winmostar チュートリアル

Quantum ESPRESSO 収束テスト

V11.12.0

2025年4月30日　　株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

本書について

- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。

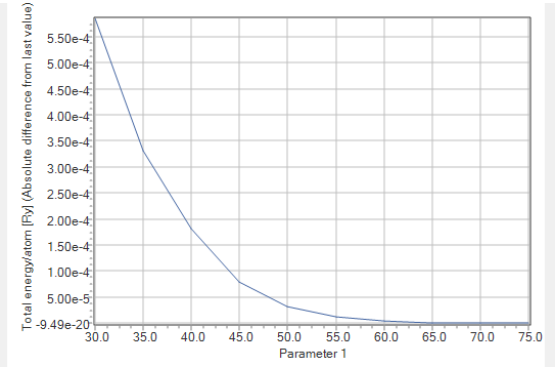
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。

- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
  - Winmostar導入講習会：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
  - Winmostar基礎講習会：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
  - 個別講習会：ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まずよくある質問を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾なく、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。

概要

- 本チュートリアルの実施にはWinmostar V11プロフェッショナル版エリートが必要です。
- 本チュートリアルでは、Si結晶のSCF計算において、カットオフエネルギーとk点数を振った計算を実行して収束テスト（convergence test）を行い、最適なカットオフエネルギー、k点数を探し出す手順を紹介します。
- 本書ではまずカットオフエネルギーのスキャンを行い、次にk点間隔のスキャンを行います。
- 本書では、パラメータを変えて計算した際に、一つ前のパラメータでの計算からの全エネルギーの変化が、あらかじめ決めた閾値（本書では比較的高精度を要求する1 meV ≈ 0.00007 Ry ≈ 0.02 kcal/molとします）を下回った時点で収束したと判断することにします。



注意点：

- 元素、使用する擬ポテンシャル、汎関数の種類によって収束挙動は異なります。

◆ Quantum ESPRESSOの計算方法及び計算設定内容の詳しい説明は、次の弊社記事をご覧ください。https://qiita.com/xa_member

Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.

動作環境設定

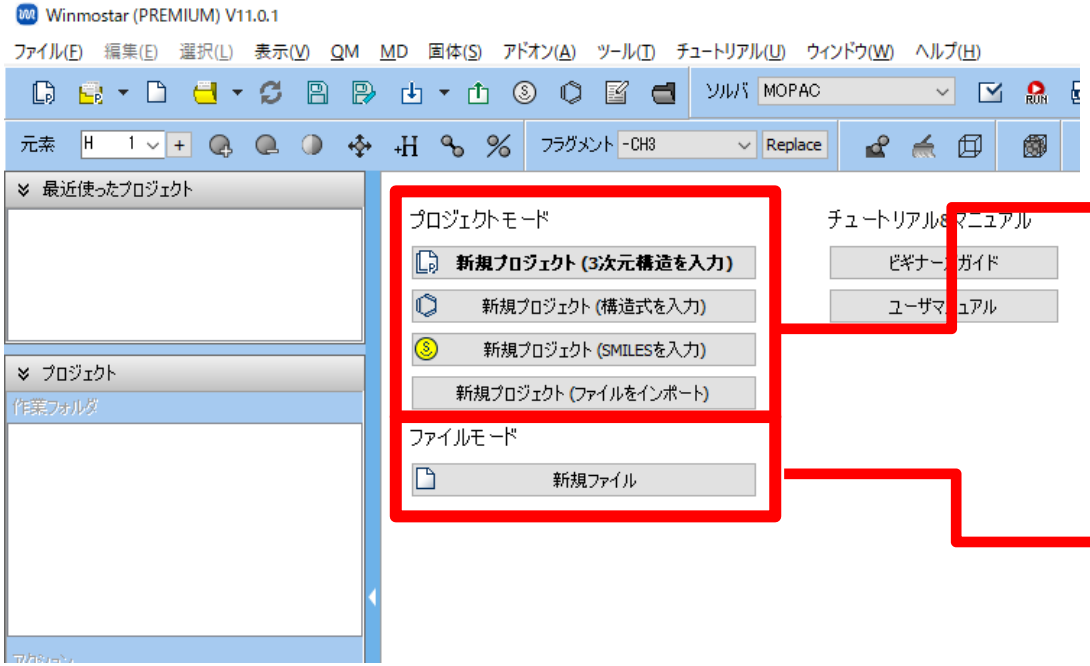
- Winmostar　V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、CygwinWM　2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定してください。
  - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版Quantum　ESPRESSOが同梱されています。

- 上記に該当しない場合、または推奨バージョン以外のQuantum　　ESPRESSOを利用したい方は、別途Windows版Quantum ESPRESSOのインストールと環境設定が必要です。

Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.

Winmostar V11の動作モード

V11には**プロジェクトモード**と**ファイルモード**の2つの動作モードが用意されています。
本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。
ファイルモードの操作方法はV10のQuantum ESPRESSOチュートリアルを参照してください。



プロジェクトモード **V11新機能**
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。
基本的にこのモードを推奨します。

ファイルモード
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.

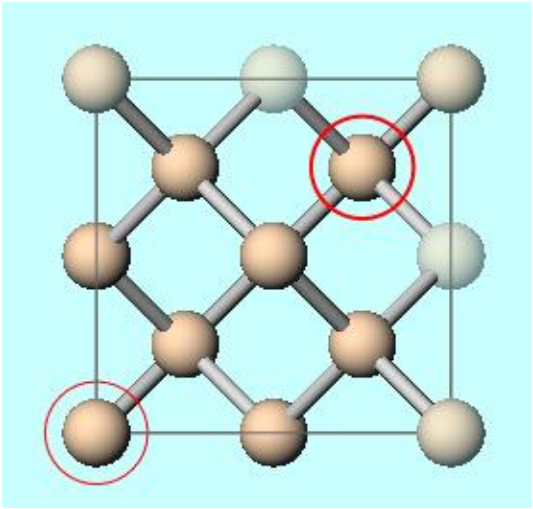
I. 系のモデリング

基本的な操作方法はQE基礎編チュートリアルを参照してください。

1. Winmostarを起動し、**新規プロジェクト（3次元構造を入力）**をクリックします。（すでに起動している場合は先に**ファイル | 閉じる**をクリックします。）
2. **プロジェクト名**に「`si_convtest_qe`」と入力し**保存**をクリックします。

初期構造の作成方法の詳細はWinmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法を参照してください。ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

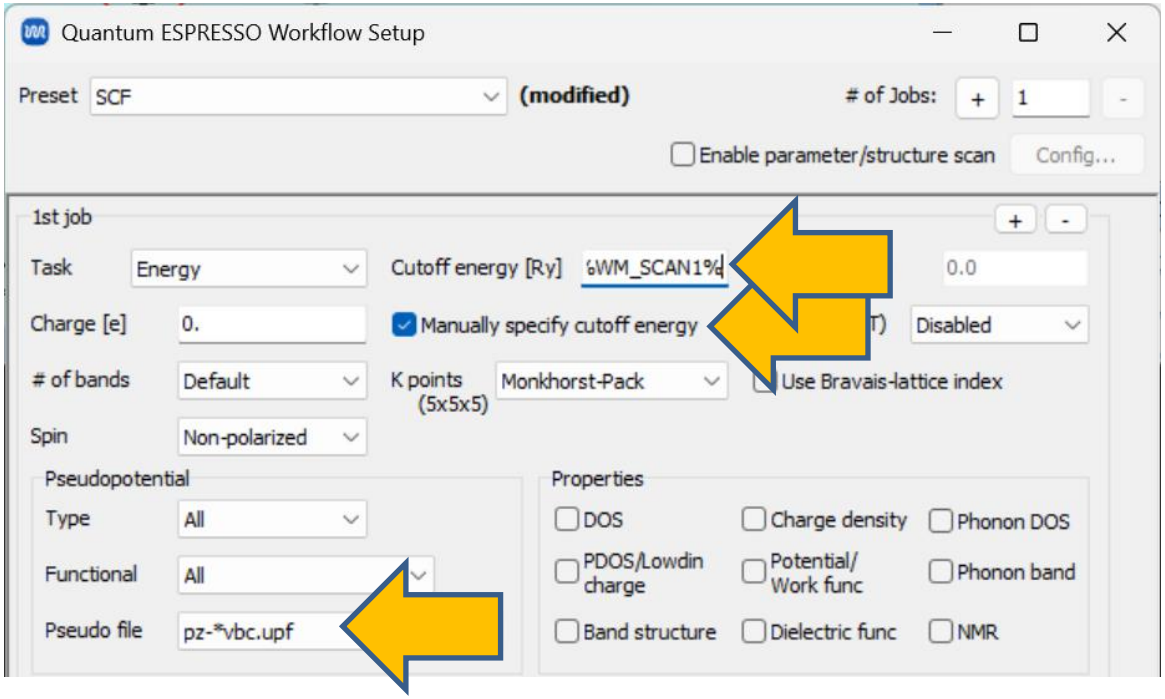
3. **ファイル | インポート | Samplesファイル | si.cif**をクリックします。
   - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりに**ファイル | ファイルをインポート**を使います。
4. **ファイルをインポート**ダイアログで**破棄して読み込み**をクリックします。



Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.

II. 計算の実行（カットオフエネルギーのスキャン）

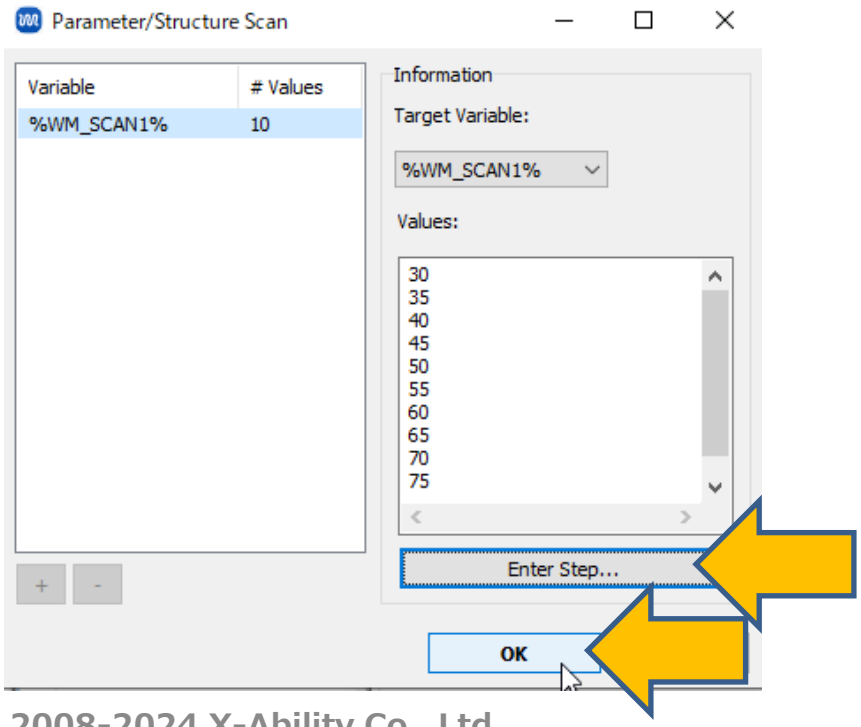
1. **ソルバ**から**Quantum ESPRESSO**を選択し **(ワークフロー設定)** をクリックします。
2. 「現在のセルはプリミティブセルに変換可能です。…変換しますか？」と聞かれたら**はい**をクリックします。
3. **Pseudo file**を**pz-*vbc.upf**に変更します。
4. **Manually specify cutoff energy**にチェックを入れ、**Cutoff energy**に「`%WM_SCAN1%`」と入力します。



Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.

II. 計算の実行（カットオフエネルギーのスキャン）

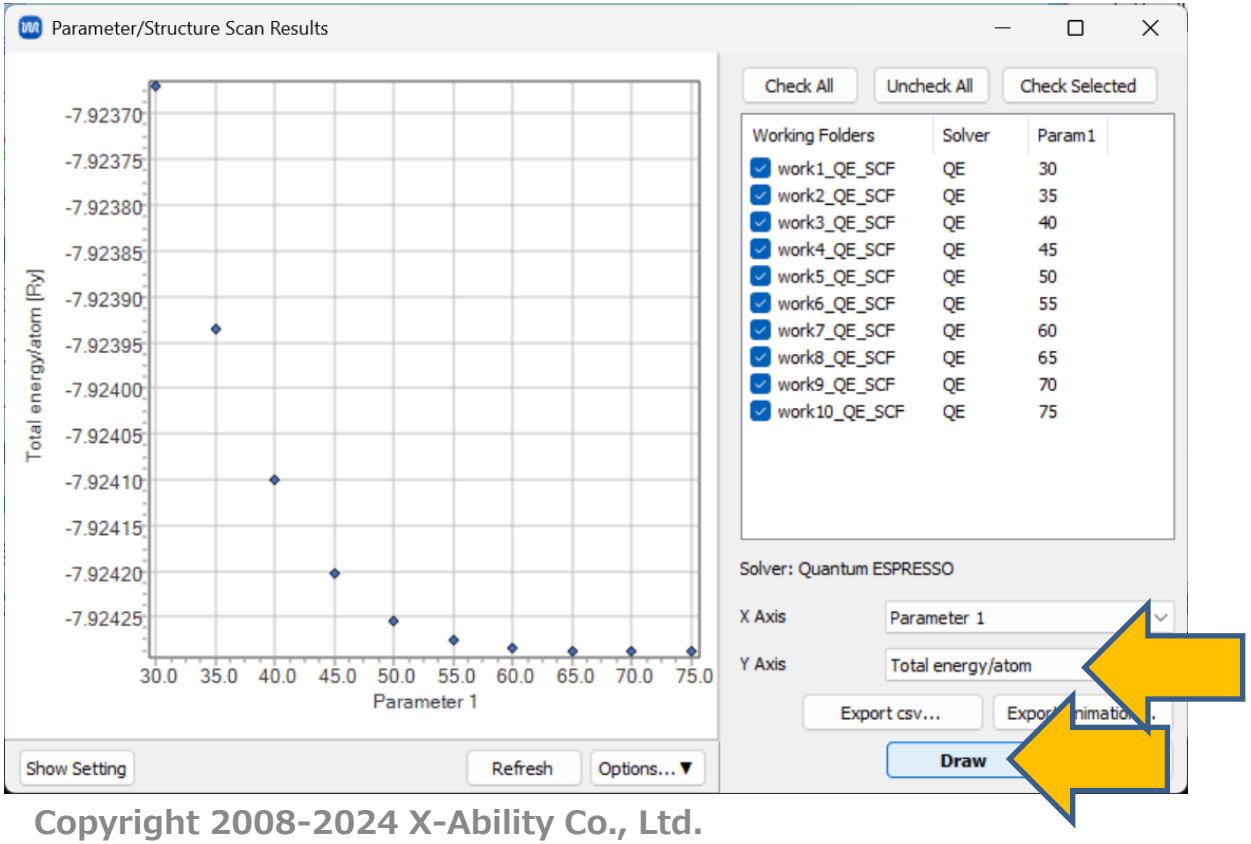
1. **Enable parameter/structure scan**にチェックをいれ**Config**をクリックします。
2. **Enter Step**をクリックし、Minimum Valueに「30」、Intervalに「5」、Number of stepsに「10」を入力します（都度OKを押すことで次の設定値入力に切替わります）。
3. **OK**をクリックし**Parameter/Structure Scan**ウィンドウを閉じます。
4. **Quantum ESPRESSO Workflow Setup**ウィンドウで**OK**をクリックし、**ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定した後**実行**をクリックします。



Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.

III.結果解析（カットオフエネルギーのスキャン）

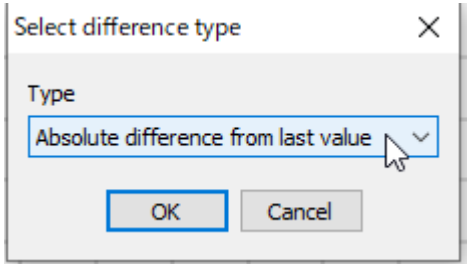
1. work1_QE_SCFからwork10_QE_SCFまでの10個の作業フォルダの**状態**が**END**または**END(-)**に変化したら、**ファイル｜プロジェクト｜パラメータ/構造スキャン結果表示**をクリックします。
2. **Y Axis**に**Total energy/atom**を選択し**Draw**をクリックして、各パラメータ（ここではCutoff energy）での1原子当たりの全エネルギーを表示させます。

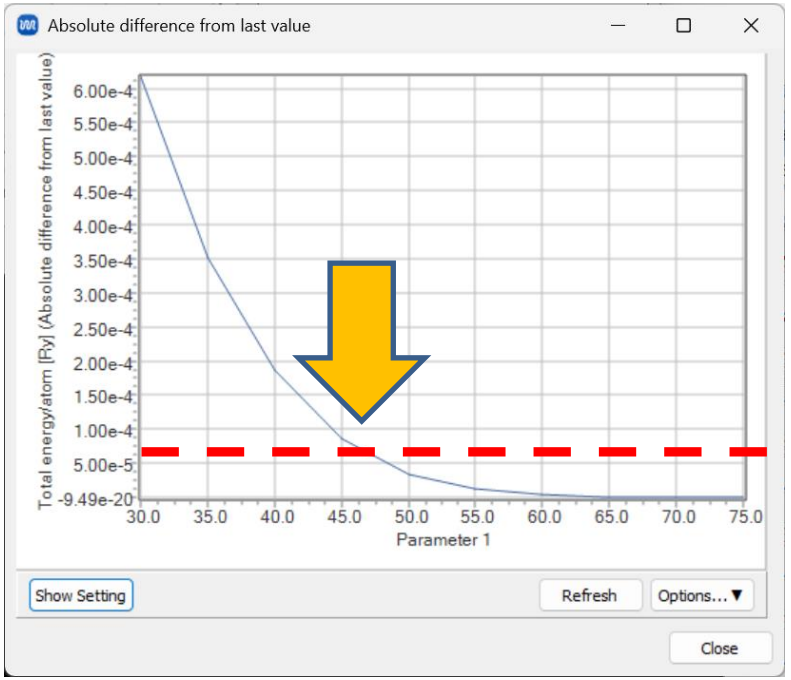


Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.

III.結果解析（カットオフエネルギーのスキャン）

1. グラフ右下の**Options | Calculate Differences from First/Last Value**をクリックします。**Type**に「Absolute difference from last value」を選択し**OK**をクリックします（スキャンしているパラメータが大きくなるほど高精度になるため最後の値からの差分を選択）。パラメータを変えた際の1原子当たりの全エネルギーの変化が表示されます。
2. 本書ではグラフの値が閾値である約0.00007 Ryを下回った50 Ryで収束したと判断します。
   - 本書では冒頭に記載の通り比較的高精度を要求する閾値を採用しています。
3. グラフの確認後**Close**をクリックし、**Parameter/Structure Scan Result**ウィンドウも**Cancel**をクリックして閉じます。

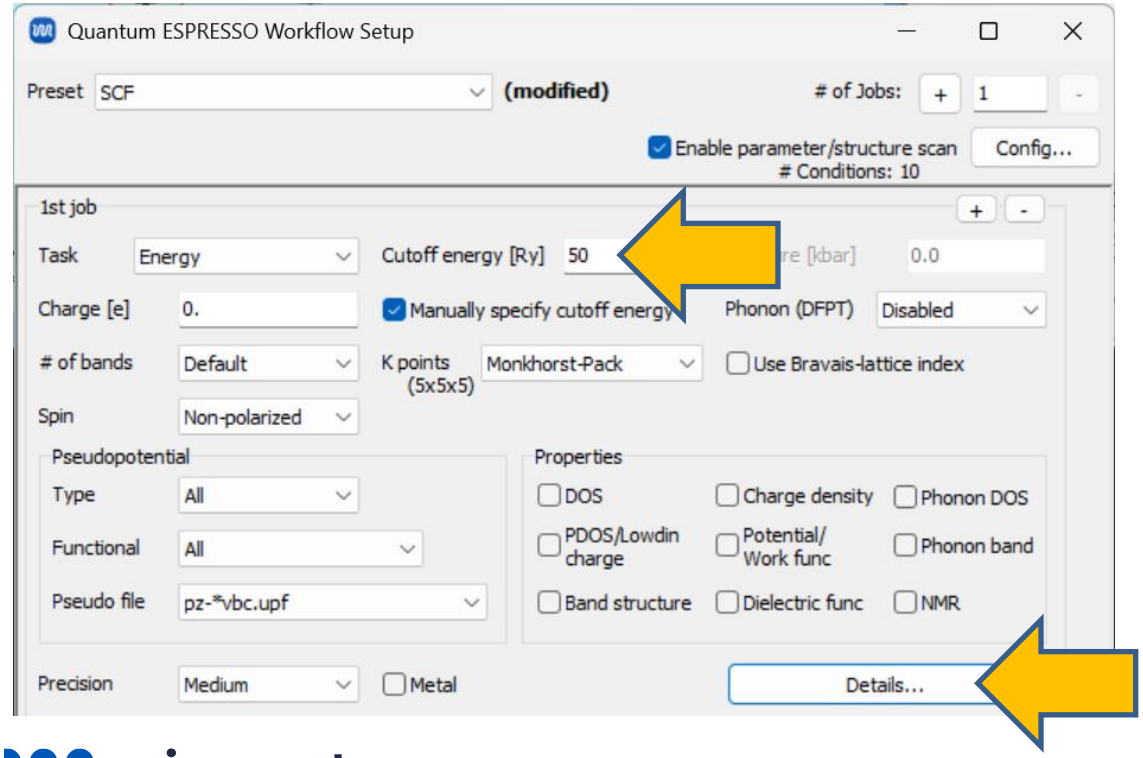


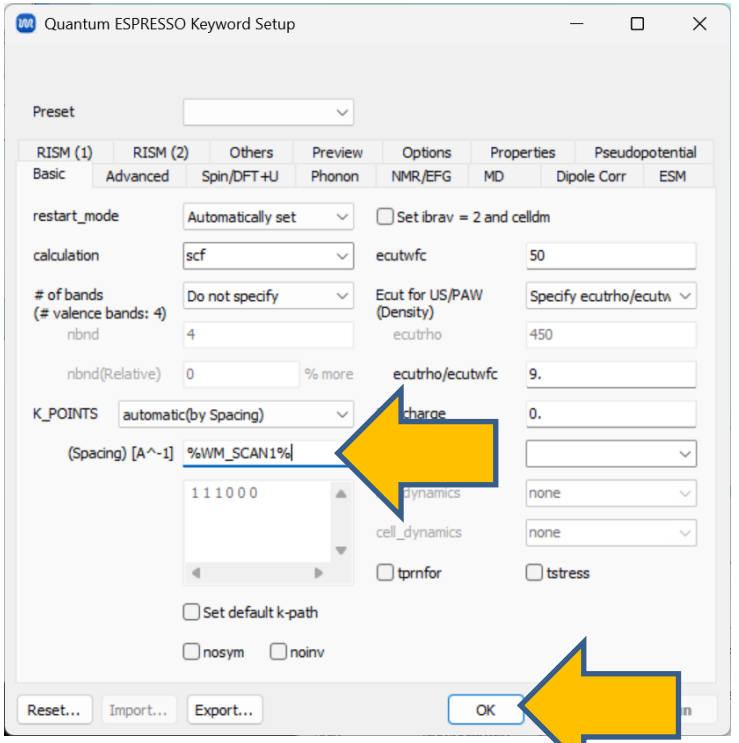


Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.

IV.計算の実行（k点数のスキャン）

1. **(ワークフロー設定)** をクリックし「継続ジョブを実行しますか？」と表示されたら**いいえ**をクリックします。
2. **Cutoff energy**にP. 10で決定した値（「50」）を入力します。
3. **Details**をクリックし、**K_POINTSの(Spacing)**に「`%WM_SCAN1%`」と入力し**OK**をクリックします。

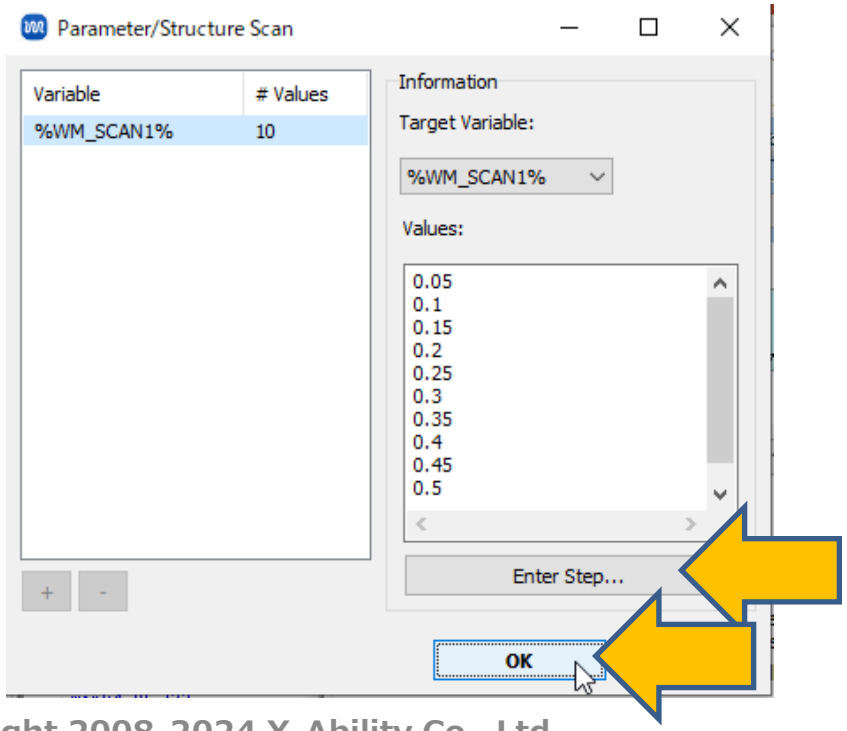




Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.

IV.計算の実行（k点数のスキャン）

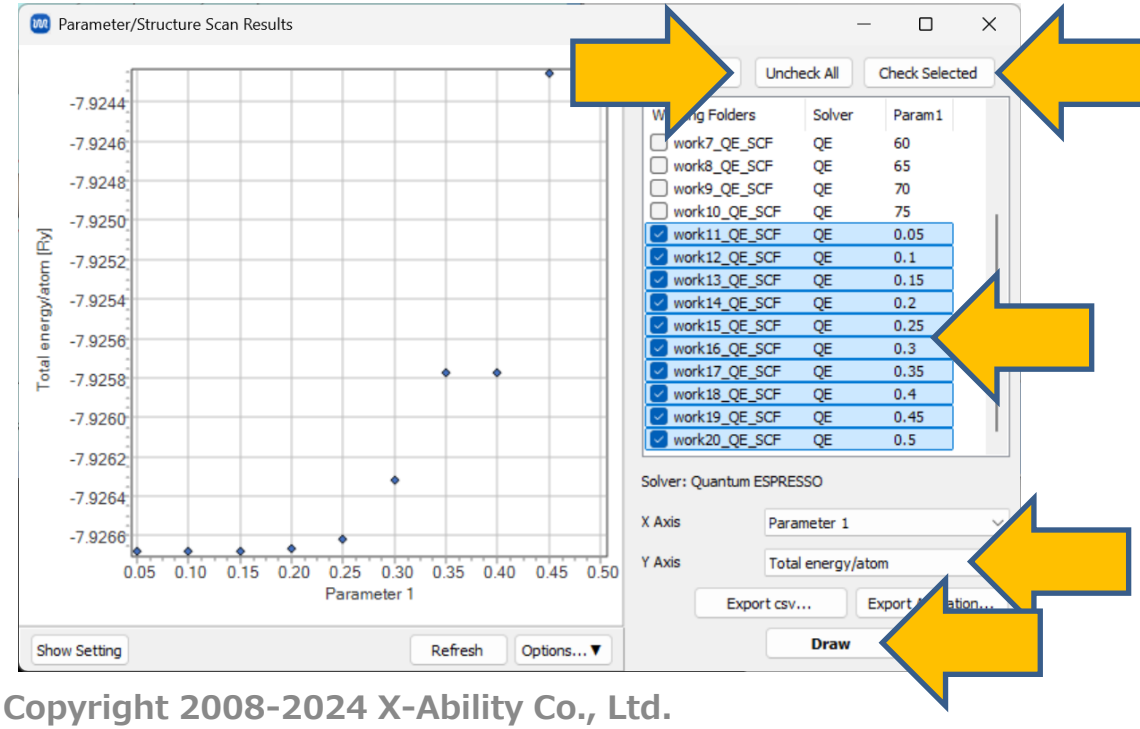
1. **Enable parameter/structure scan**の横の**Config**をクリックします。
2. **Enter Step**をクリックし、 Minimum Valueに「0.05」、Intervalに「0.05」、Number of stepsに「10」を入力します。
3. **OK**をクリックし**Parameter/Structure Scan**ウィンドウを閉じます。
4. **Quantum ESPRESSO Workflow Setup**ウィンドウで**OK**をクリックし、**ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定した後**実行**をクリックします。



Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.

V. 結果解析（k点数のスキャン）

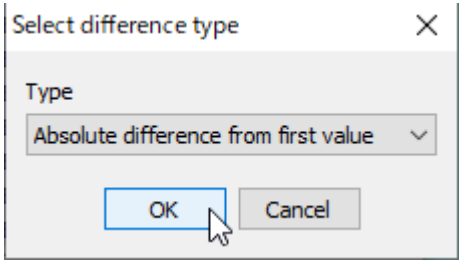
1. work11_QE_SCFからwork20_QE_SCFまでの10個の作業フォルダの**状態**が**END**または**END(-)**に変化したら、**ファイル｜プロジェクト｜パラメータ/構造スキャン結果表示**をクリックします。
2. **Uncheck All**をクリックし、**Working Folders**のリストからwork11からwork20をShift＋クリックで複数選択し、**Check Selected**をクリックします。
3. **Y Axis**に**Total energy/atom**を選択し**Draw**をクリックして、各パラメータ（ここではK spacing）での1原子当たりの全エネルギーを表示させます。

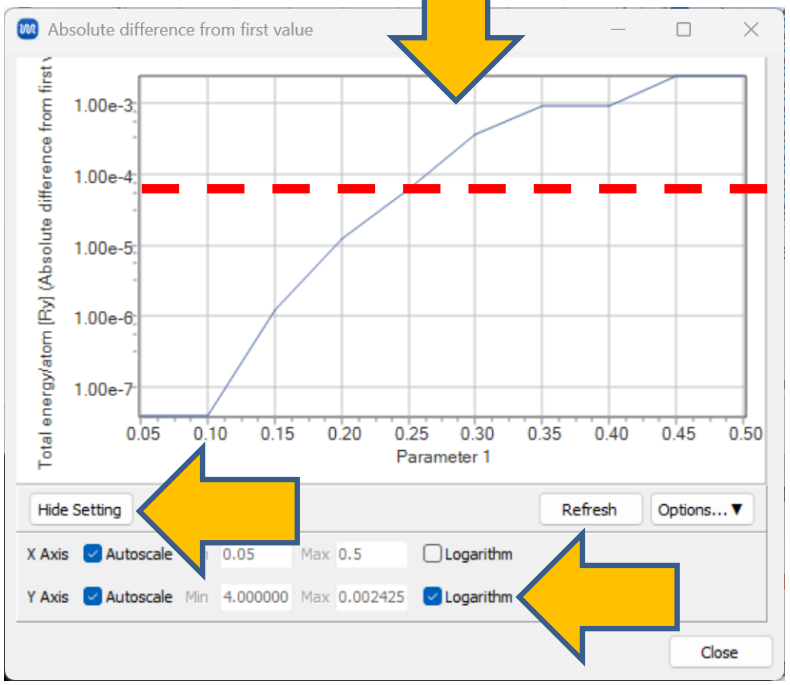


Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.

V. 結果解析（k点数のスキャン）

1. グラフ右下の**Options | Calculate Differences from First/Last Value**をクリックします。**Type**に**Absolute difference from first value**を選択し**OK**をクリックします（スキャンしているパラメータが小さくなるほど高精度になるため最初の値からの差分を選択）。
2. 縦軸の変化が大きく値を読み取りづらいため、グラフ左下の**Show Setting**をクリックし、**Y Axis**の**Logarithm**にチェックを入れます。P.10と同様に、本書の計算ではk点のSpacingが0.25 Å^{-1}で収束したと判断します。
   - 本書では冒頭に記載の通り比較的高精度を要求する閾値を採用しています。





Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.

最後に

- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。

ユーザマニュアル

Winmostar 講習会の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、Winmostar導入講習会、Winmostar基礎講習会、または個別講習会の受講をご検討ください。（詳細はP.2）
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まずよくある質問を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上

Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.