

## 2.2 起こりがちなトラブル間違いへの対策

### 2.2.1 計算条件の決め方

### 2.2.2 エラーメッセージ対策

計算途中でエラーメッセージが出て止まってしまうことがある。ここでは、典型的なエラーとその対策について説明する。

#### 1. 原子位置でのエラー

**原因** 原子 POSITION の小数点以下がきたないことである。

(例) 0.33333000 0.16666000 0.27777000

**対策** 小数点以下をきれいにする。

(例) 0.33333333 0.16666667 0.27777778

#### 2. 計算の打ち切り

エネルギーが収束条件に満たしていないにもかかわらず、計算を終わるときがある。

**原因** INCAR ファイルの NSW や NELM の回数が上限に達しているため、計算が打ち切られる。

**対策** NSW や NELM の上限あげて計算する。収束されていなくてもエラーは知らされないため、外部緩和、内部緩和を加味して計算したときはイタレーションの数を多くなるため、OUTCAR ファイルの  $dE$  が IEDIFF の収束条件を満たしていることを確認する必要がある。

#### 3. 計算時間の見積もり

k 点をいくつとるべきか、cutoff energy の値 計算精度と時間といった、基本的であるが意外と見過ごされがちな点について説明する。

計算精度を作用するパラメータは主に、cutoff energy と K-points, cell のサイズである。検討した計算精度のパラメータを表 2.2.2 に示した。NO.1 が最も計算精度が低く、No.18 が最も計算精度を高く設定しており、No. の列に記された数が大きくなればなるほど計算精度が高く、その分計算時間を要する。つまり、精度を上げれば計算時間がかかり、精度を下げれば計算時間は短くなる。表 2.2.2 は 4 コアを使った並列計算で走らせているため、シングルコアで走らせるよりも、計算時間が短くなっている。

表 1: VASP の計算条件

No.	cell	k-points		cut off [eV]	time [minutes]
		MedeA	VASP		
1	1*1*1	0.5	3 3 3	400	0:01:23
2	1*1*1	0.5	3 3 3	520	0:01:39
3	1*1*1	0.5	3 3 3	600	0:02:24
4	1*1*1	0.3	9 9 9	400	0:04:46
5	1*1*1	0.3	9 9 9	520	0:09:02
6	1*1*1	0.3	9 9 9	600	0:40:50
7	1*1*1	0.1	15 15 15	400	0:44:39
8	1*1*1	0.1	15 15 15	520	0:36:30
9	1*1*1	0.1	15 15 15	600	1:07:03
10	2*2*2	0.5	2 2 2	400	1:23:52
11	2*2*2	0.5	2 2 2	520	1:03:04
12	2*2*2	0.5	2 2 2	600	2:01:25
13	2*2*2	0.3	3 3 3	400	2:10:01
14	2*2*2	0.3	3 3 3	520	3:40:07
15	2*2*2	0.3	3 3 3	600	5:00:41
16	2*2*2	0.1	8 8 8	400	12:30:37
17	2*2*2	0.1	8 8 8	520	26:27:56
18	2*2*2	0.1	8 8 8	600	20:19:14