

 winmostar チュートリアル

VASP on-the-fly機械学習力場

V11.9.0

2024年7月2日

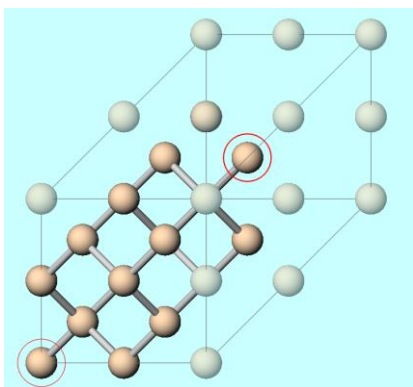
株式会社クロスアビリティ

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。
- 本書ではVASPのon-the-fly機械学習力場機能を用いてNPT計算を実行し、格子定数とセル体積の平均を取得します。



	Average,	Standard deviation,	Standard error
a	7.6579538419	0.0754961119	0.0007549611
b	7.6578321124	0.0745620139	0.0007456201
c	7.6590471729	0.0822026080	0.0008220261
volume	317.5852839631	4.1089060278	0.0410890603

注意点：

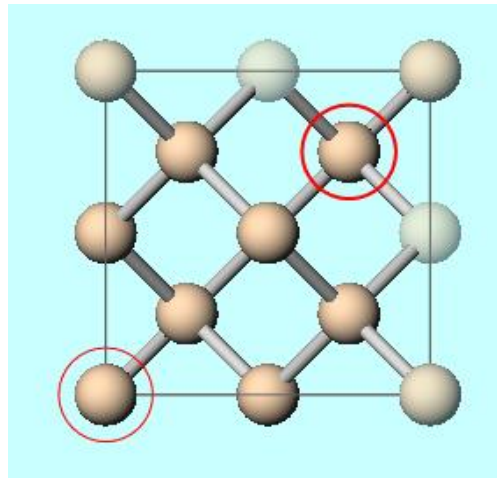
- k点の取り方、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギーは計算結果に影響を与えます。
- Winmostar V11のVASP GUIはリモートジョブのみ対応しています。あらかじめリモートサーバ上でVASPの動作環境がセットアップ済みである必要があります。

I. 系のモデリング

プロジェクトモードはVASPに対応していないため必ずファイルモードを使用してください。

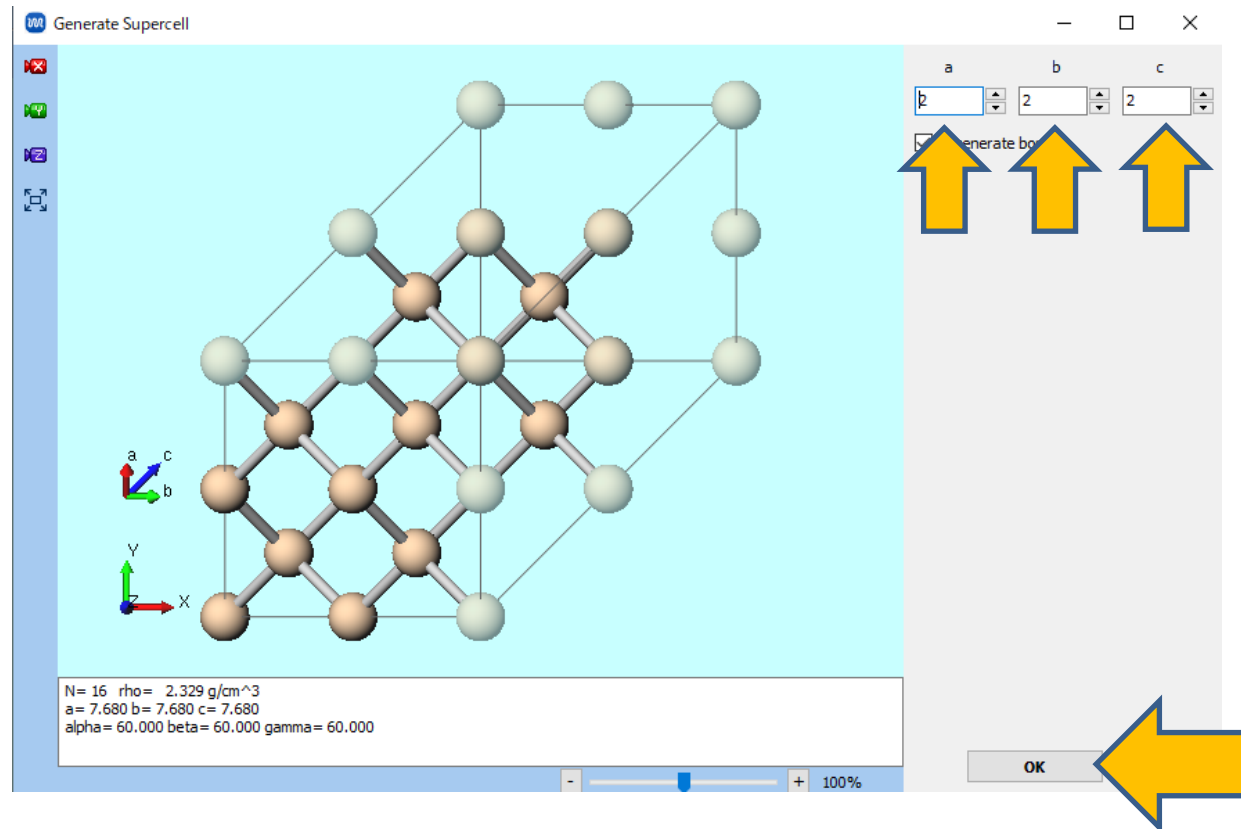
基本的な操作方法は[VASP基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

1. Winmostarを起動し、**新規ファイル**をクリックし、**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。
2. **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。



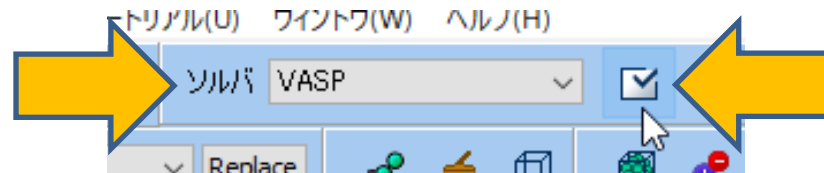
I. 系のモデリング

1. 固体 | 格子を変換をクリックし、「…コンベンショナルセルに変換しますか?」と表示されたらはいをクリックします。
2. 固体 | スーパーセルを作成をクリックし、**a**、**b**、**c**を全て「2」に変更し、**OK**をクリックします。



II. 計算の実行

1. ツールバーのソルバから**VASP**を選択します。（WinmostarV11プロフェッショナル版エリートのみ出現します）
2. **(キーワード設定)** をクリックします。プリミティブセルに変換するか聞かれたら**いいえ**をクリックします。
3. **VASP Keyword Setup**ウィンドウ左下の**Reset**をクリックし、**はい**をクリックします。

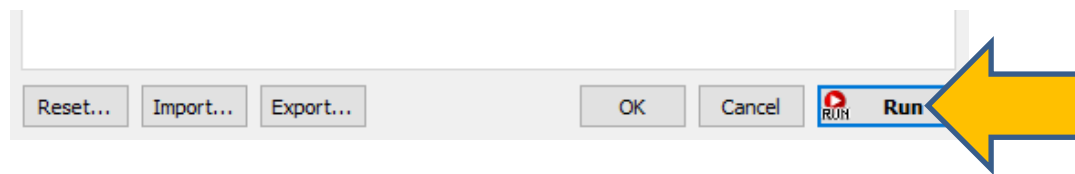


II. 計算の実行


1. **Basic**タブの**IBRION**を「0」、**ISIF**を「3」、**ENCUT**を「300」、**ISMEAR**を「-1」、**ISYM**を「0」に変更します。
2. **Advanced**タブの**NSW**を「10000」、**EDIFF**を「1E-6」、**SIGMA**を「0.0258」、**IVDW**を「10」に変更します。
3. **MD**タブの**POTIM**を「2.0」、**MDALGO**を「3」、**TEBEG**を「400」、**LANGEVIN_GAMMA**を「1」、**LANGEVIN_GAMMA_L**を「10」、**PMASS**を「10」に変更します。
4. **MLFF**タブの**ML_LMLFF**を「.TRUE.」、**ML_WTSIF**を「2」に変更します。

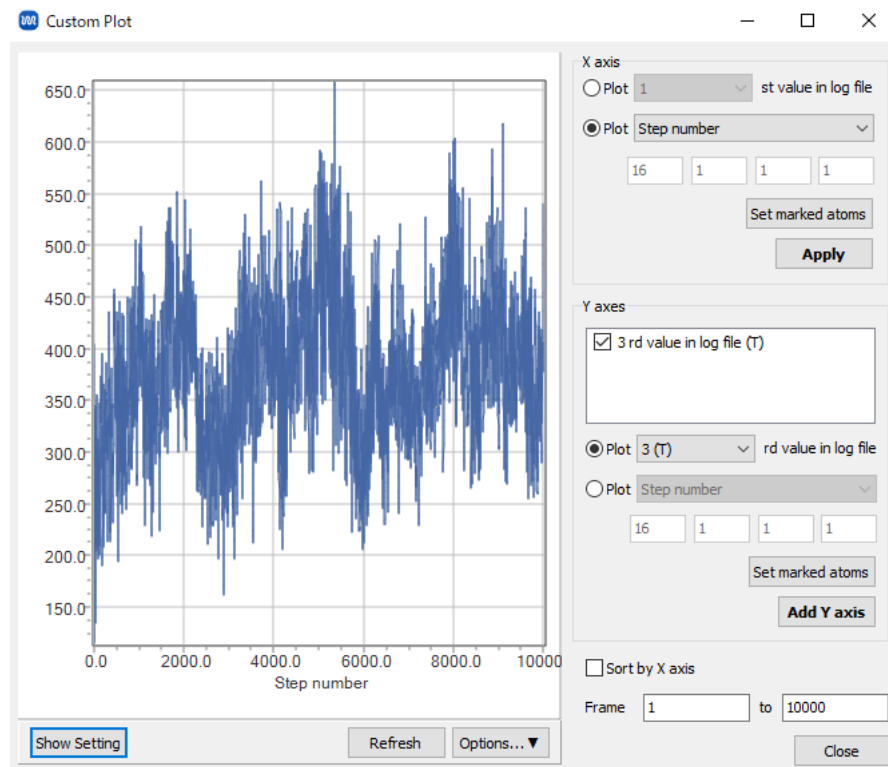
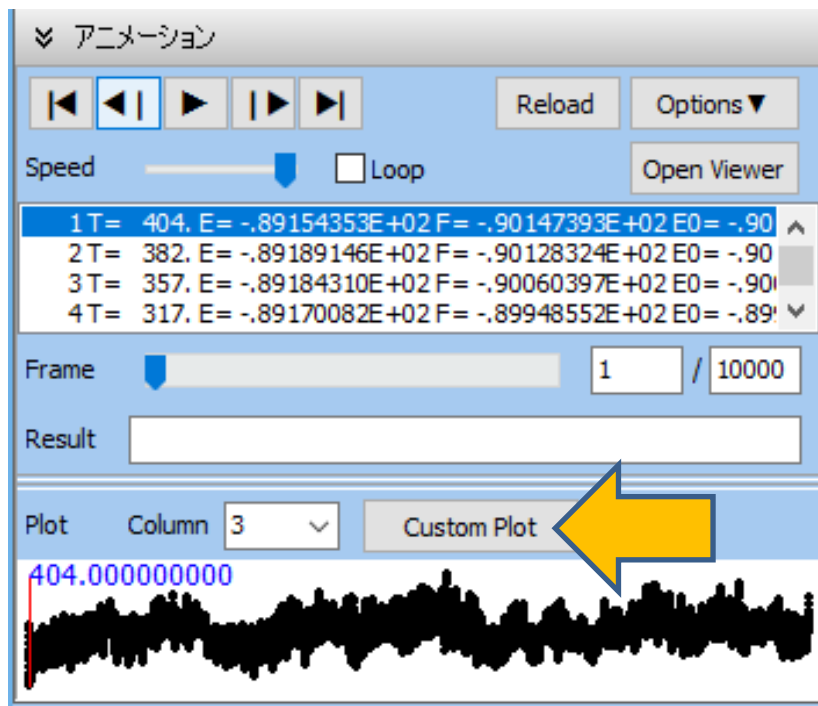
II. 計算の実行

1. **VASP Keywords Setup**ウィンドウ右下の**Run**をクリックします。（Winmostar V11のVASP GUIはリモートジョブしか対応していません。）
2. **Submit Remote Job**ウィンドウが開いたら、リモートサーバの設定を行います。設定方法は[VASP基礎編チュートリアル](#)で確認できます。
3. **Submit Remote Job**ウィンドウの**Send & Submit**ボタンをクリックし、保存するファイル名を入力して（本ページでは「si_mlff」とする）、**保存**をクリックします。
4. ジョブの終了後**Submit Remote Job**ウィンドウの**Get All Files**をクリックします。



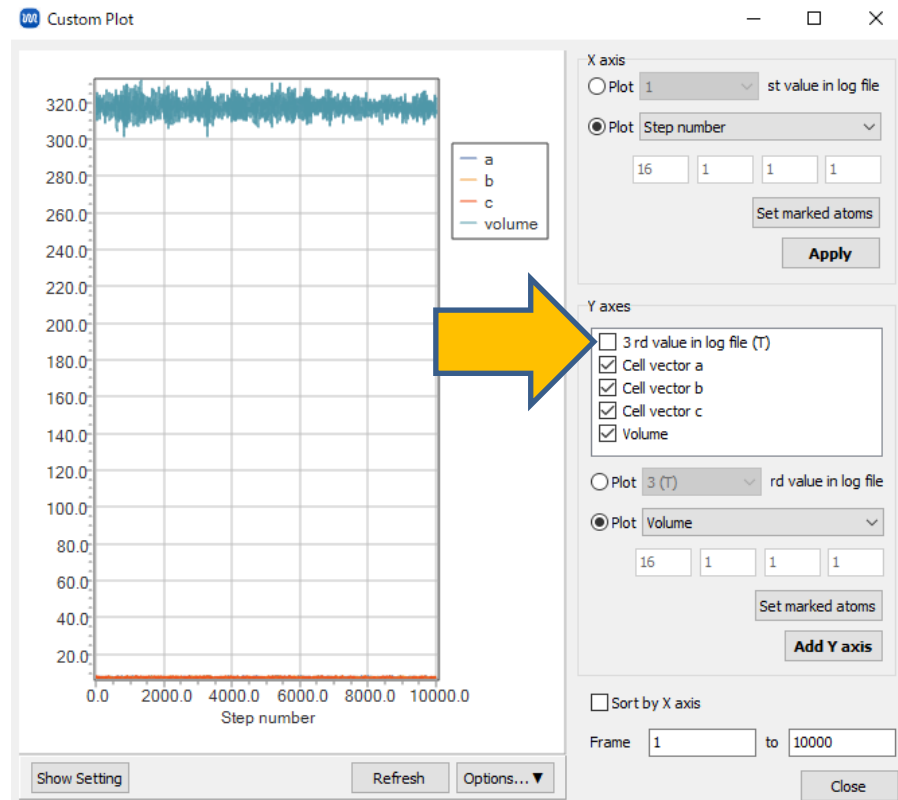
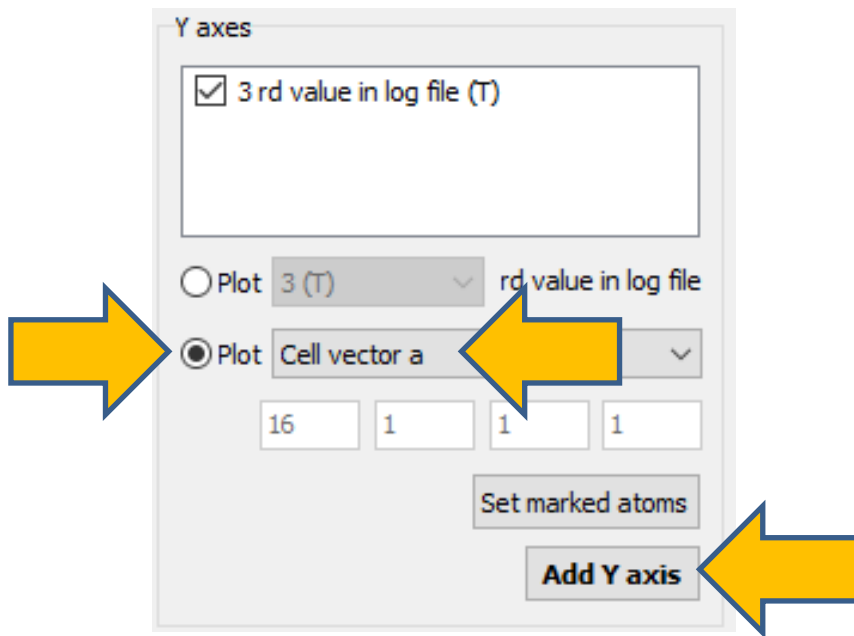
V. 結果解析

1.  (アニメーション) をクリックし、計算の実行で取得した「XDATCAR」、 「CONTCAR」 を選択し開くをクリックします。
2. Custom Plotをクリックし、 Custom Plotウィンドウを開きます。



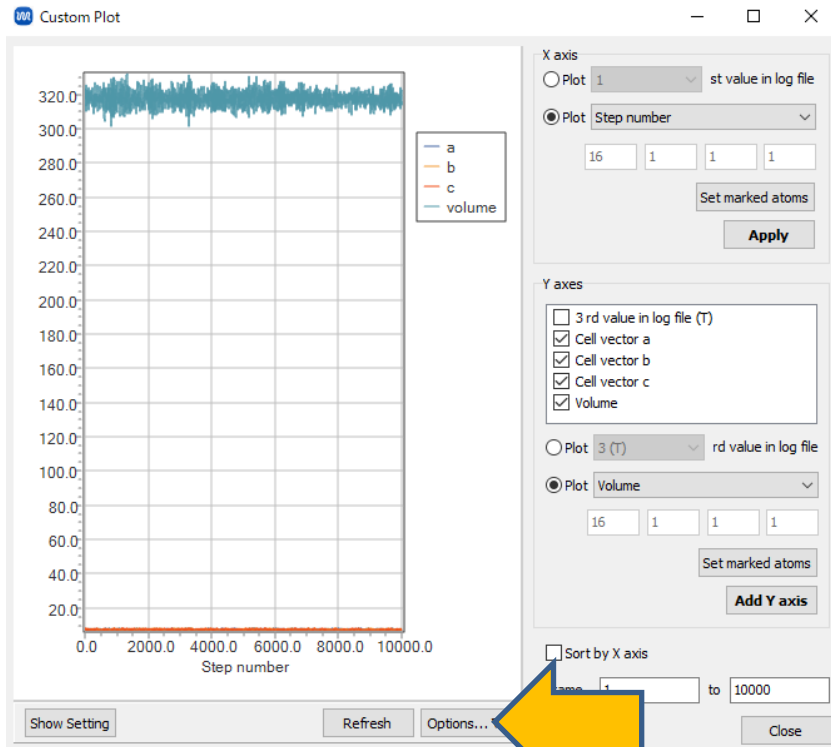
V. 結果解析

1. **Y axes** の2番目の**Plot**にチェックを入れ、プルダウンで**Cell vector a**を選択します。その後、**Add Y axes**ボタンをクリックすると、リストに**Cell vector a**が追加されます。
2. 1. と同様の手順で**Cell vector b**、**Cell vector c**、**Volume**もリストに追加します。
3. **Y axes**のデフォルトでチェックが入っていた**3rd value in log file (T)**のチェックを外します。



V. 結果解析

1. **Options**をクリックし、**Calculate Average**をクリックします。Rangeの設定は、デフォルトのまま変更せずに**OK**をクリックします。
2. **Cell vector a**、**Cell vector b**、**Cell vector c**、**Volume**の平均値が表示されます。



Average

	Average,	Standard deviation,	Standard error
a	7.6579538419	0.0754961119	0.0007549611
b	7.6578321124	0.0745620139	0.0007456201
c	7.6590471729	0.0822026080	0.0008220261
volume	317.5852839631	4.1089060278	0.0410890603

Export... Close

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