

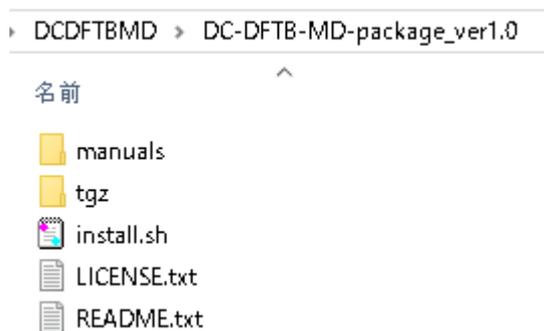
Linux サーバー版 DCDFTBMD インストールマニュアル

2020/11/17

DC-DFTB-MD-package_ver1.0 のインストール手順

(2020 年 10 月以前の DC-DFTB-MD-package ver1.0 をお使いの方向け)

1. 以下のような内容の DC-DFTB-MD-package_ver1.0 ディレクトリを、WinSCP 等でインストール先のサーバに転送する。



2. ターミナルでリモートサーバにログインし、コピーした DC-DFTB-MD-package_ver1.0 ディレクトリに移動する。
3. 以下のコマンドを実行し、表示された内容に回答する。

```
$ bash install.sh
```

注意点：

- 2019 年 5 月 17 日時点で、DCDFTBMD ver1.0 は MPICH3.2, OpenMPI3.1.2 でコンパイルしたものを配布しています。IntelMPI は使用して実行することはできません。

install.sh が完了したら以下のように表示される。

DC-DFTB-MD has been installed successfully !!

=====

1. To run DC-DFTB-MD, make sure your PATH and LD_LIBRARY_PATH are set appropriately by loading configure script file (e.g. source /home/xxxx/bin/dc-dftb-md.1.0/dcdftbmd-config.bash).

2. To run sample programs (/home/xxxx/bin/dc-dftb-md.1.0/samples), copy /home/xxxx/bin/dc-dftb-md.1.0/samples/ to your own directory and run job scripts.

3. For further details, see manuals in /home/xxxx/bin/dc-dftb-md.1.0/manuals/

Exit DC-DFTB-MD install wizard ...

4. install.sh の最後に表示されていた通りに、.bashrc を編集する。

```
$ vi ~/.bashrc
```

上記の例の場合は以下のように追記する。

```
source ${HOME}/bin/dc-dftb-md.1.0/dcdftbmd-config.bash
```

5. 以下のコマンドを実行し、.bashrc の変更内容を反映させる。

```
$ source ~/.bashrc
```

6. 以下のコマンドを実行し、インストールした DCDFBMD のパスが表示されるか確認する。

```
$ which dftb_serial.00.x
```

```
$ which dftb_mpiomp_mpich.00.x
```

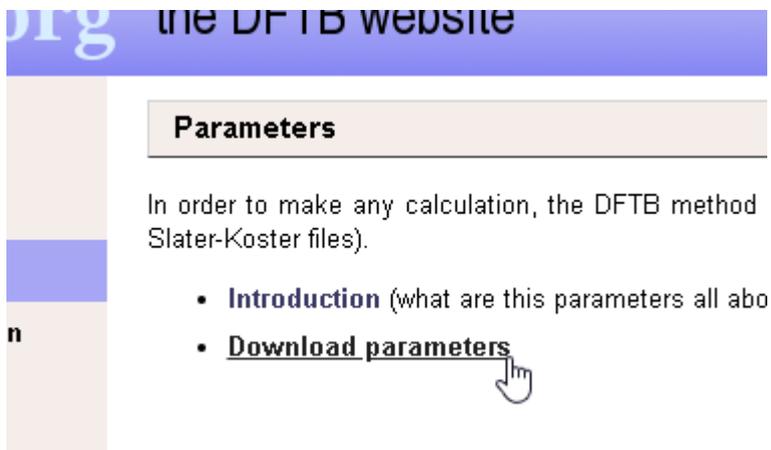
インストールしたバイナリのテスト

(DC-DFTB-MD-package_ver1.0 をお使いの方向け)

1. <http://www.dftb.org/> にアクセスする。
2. Parameters をクリックする。



3. Download parameters をクリックする。



4. mio をクリックします。

General purpose parameter sets

These sets were created to have a good performance over a wide range of applications. They have been thoroughly tested for a broad range of systems very different from those included in the

Name	Requires	Elements	
3job		Br-C-Ca-Cl-F-H-I-K-Mg-N-Na-O-P-S-Zn	DFT
matsci		Al-O-H Al-Si-O-H Cu-Si-Al-Na-O-H Ti-P-O-N-C-H O-N-C-B-H Al-O-C-H Si-P-N-O-C-H	Collprob the avail
 mio		H - C - N - O - S - P	SCC
ob2		H-C-N-O	Long

5. ページ下部にある Download から Slater-Koster files の mio-1-1.tar.xz をダウンロードする。

Download

Slater-Koster files	<u>mio-1-1.tar.xz</u>
Spin coupling constants	<u>mio-1-1.spinw.txt</u>
STO coefficients	<u>wfc.mio-1-1.hsd</u>

6. ダウンロードした mio-1-1.tar.xz を、DCDFTBMD をインストールしたサーバにコピーし、以下のコマンドで解凍する。

```
$ tar Jxf mio-1-1.tar.xz
```

7. 解凍してできた mio-1-1 ディレクトリの中に skf ファイルが生成されていることを確認する。

```
$ ls mio-1-1
```

```
C-C.skf C-N.skf C-P.skf FITDES H-H.skf H-O.skf H-S.skf N-C.skf N-N.skf
N-P.skf O-C.skf O-N.skf O-P.skf P-C.skf P-N.skf P-P.skf README S-H.skf
S-O.skf S-S.skf
C-H.skf C-O.skf C-S.skf H-C.skf H-N.skf H-P.skf LICENSE N-H.skf N-O.skf
N-S.skf O-H.skf O-O.skf O-S.skf P-H.skf P-O.skf P-S.skf S-C.skf S-N.skf S-
P.skf
```

8. ここでは仮に mio-1-1 ディレクトリをホームディレクトリ以下に移動する。

```
$ mv mio-1-1 ~/
```

9. DCDFTBMD のインストールディレクトリ (今回の例では/home/xxxx/bin/dc-dftb-md.1.0) に移動する。

```
$ cd /home/xxxx/bin/dc-dftb-md.1.0
```

10. samples フォルダをコピーし、コピーしたほうに移動する。

```
$ cp -r samples samples_copy
```

```
$ cd samples_copy
```

11. sample01 に移動する。

```
$ cd sample01
```

12. mio-1-1 の skf ファイルを 4 つ sample01 以下にコピーする。

```
$ cp ~/mio-1-1/C-C.skf .
```

```
$ cp ~/mio-1-1/C-H.skf .
```

```
$ cp ~/mio-1-1/H-C.skf .
```

```
$ cp ~/mio-1-1/H-H.skf .
```

13. 比較用の出力ファイルをリネームする。

```
$ mv dftb.dat dftb.dat.ori
```

```
$ mv dftb.out dftb.dat.ori
```

14. DCDFTBMD を実行する。シリアル版をインストールした場合は以下のように実行する。

```
$ dftb_serial.00.x
```

MPI+OpenMP 版を使うときは、以下のように OMP_NUM_THREADS 環境変数を 1 にしてから使う。

```
$ export OMP_NUM_THREADS=1
```

```
$ mpirun -n 2 dftb_mpiomp_mpich.00.x
```

15. 実行後、dftb.out と dftb.dat が生成していることを確認する。

DC-DFTB-MD-package_ver1.0 のインストール手順

(2020年10月以前の dc-dftb-md.1.0_20190719 をお使いの方向け)

※ CentOS 7 と Ubuntu 18 において動作確認済みです。

※ CentOS 6 などの環境では一部ライブラリの不足によりバイナリの再作成が必要です。

1. 以下のファイルを WinSCP 等でインストール先のサーバに転送する。ここでは仮に~/bin 以下にコピーしたとする。

名前	更新日時	種類	サイズ
 dc-dftb-md.1.0_20190719.tgz	2019/07/19 13:50	TGZ ファイル	51,396 KB
 dcdftbmd.lic	2019/07/19 13:50	LIC ファイル	1 KB

2. ターミナルでリモートサーバにログインし、1. のファイルをコピーしたディレクトリに移動する。
3. 以下のコマンドを実行し、dc-dftb-md.1.0 というディレクトリに dcdftbmd-config.bash が生成されるのを確認する。

```
$ tar -zxvf dc-dftb-md.1.0_20190719.tgz
```

```
$ ls dc-dftb-md.1.0
```

4. 以下のコマンドを実行し、ライセンスファイルを dc-dftb-md.1.0 の下にコピーする。

```
$ cp dcdftbmd.lic dc-dftb-md.1.0/
```

ライセンスファイルを他の場所に配置したり、ライセンスファイルの名前を変えたい場合は、DCDFTBMD_LICENSE 環境変数にライセンスファイルのパスを指定する。

5. ~/.bashrc に、3. で確認した dcdftbmd-config.bash を source するコマンドを追加する。

```
$ vi ~/.bashrc
```

上記の例の場合は以下のように追記する。

```
source ${HOME}/bin/dc-dftb-md.1.0/dcdftbmd-config.bash
```

6. 以下のコマンドを実行し、bashrc の変更内容を反映させる。

```
$ source ~/.bashrc
```

7. 以下のコマンドを実行し、インストールした DCDFTBMD と MPI のパスが表示されるか確認する。

```
$ which dftb_openmp.00.x
```

```
$ which dftb_mpiomp.00.x
```

```
$ which mpirun
```

8. 続けて、インストールしたバイナリの動作確認を行うために以下のコマンドを実行する。

```
$ cd dc-dftb-md.1.0/samples/sample01
```

```
$ mv dftb.out dftb.out.ori
```

```
$ mv dftb.dat dftb.dat.ori
```

OpenMP 版を使うときは

```
$ dftb_openmp.00.x
```

MPI+OpenMP 版を使うときは

```
$ mpirun -n 2 dftb_mpiomp.00.x
```

とする。

9. 実行後、dftb.out と dftb.dat が生成していることを確認する。
10. dftb.out の末尾に「Execution of DCDFTBMD terminated normally …」と表示され、正常に計算が終了したことを確認する。

DCDFTBMD-package_ver1.0 のインストール手順

(2020 年 11 月以降の dc-dftb-md.1.0.*をお使いの方向け)

※ CentOS 7 と Ubuntu 18 において動作確認済みです。

※ CentOS 6 などの環境では一部ライブラリの不足によりバイナリの再作成が必要です。

1. ユーザポータルから入手した **tgz** ファイル (**dc-dftb-md.1.0_*.tgz**) を WinSCP 等でインストール先のサーバに転送する。ここでは仮に `~/bin` 以下にコピーしたとする。

2. ターミナルでリモートサーバにログインし、1. のファイルをコピーしたディレクトリに移動する。

3. 以下のコマンドを実行し、`dc-dftb-md.1.0` というディレクトリに `dcdfbtbmd-config.bash` が生成されるのを確認する。

```
$ tar -zxvf dc-dftb-md.1.0_*.tgz
```

```
$ ls dc-dftb-md.1.0
```

4. `~/.bashrc` に、3. で確認した `dcdfbtbmd-config.bash` を `source` するコマンドを追加する。

```
$ vi ~/.bashrc
```

上記の例の場合は以下のように追記する。

```
source ${HOME}/bin/dc-dftb-md.1.0/dcdfbtbmd-config.bash
```

5. 以下のコマンドを実行し、`bashrc` の変更内容を反映させる。

```
$ source ~/.bashrc
```

6. 以下のコマンドを実行し、インストールした DCDFTBMD と MPI のパスが表示されるか確認する。

```
$ which dftb_openmp.00.x
```

```
$ which dftb_mpiomp.00.x
```

```
$ which mpirun
```

7. 続けて、インストールしたバイナリの動作確認を行うために以下のコマンドを実行する。

```
$ cd dc-dftb-md.1.0/samples/sample01
```

```
$ mv dftb.out dftb.out.ori
```

```
$ mv dftb.dat dftb.dat.ori
```

MPI 非対応版を使うときは

```
$ dftb_openmp.00.x
```

MPI 対応版を使うときは

```
$ mpirun -n 2 dftb_mpiomp.00.x
```

とする。

8. 実行後、dftb.out と dftb.dat が生成していることを確認する。
dftb.out の末尾に「Execution of DCDFTBMD terminated normally …」と表示され、正常に計算が終了したことを確認する。

9. 以下の資料を参考に Winmostar から DCDFTBMD を使用する。

- Winmostar から DCDFTBMD を使う際のチュートリアル

<https://winmostar.com/jp/tutorials/index.html#DCDFTBMD>

- Winmostar から DCDFTBMD をインストールしたサーバに接続する方法

https://winmostar.com/jp/manual_jp/html/winmos/winmos_remote.html

以上