 STATUS: idle
[refresh](#) [norefresh](#)

StructEdit /susi/pblaha/lapw/TiC

StructGen™

You have to click "Save Structure" for changes to take effect!

Title:

Lattice:

P
F
B
CXY
CYZ
CXZ
R
H
1_P1

[Spacegroups from Bilbao Cryst Server](#)

Lattice parameters in Å

a=4.328000038	b=4.328000038	c=4.328000038
a=90.0000000	b=90.0000000	g=90.0000000

Inequivalent Atoms: 2

Atom 1: **Z=** **RMT=** [remove atom](#)

Pos 1: x= y= z= ← edit only this position!

Atom 2: **Z=** **RMT=** [remove atom](#)

Pos 1: x= y= z= ← edit only this position!

[add an atom](#)

Number of symmetry operations:

You have to click "Save Structure" for changes to take effect!

Po zadání svého uživatelského jména a hesla pro w2web už budete postupovat podle manuálu k programu Wien2k, který si lze stáhnout na adrese www.wien2k.at/reg_user/textbooks/ a v případě problémů se podívat do [FAQ](#) nebo zadat dotaz do [mailing-listu](#) (vše na stránkách www.wien2k.at).

Máte ještě možnost využít skvělé možnosti programu **XCrysDen** pro vizualizaci vašich struktur a výsledků výpočtů. Zadejte

```
$ cd TiC
$ module add xcrysden
$ xcrysden &
```

a vyberte ze záložky File / Open WIEN2k / Open WIEN2k Struct File / TiC.struct. Pokud Vám běží w2web, můžete si strukturu v programu XCrysDen prohlédnout i kliknutím na **view structure** v záložce **Utils**.



Podobný obrázek pro TiC.struct můžete získat, když po načtení struktury stisknete *c* (crystal cell) a *s* (atomic Symbols). Ve vyznačeném červeném kolečku jsou dva módy: Preset a Logic. Zvolte Logic a vypněte STICK. Nakonec můžete změnit barvu pokladu z černé na jinou kliknutím na rámeček úplně vlevo nahoře.

Q: Při inicializaci špatně funguje procedura sgroup

A: Problém je zřejmě v tom, že používáte starou verzi Wien2k-05. Přejděte na vyšší (podporovanou) verzi Wien2k-08 napsáním do příkazového řádku:

```
$ module rm wien2k
$ module rm wien2k-05
$ module add wien2k-08
```

Ve verzi 08 je již tento problém odstraněn.

Q: První cyklus skončil předčasně (většinou hned po lapw0) a v souboru case.dayfile se objevila hláška Segmentation fault

A: Před spuštěním `run_lapw` nebo `runsp_lapw` zadejte do příkazového řádku (nebo dopište do skriptu)

```
$ ulimit -s unlimited
```

To pokud používáte `bash` shell. Pokud používáte shell `csh` nebo `tcsh`, použijte místo toho příkaz

```
limit stacksize unlimited
```

Pokud nevíte, jaký shell používáte, zjistíte to příkazem `echo $SHELL`

Q: Výpočet skončil chybovým hlášením L2main - QTL-B Error

A: V tomto případě nejde o chybu MetaCentra. Musíte upravit svůj inicializační soubor `case.in1` (popřípadě `case.in1c`). Podívejte se na www.wien2k.at. V poslední záložce shora [REG USERS](#) najdete odkaz na [Frequently Asked Questions \(FAQ\)](#). Pro tento případ můžete rovnou kliknout na otázku

[LAPW-2 stops with QTL-B error or crashes with "invalid character"](#)

Q: Používáte skutečně podporovanou verzi programu Wien2k-08? Pozor na kompatibilitu

...

Je třeba dbát na kompatibilitu výpočtů, která není zajištěna pro starší verzi Wien2k-05 na strojích s procesory AMD. Chcete-li si být jisti, kterou verzi Wien2k používáte, můžete to zjistit příkazem

```
$ which run_lapw
```

správná odpověď je

```
/software/wien2k-08/i386_linux26.p4/run_lapw
```

nebo

```
/software/wien2k-08/amd64_linux26/run_lapw
```

Pokud se místo toho vypíše

```
/software/wien2k-05/root/run_lapw
```

pak používáte verzi 05. Tato verze již není podporována. Přejděte prosím na verzi 08 napsáním

```
$ module rm wien2k
```

```
$ module add wien2k-08
```

Pokud používáte svoji vlastní binární verzi programu Wien2k, zadejte příkaz

```
$ module add wien2k
```

Můžete se pro jistotu i přesvědčit, zda se použije správná verze programu:

```
$ which run_lapw
```

```
/software/wien2k-08/i386_linux26.p4/run_lapw
```

Upozornění

Pokud používáte zároveň svoji vlastní binární verzi programu Wien2k i ústřední instalaci wien2k-08 na MetaCentru, nesmíte mít v souborech ve svém domovském adresáři `~/.bashrc` `~/.cshrc` nebo `~/.tcshrc` aliasy pro příkazy Wien2k:

```
alias run_lapw='/home/manik/wien2k/run_lapw'
```

a podobně.

Q: Mám jiný problém

A: Téměř určitě už někdo před Vámi řešil stejný nebo aspoň podobný problém. Pokud odpověď nenajdete na [FAQ](#), zkuste Váš problém vyhledat na [Mailing listu](#). Pokud jde o problém MetaCentra, obraťte se e-mailem na meta|zavinac|cesnet|tecka|cz.

Q: Chci jen rychle zkusit nějaký výpočet a nechce se mi čekat na frontu

A: Pro tento účel je připravena vás obsloužit interaktivní fronta.

Její použití je snadné. Například pro interaktivní výpočty na uzlech clusteru skirit stačí zadat:

```
$ qsub -q normal -l nodes=1:ppn=1:brno:xeon,mem=499mb -I
```

```
qsub: waiting for job 135447.skirit-f.ics.muni.cz to start
```

chvíli počkejte

```
qsub: job 135447.skirit-f.ics.muni.cz ready
```

a jste například na nodu skirit28.

```
$ hostname
```

```
skirit28.ics.muni.cz
```

```
$ pwd
/home/manik
$ cd TiC
$ module add wien2k
$ ulimit -s unlimited
$ run_lapw -cc 0.000001 -i 45 -in1new 3
počkejte než doběhne výpočet a pak skončete úlohu příkazem
$ exit
qsub: job 135452.skirit-f.ics.muni.cz completed
```

Nakonec nezapomeňte zadat

```
$ clean_lapw
```

Q: Jak spouštět výpočty pomocí fronty

A: Manuál MetaCentra o [Spouštění aplikací](#) i [detailní dokumentace PBS Pro](#) ukazují vzorové příklady spouštěcích skriptů, které se zadávají do fronty, ale počítá jen s tím, že potřebujete jen jeden nebo několik vstupních souborů pro Váš výpočet. Jenže vy potřebujete celý adresář. Nabízím Vám proto hotové řešení, jak napsat a spustit skript pro Váš výpočet. Je to soubor **job**.

```
#!/bin/bash
#PBS -N moje_uloha
hostname
source /packages/run/modules-2.0/init/bash
module add wien2k
ulimit -s unlimited
```

```
mv /home/manik/TiC /scratch/manik/
cd /scratch/manik/TiC
rm *.broyd*
rm *.error*
run_lapw -cc 0.000001 -i 98 -in1new 3
echo y | clean_lapw
mv /scratch/manik/TiC /home/manik/
```

#To je všechno, konec skriptu job.

Skript si zaslouhuje okomentovat. Spouští se příkazem

```
qsub -q long -l nodes=1:ppn=1:brno,cput=700:00:00 -V job
```

když úlohu spouštíte na brněnském clusteru skirit.ics.muni.cz, a to ve frontě long (další podrobnosti v [detailní dokumentaci PBS Pro](#)). Jestliže máte Váš adresář s inicializovaným výpočtem v domovském adresáři na stroji skurut.cesnet.cz, tak místo :brno zadejte :praha. Jestliže máte adresář s inicializovaným výpočtem na stroji nympha.zcu.cz (zkopírujte si jej i na minos.zcu.cz pro případ, že použijete úlohu normal nebo short), zadáte místo :brno :plzen.

Místo moje_uloha v druhém řádku si zadejte vlastní název úlohy.

Asi už jste si všimli, že na clusteru skirit.ics.muni.cz a dalších není adresář /scratch/manik, který by odpovídal /home/manik. Tyto adresáře jsou však na jednotlivých nodech (skirit1, skirit2...). Když systém PBS Pro úlohu přijme, bude ji počítat právě na jednom z těchto nodů. Na kterém, to se můžete přesvědčit buď napsáním qstat -u manik -n anebo přímo na webu METACentra, když kliknete na záložky [Stav zdrojů](#) a zvolíte záložku Úlohy. Kliknutím na Vaše jméno budete vědět o všech Vašich úlohách i na kterém nodu se počítají.

Skript job napřed přesune adresář /home/manik/TiC (který je sdílený) do adresáře /scratch/manik/ na nodu, kde se úloha počítá. Pak se tam přesune (cd /scratch/manik/TiC) a počítá (run_lapw -cc 0.000001 -i 98 -in1new 3). Výpočet produkuje velmi velké soubory TiC.vector (popřípadě TiC.vectorup a TiC.vectordn při spin-polarizovaném výpočtu). Proto je po výpočtu zadáno echo y | clean_lapw. Procedura clean_lapw už tyto soubory smaže. Nakonec se adresář s výpočtem přesune zpátky do domovského adresáře.

Všimněte si ještě řádku před

```
source /packages/run/modules-2.0/init/bash
```

Tento příkaz vysvětluje nodu, na kterém Vaše úloha poběží, co vlastně znamená příkaz module add.

Tip:

Při výpočtech energy-volume křivky Vám procedura `x optimize`, (spustitelná i z `w2web`), nabídne skript `optimize.job`, který je psán v `c shellu`. Pak místo řádku

```
#!/bin/bash
```

napište

```
#!/bin/csh
```

a místo řádků

```
source /packages/run/modules-2.0/init/bash
```

```
ulimit -s unlimited
```

napište

```
source /packages/run/modules-2.0/init/csh
```

```
limit stacksize unlimited
```

Takto si můžete spouštět svoje úlohy. Po jejich doběhnutí třeba můžete procedurou `x kgen` zvýšit počet `k-bodů` a znovu úlohu spustit. Nesmíte už však zadávat znovu `x dstart`, tím byste vrátili výpočet zpět na začátek.

Pokud chcete sledovat váš výpočet při běhu, můžete se přihlásit na konkrétní node, na kterém výpočet běží (zde je to například node `skirit28`). Bud'

```
$ module add ssh
```

```
$ ssh skirit28
```

nebo

```
$ telnet skirit28
```

a pak

```
$ cd /scratch/manik/TiC
```

```
$ ls
```

```
$ cat TiC.dayfile
```

```
$ exit
```

Q: Výsledky mých výpočtů zabírají příliš mnoho paměti

A: Pokud budete spouštět náročné výpočty s více atomy, můžete tím zabírat velkou část paměti v adresáři `/home/vaseUzivatelскеJmeno`. Nezapomeňte, že i po promazání procedurou `clean_lapw` mohou být vaše adresáře se soubory stále hodně velké. Uložte si je raději do úložiště `MetaCentra` `/storage/home/vaseUzivatelскеJmeno/` jednoduchým příkazem

```
$ pwd
```

```
/home/manik/TiC
```

```
$ cd ..
```

```
$ mv TiC /storage/home/vaseUzivateskeJmeno/
```

Zjistit, kolik paměti Vaše výpočty v domovském adresáři zabírají lze příkazem

```
$ du -hs /home/vaseUzivatelскеJmeno
```

nebo

```
$ du -hs ~
```

Bude-li to více než 3.0G, je to příliš mnoho a systémoví administrátoři po Vás mohou chtít, abyste paměť uvolnili.

Poslední změna: 2009-11-26 16:18:00