

Linux サーバ版 VASP セットアップマニュアル

2025 年 8 月 4 日

本マニュアルの目的

本マニュアルでは、単一ユーザが独占的に Linux サーバを使用して VASP のジョブを並列実行するための環境構築方法と Winmostar のリモートジョブ投入機能から Linux サーバへジョブを投入する方法を示しています。計算環境は全てユーザのホームディレクトリ配下で行うことを想定しています。複数ユーザが使用する共用サーバの環境を構築する方法、複数ノードを利用する環境を構築する方法、GPU を用いる環境を構築する方法などは本マニュアルに含まれませんので、別途お問い合わせください。

1. VASP インストール

VASP の購入元・配布元から提供されるインストール方法に従い、VASP をインストールする。

2. Linux サーバ上での最終確認

- ① Winmostar から接続するときの状況を再現するため、Linux サーバにログインしなおす。
- ② VASP の動作を確認するため、VASP の起動に必要な環境を設定するコマンドを入力しメモに控えておく。(例：OneAPI の `setvars.sh` の実行など)
- ③ Winmostar のリモートジョブの接続テスト機能からは VASP の実行ファイルとして `vasp_std` が強制的に使われるため、`vasp_std` に `PATH` が通っていない場合は、以下のように実行する (一例として、`vasp_std` が `~/vasp.6.5.1/bin/vasp651_std` というファイル名になっている場合を記載)。すでに `vasp_std` に `PATH` が通っている場合はこの操作は不要である。

```
$ alias vasp_std="$HOME/vasp.6.5.1/bin/vasp651_std"
```
- ④ 以下のコマンドを実行してインストールした `vasp_std` のパスが表示されることを確認する。表示されない場合は②および③の設定を見直す。

```
$ which vasp_std
```
- ⑤ `vasp_std` 以外の VASP 実行ファイルを Winmostar から利用したい場合は、以下のコマンドを実行してインストールした VASP 実行ファイルのパスが表示されることを確認する。(一例として `vasp_gam` の場合を記載) 表示されない場合は②の設定を見直す。

```
$ which vasp_gam
```
- ⑥ 以下のコマンドを実行して VASP が起動しバージョンが表示されることを確認する。確認できない場合は⑤の設定を見直す。

```
$ vasp_std --version
```

表示される例：

```
vasp.6.5.1 10Mar25 (build Mar 01 2025 12:00:00) complex
```

3. Winmostar からの設定および動作確認

ユーザマニュアルの [7.2. リモートジョブの設定手順](#)に従って設定し動作確認を行う。

テンプレートスクリプトを編集する際には、「# Insert commands here」 から 「# Do not modify the followings」 の間に 2-②と 2-③でメモに控えた内容および POTCAR ファイルが置かれているディレクトリを追記する。(一例として、~/vasp.6.5.1/bin に VASP 実行ファイルが存在し、vasp_std が vasp651_std というファイル名になっており、/opt/intel/oneapi/setvars.sh で利用できる OneAPI でコンパイルした場合を記載するが、実際には環境に応じてコンパイラや MPI などの各種設定が必要な場合があることに注意)

```
echo "*****"
echo "****      Set user-defined variables      ****"
echo "*****"
set -v
# Insert commands here
export PATH=$PATH:${HOME}/vasp.6.5.1/bin
alias vasp_std="${HOME}/vasp.6.5.1/bin/vasp651_std"
PATH_POTCAR_PAW_LDA=${HOME}/potpaw_LDA.64
PATH_POTCAR_PAW_GGA=
PATH_POTCAR_PAW_PBE=${HOME}/potpaw_PBE.64
source /opt/intel/oneapi/setvars.sh > /dev/null #OneAPI を使う場合

# Do not modify the followings
```

以上