
富岳商用ソフトウェア VASP 利用手順書

2023 年 9 月

版数	更新	作成
第 1.0 版		2023/09/01

目次

1. まえがき	1
2. VASP の実行方法.....	2
2.1. module コマンドの使用方法について.....	2
3. VASP の環境変更について	3
4. 問合せ方法.....	3

1. まえがき

本書の目的

本書では、理化学研究所 計算科学研究センター (R-CCS)がスーパーコンピューター「富岳」上に整備した VASP の利用方法を説明します。

- 「富岳」の一般的な利用方法については、富岳ポータル内の各種マニュアルを参照してください
- VASP の一般的な利用方法については、VASP のマニュアルを参照してください

前提条件

利用者が「利用開始までの流れ」に従い、VASP のライセンス契約締結などの手続きを実施し、ソフトウェア利用環境設定完了通知を受領しているものとします。

2. VASP の実行方法

「富岳」上で VASP のソルバー実行するためのサンプルスクリプトは以下に格納されています。作業環境に合わせて適宜修正してください。本ジョブは計算ノードに投入します。

[ジョブ実行用サンプルスクリプト]

```
/vol0004/apps/isy/VASP6/sample_script
```

module コマンドの使用方法については後述の説明文を参照してください。

2.1. module コマンドの使用方法について

- module コマンド
環境変数を設定するために利用します。
- module use
modulefile の格納場所を指定します。変更しないでください。

- module load *modulefile*
modulefile に定義された環境変数群をセットします。

```
module load VASP6
```

を指定した場合、「富岳」上にインストールされている最新のバージョンを利用します。

重要：module load コマンドで設定される環境変数には実行時パラメーターが含まれている場合があります。実行時パラメーターを指定する場合、必ず module load コマンドより後に指定してください。

特定のバージョンを利用する場合、*modulefile* を変更します。

例：6.4.1 版を使用する場合

```
module load VASP6/6.4.1
```

modulefile に指定するキーワードは以下のコマンドで確認できます。

```
module use /vol0004/apps/isy/VASP6/modulefiles  
module avail VASP6
```

module コマンドによって設定される内容は以下のコマンドで確認できます。

```
module use /vol0004/apps/isv/VASP6/modulefiles  
module show VASP6
```

3. VASP の環境変更について

VASP の環境変更が行われる場合、変更内容と日時が「富岳」利用者ポータルサイトに掲載されます。変更内容を確認し、必要に応じて作業日時までに対応を実施してください。以下に想定される変更内容と、その変更による利用者への影響および対処方法を記します。

- **VASP のバージョンアップ**

module load に VASP6 を指定して最新バージョンを使用している場合、変更日時以降実行されるソフトウェアのバージョンが新たに導入される最新バージョンに変更されます。現在使用しているバージョンを継続して使用する場合、module load の指定に *1製品バージョン* を追加してください。

- **VASP の特定バージョン削除**

削除対象のバージョンを module load で指定している場合、変更日時以降 VASP が利用できなくなります。module load の設定を変更して別のバージョンを使用してください。

4. 問合せ方法

「富岳」固有の内容については富岳サポートにお問合せください。
VASP に関する一般的な内容については、<https://www.vasp.at/> の Forum にお問合せください。