上周把vasp6.3.0安装好了，因为新的软件提供了机器学习力场的功能，能够加速结构优化和AIMD，本周尝试了一下，用它跑了一下官方提供的样例，发现可以提升速度，三到四倍。网上看资料，如果训练好了一个好的力场，可以用更快的速度去跑。