VASP ユーザーマニュアル
（旧）

新版マニュアルはこちら：https://www.hpc.co.jp/images/pdf/manual/VaspManual.pdf

目次

1 VASP について 2
2 VASP インストール概要 3
3 VASP 実行ファイル 4
3.1 vasp 4
3.2 vasp-gamma 4
3.3 vasp-spin 4
4 VASP 実行例 5
4.1 シリアル(1CPU コア)の実行例 5
4.2 MPI 並列の実行例 5
5 既知の問題点 6
6 可視化ツール 7
6.1 p4vasp 7
6.2 VASP Data Viewer 7
6.3 XCrySDen 7
付録 A 8
A.1 HPC システムズ お問い合わせ先 8

Copyright © HPC SYSTEMS Inc. All Rights Reserved.

1　VASP について

VASP は，密度汎関数法による平面波・疑ポテンシャル基底を用いた第一原理電子状態計算プログラムパッケージです。結晶や無機固体の周期境界条件を用いた計算を行います。VASP はウィーン大学で開発された有償のソフトウェアです。VASP を使用する際は開発元とライセンス契約を行う必要があります。ライセンス契約の詳細については VASP ホームページ (http://www.vasp.at/) の FAQs をご確認下さい。

VASP のパッケージはライセンス契約をしているユーザーであれば VASP ホームページからダウンロードをすることが可能です。当社では VASP のファイルをお借りして計算機へインストールをしています。

本マニュアルでは VASP のインストールの概要とジョブの実行方法をご案内します。VASP の詳細については以下オンラインマニュアルをご確認下さい。

http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/vasp.html

Copyright © HPC SYSTEMS Inc. All Rights Reserved.

2　VASP インストール概要

本項では当社が行いました VASP のインストール内容を概説します。

VASP は以下ディレクトリにインストールをしています。

パッケージ	ディレクトリ
VASP	/usr/local/VASP-バージョン

VASP はソースコードで配布されています。VASP のインストールの際は以下のコンパイラを使用してビルドを行なっています。

パッケージ	ディレクトリ
Intel Composer XE 2013 (13.1)	/opt/intel/composer_xe_2013
Intel Math Kernel Library	/opt/intel/mkl
OpenMPI	/usr/local/openmpi-intel131

VASP の環境設定は各ユーザーのホームディレクトリのファイルで行われています。tcsh をご使用の場合は ~/.cshrc 、bash をご使用の場合は ~/.bashrc ファイル内で /home/.common 以下に用意した VASP の環境設定スクリプトを実行します。以下の環境変数をセットしています。

・PATH ：/usr/local/VASP-バージョン/bin を追加

Copyright © HPC SYSTEMS Inc. All Rights Reserved.

3　VASP 実行ファイル

VASP の実行ファイルは標準のビルドで作成した vasp と Makefile のパラメータを修正してビルドした vasp-gamma、vasp-spin の 3 種類を用意しています。

3.1　vasp

ビルド時に DNGZhalf の宣言をつけてビルドを行ったものです。基本的な VASP の実行ファイルです。

3.2　vasp-gamma

ビルド時に DwNGZhalf の宣言をつけてビルドを行ったものです。ガンマ点のみの計算をする VASP の実行ファイルです。

VASP オンラインマニュアルの『Pre-compiler flags overview, parallel version and Gamma point only version』に詳細が記載されておりますので、詳しくは以下 URL をご参照下さい。

http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/Pre_compiler_flags_overview_parallel_version_Gamma_point_only_version.html

3.3　vasp-spin

INCAR の中の LNONCOLLINER タグや LSORBIT タグを使用して計算を行う機能です。この機能は VASP 5.3.3 ではβステージ扱いで、バグが存在するかもしれないという記述も明記されています。

こちらの機能については VASP オンラインマニュアル『Non-collinear calculations and spin orbit coupling』に説明があります。

http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/vasp/Non_collinear_calculations_spin_orbit_coupling.html

なお、"vasp-spin"という名称は以下の経緯があります。この実行ファイルをビルドする際にマニュアルに記載の NGZhalf の宣言を外しておく必要がありますが、この実行ファイルに共通の決まった名前がありません。海外の大学の計算機センターなどでも様々な名称が付けられています。当社では、non-collinear spin calculations が実行可能な事から vasp-spin という名前にしています。

Copyright © HPC SYSTEMS Inc. All Rights Reserved.

4　VASP 実行例

4.1　シリアル(1CPU コア)の実行例

インプットファイルがあるディレクトリに移動して vasp コマンドを実行します。

```
[hpc@node01 ~]$ cd jobdir
[hpc@node01 ~]$ ls
INCAR KPOINTS POSCAR POTCAR
[hpc@node01 ~]$ vasp
```

4.2　MPI 並列の実行例

```
[hpc@node01 ~]$ cd jobdir
[hpc@node01 ~]$ ls
INCAR KPOINTS POSCAR POTCAR
[hpc@node01 ~]$ mpirun -np 16 /usr/local/VASP-5.3.3-22May2013/bin/vasp
```

※ –np 以降に並列数を指定します。-np の値は 2 のべき乗の数字でない場合、VASP が動作しないことがあるのでご注意下さい。
※ mpirun 以降の実行ファイルは絶対パスで指定する必要があります。実行ファイルがあるディレクトリにパスが通っていても同様です。

Copyright © HPC SYSTEMS Inc. All Rights Reserved.

5　既知の問題点

2013 年 10 月 31 日現在、VASP 5.3.3 で明らかになっている問題点はありません。

Copyright © HPC SYSTEMS Inc. All Rights Reserved.

6　可視化ツール

VASP はテキスト形式で入力用データファイルを作成し、計算結果もテキスト形式で出力されます。VASP のユーザーはこうした形式に慣れていますが、VASP をこれから始めるという場合や、VASP の計算結果を可視化したい場合、簡単なツールはないかとお問い合わせを頂く場合があります。

VASP のホームページには幾つか可視化ソフトとして紹介されています。その中で以下のソフトウェアがフリーで使用できるので、合わせてインストールをしています。

6.1　p4vasp

vasp の結果などをビジュアライズするツールです。多機能で必要十分かもしれません。
実行コマンド：p4vasp
配布元：http://www.p4vasp.at/

6.2　VASP Data Viewer

INCAR の可視化はできませんが、ELFCAR 等の一部のファイルの可視化ができます。
実行コマンド：vaspview
配布元：http://vaspview.sourceforge.net/

6.3　XCrySDen

VASP 以外にも様々なアプリケーションに対応している Viewer です。
実行コマンド：xcrysden
配布元：http://www.xcrysden.org/

Copyright © HPC SYSTEMS Inc. All Rights Reserved.

付録A

A.1 HPC システムズ お問い合わせ先

弊社ホームページ　http://www.hpc.co.jp/support_index.html

サポート案内やお問い合わせの多い内容など様々な情報を掲載しております。
是非ご活用ください。

HPC システムズ株式会社
〒108-0022　東京都港区海岸 3-9-15 LOOP-X 8 階

HPC 事業部

【営業】03-5446-5531　【サポート】03-5446-5532

お電話によるサポート受付は祝日、弊社指定休日を除く月曜日から金曜日の 9:30～17:30 とさせて頂きます。

【FAX】03-5446-5550

【電子メール】hpcs_support@hpc.co.jp

Copyright © HPC SYSTEMS Inc. All Rights Reserved.