

# Windows 版 AkaiKKR インストールマニュアル

2022 年 04 月 15 日

## 1. AkaiKKR のインストール

- ① Winmostar 本体と CygwinWM をインストールする。CygwinWM は C:\¥cygwin\_wm にインストールしたと仮定する。
- ② AkaiKKR の公式 HP <http://kkr.issp.u-tokyo.ac.jp/jp/> をブラウザで開き、「新規アカウント登録ページ」をクリックする。

**AkaiKKR** machikaneyama  
Ab-initio electronic-structure calculation code.

JAPANESE ENGLISH

**AkaiKKRについて**

ダウンロード  
マニュアル  
BBS (新)  
BBS (旧) \*Read Only  
登録

**AkaiKKRについて**

AkaiKKR(Machikaneyama)は密度汎関数法の局所密度近似(LDA)あるいは一般化勾配近似(GGA)に基づく第一原理電子状態計算のためのプログラムパッケージです。金属や半導体、化合物などの電子状態を簡単に計算することができます。

AkaiKKRで用いているKKRグリーン関数法は高速、高精度、コンパクト性などの特徴を持つ全電子計算手法です。安定に電子状態を計算することが可能で、平面波カットオフなどのどこまでパラメータを大きくしたらいいの?といった問題もありません。さらに、AkaiKKRではコヒーレントポテンシャル近似(CPA)を組み込んでいます。そのため、通常の規則結晶だけでなく、不純物系や不規則置換合金、混晶といった不規則系を取り扱うことができます。この手法では系のグリーン関数を直接計算するので、線形応答理論や多体問題などへの応用にも向いています。

このパッケージは1970年代から継続的に開発してきたもので、現在も様々な開発者によって開発が進められています。それぞれのプログラムはFORTRAN77で書かれています。ライブラリを追加したりする必要はなく、AkaiKKR単体で使用することができます。小さなノートパソコンから大きなスーパーコンピュータまで様々な環境で同じように動きます。FORTRANコンパイラが入っているものならば、UNIX、Linux、Mac、Windowsといったあらゆるプラットフォーム上で使用できます。

このたび、AkaiKKRのページをセキュリティ対策の一環として、システムを変更いたしましたので、既存のIDとパスワードではログイン出来ません。お手数かけて申し訳ございませんが、登録ページを登録をお願いいたします。

新規アカウント 登録ページ

- ③ 登録フォームに必要な情報を記入して「規約に同意して、アカウントを作成」をクリックする。

BBS (新)  
BBS (旧) \*Read Only  
登録

**登録フォーム \*必須項目**

Email (ID)\*  
お名前\*  
所属\*  
生年月日\* Month Day Year  
URL  
コメント

AkaiKKRからのお知らせメールを受け取る

**計算コード利用許諾契約**

計算コード「AkaiKKR (Machikaneyama)」の権利者 (以下、「A」という。)と申込者 (以下、「B」という。)は、計算コード「AkaiKKR (Machikaneyama)」(以下「本コード」という。)のBへの利用許諾に関して、以下の合意をします。

**第1条 (総則)**

1. 本契約は、Aがその研究成果である本コードの利用をBに提供し、Bがそれを研究もしくは教育に利用することを目的とします。

2. 本契約は、Bに対して、本契約条件に従う場合に限り本コードの利用を許諾するものであり、Aは、著作権をはじめとする本コードに関するすべての権利を留保します。

**第2条 (給付内容)**

Aは、Bに本コードの入手情報を与え、本契約条項にしたがってBが本コードを利用することを許諾します。

規約に同意して、アカウントを作成

- ④ ③で登録したメールアドレスに以下のようなメールが届くので Your Password を確認する。

Dear ●●●,

Thank you for the subscription. You can download AkaiKKR  
from <http://kkrissp.u-tokyo.ac.jp>

You can also use the BBS for any questions, comments  
and information. Your feedback is highly appreciated.

Your registration is

-----

DATE : ●●●●●●

Name : ●●●●

e-Mail : ●●●●●●

Date of Birth : ●●●●●●

Information : ●●●●

-----

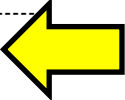
Your Password : ●●●●●●

-----

URL :

Organization : ●●●●●●

Comment:



- ⑤ AkaiKKR のダウンロードサイト <http://kkrissp.u-tokyo.ac.jp/ip/download/> にブラウザで移動し、**ID** に③で登録したメールアドレス、**Password** に④で確認したパスワードを入力し**ログイン**をクリックする。

#### ダウンロード

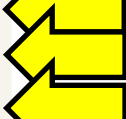
このたび、AkaiKKRのページをセキュリティ対策の一環として、システムを変更いたしましたので、既存のIDとパスワードではログイン出来ません。お手数かけて申し訳ございませんが、登録ページから改めて再登録をお願いいたします。

新規アカウント 登録ページ

AkaiKKRのダウンロードにはログインが必要です。  
アカウントをお持ちでない方は、登録ページより新規アカウントを作成してください。

ID (Email)

Password



- ⑥ 移動先のページで AkaiKKR のソースコードである cpa2002v010.tgz をダウンロードする。

### ダウンロード

#### Latest Versions

[cpa2002v010.tgz](#)  
January 14, 2022 [ 01:46:16 ]



NVIDIA GPU Supported  
[cpa2002v009c.p131212.tgz](#)  
March 14, 2014 [ 03:21:13 ]

#### Older Versions

[cpa2002v010.tgz](#) January 14, 2022

[cpa2002v010.tgz.24Nov2021](#) November 24, 2021

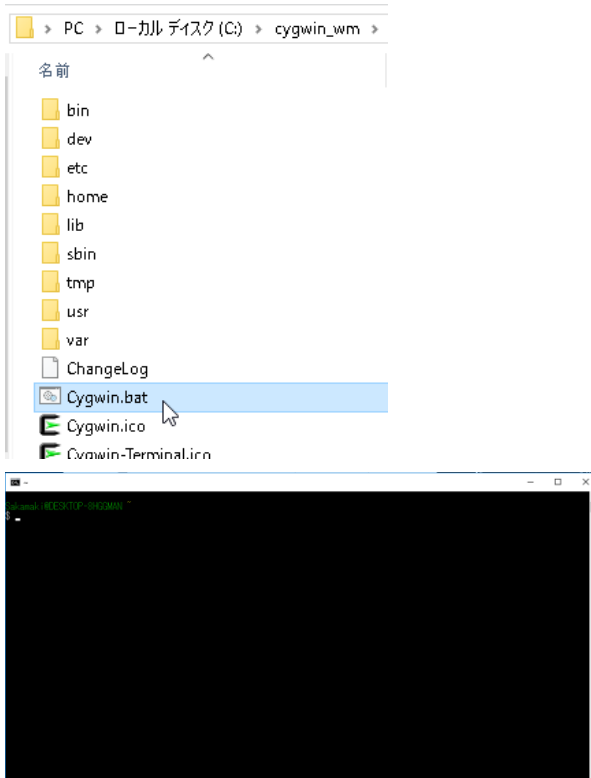
- ⑦ ⑥でダウンロードしたファイルを CygwinWM の下の tmp フォルダの下にコピーする。今回の例では C:\cygwin\_wm\tmp\cpa2002v010.tgz としてコピーする。

ローカルディスク (C:) > cygwin\_wm > tmp

名前

cpa2002v010.tgz

- ⑧ インストールした CygwinWM の下の Cygwin.bat (今回の例では C:\cygwin\_wm\Cygwin.bat) をダブルクリックし、Cygwin のターミナルを起動する。



- ⑨ ターミナルで以下のコマンドを実行し AkaiKKR をビルドする。

```
$ cd /tmp
```

```
$ tar -zxvf cpa2002v010.tgz
```

```
$ cd cpa2002v010
```

```
$ vi makefile
```

(「fort=ifort」の行をコメントアウトし「#fort=gfortran」の行のコメントを外し上書き保存する)

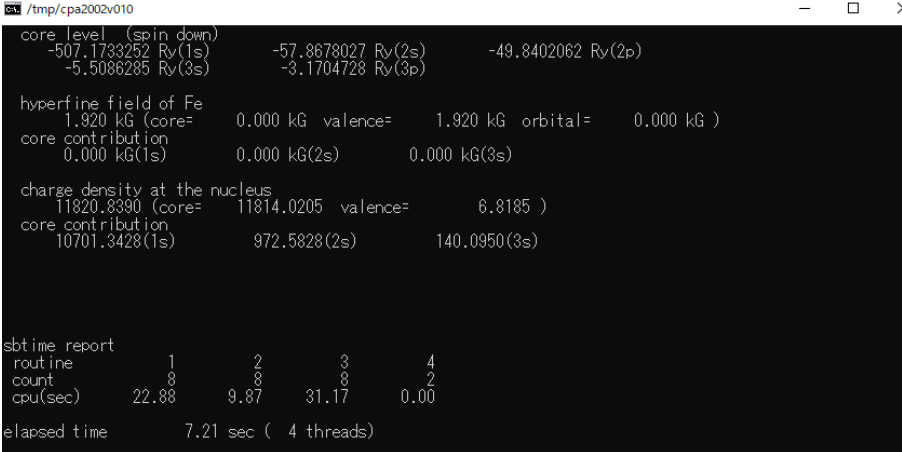
```
$ make
```

(1~2分程度で処理が終わる)

```
$ ./specx < in/fe | tee out/fe
```

```
$ cat out/fe
```

(以下のように正常に計算が完了したことを確認する)



```
core level (spin down)
-507.1733252 Ry(1s)    -57.8678027 Ry(2s)    -49.8402062 Ry(2p)
-5.5086285 Ry(3s)    -3.1704728 Ry(3p)

hyperfine field of Fe
 1.920 kG (core= 0.000 kG valence= 1.920 kG orbital= 0.000 kG )
core contribution
 0.000 kG(1s)    0.000 kG(2s)    0.000 kG(3s)

charge density at the nucleus
11820.8390 (core= 11814.0205 valence= 6.8185 )
core contribution
10701.3428(1s)    972.5828(2s)    140.0950(3s)

sbtime report
routine      1      2      3      4
count        8      8      8      2
cpu(sec)    22.88   9.87  31.17   0.00

elapsed time      7.21 sec ( 4 threads)
```

```
$ mkdir -p /usr/local/cpa2002v010
```

```
$ cp specx.exe /usr/local/cpa2002v010/
```

```
$ cd util
```

```
$ gfortran fmg.f -o fmg
```

```
$ cp fmg.exe /usr/local/cpa2002v010/
```

```
$ echo 'export PATH=$PATH:/usr/local/cpa2002v010' >> ¥
/etc/profile.d/winmostar.sh
```

```
$ source /etc/profile.d/winmostar.sh
```

```
$ which specx
```

(/usr/local/cpa2002v010/specx と表示されるのを確認する)

```
$ which fmg
```

(/usr/local/cpa2002v010/fmg と表示されるのを確認する)

- ⑩ ターミナルを閉じる。

以上