

電気化学界面シミュレーションコンソーシアムチュートリアル向け Winmostar インストールマニュアル

2022年11月5日

本書は、電気化学界面シミュレーション (EIS) コンソーシアムの Winmostar チュートリアルに参加頂く方向けのインストール手順を示すものです。

【注意】 PC および LAN のセキュリティ設定の変更が必要な場合はインストール作業全体に数日掛かる場合があるため、余裕をもって本書の手順を実行してください。

本書の手順で想定通りに行かない場合は、[よくある質問](#)を確認または [Winmostar サポートデスク](#) にお問い合わせください。お問い合わせの際には EIS コンソーシアムのチュートリアル向けの作業である旨をお伝えください。

1. PC の準備

Winmostar V11 のネイティブ動作は Windows OS のみサポートしているため、Windows PC を準備してください。推奨スペック、対応 OS 等は [Winmostar の動作環境](#) で確認してください。

2. Winmostar V11 およびソルバのインストール

- Winmostar V10 プロフェッショナル版民間企業・官公庁向け製品のチュートリアル当日まで有効なライセンスをお持ちの方は、[こちら](#)から V11 のライセンスを無料で入手することができます。
 - EIS コンソーシアムの会員で Winmostar V10, V11 プロフェッショナル版の有効なライセンスをお持ちでない方には、3 か月間使用可能な無料トライアルのライセンスを発行します。コンソーシアムの事務局までお問い合わせください。なお、1 か月間使用可能な無料トライアルのライセンスは会員・非会員問わず[こちら](#)から随時申し込み可能です。
- ① まず[インストール方法](#)の【手順 1】から【手順 6】までを実行してください。Winmostar 本体のインストーラは[こちら](#)から V11.3.0 以降を入手してください。すでに V11.0.0~V11.2.X をインストールしている方は[こちら](#)の方法でアップデートしてください。
 - ② 次に ESM-RISM 対応 QE の Windows 向けバイナリを[こちら](#)から入手してください。すでにインストールしている方は不要です。
 - ③ 次に [Winmostar Quantum ESPRESSO ESM-RISM チュートリアル](#)の P4, 5 の手順に従い動作環境を設定してください。mpiexec には②でダウンロードしたファイルに含まれる mpiexec.exe (MS-MPI) を指定してください。
 - ④ 最後に[インストール方法](#)の【手順 8】と【手順 9】を実行してください。

3. FOCUS への接続環境の準備

【注意】 FOCUS から受講者用アカウントが発行された後（講習会開催の概ね 1 週間前）に準備を行

うことができます。

EIS コンソーシアムのチュートリアルでは VPN 方式での接続のみご案内します。公開鍵認識接続方式を希望の方は、FOCUS にご自身のアカウントをお持ちで、かつご自身のアカウント領域に ESM-RISM 対応 QE をインストール済みの方のみチュートリアルに参加できます。（将来 FOCUS の共用領域に QE7.1 以降がインストールされたら QE の個別インストールは不要です。）公開鍵認識接続方式で Winmostar から FOCUS につなぐ方法は [FOCUS スパコン向け Winmostar インストールマニュアル](#)の「6. 多段 SSH 接続の手順」を参照してください。

VPN 方式の際に必要な VPN クライアント、Tera Term、WinSCP は[こちら](#)の手順に従ってインストールしてください（Zoom は不要）。

以上