

Linux サーバ版 NWChem インストールマニュアル

2023 年 5 月 4 日

本マニュアルの目的

本マニュアルでは、単一ユーザが独占的に Linux サーバ (CentOS 7.8) を使用して NWChem ジョブを並列実行するための環境を構築する方法と、Winmostar™のリモートジョブ投入機能から Linux サーバへジョブを投入する方法を示しています。計算環境は全てユーザのホームディレクトリ以下で行うことを想定しています。複数ユーザが使用する共用サーバの環境を構築する方法、複数ノードを利用する環境を構築する方法などは本マニュアルに含まれませんので、別途お問い合わせください。

1. NWChem のインストール

NWChem availability in Linux distributions <https://nwchemgit.github.io/Download.html#nwchem-availability-in-linux-distributions> の” Example of NWChem installation” を参考に、使用中の Linux ディストリビューションに合わせて操作する。足りないパッケージについては、適宜 yum、apt-get 等でインストールする。以下に CentOS 7.8 での手順を示す。

- ① 以下のコマンドを実行する。

```
$ sudo yum install https://dl.fedoraproject.org/pub/epel/epel-release-latest-7.noarch.rpm
$ sudo yum update
$ sudo yum install nwchem nwchem-openmpi Lmodcd
```

実行時に scalapack がないというエラーが発生した場合は \$ sudo yum install scalapack-openmpi も実行する。

- ② 現在のシェルで NWChem を利用するために、以下のコマンドを実行して NWChem を有効にする。なお、 ~/.bashrc にこのコマンドを追記すると Linux サーバにログインし直すたびにこのコマンドの実行が不要となるが、同サーバ上における他のソフトウェアとの設定の調整が必要となる。本書では ~/.bashrc への追記は必須ではない。

```
$ module load mpi/openmpi-x86_64
```

- ③ 以下のコマンドを実行してインストールした nwchem_openmpi のパスが表示されることを確認する。

```
$ which nwchem_openmpi
```

- ④ NWChem の動作確認のため、以下のコマンドを実行します。(詳細な動作確認は 3 で Winmostar 経由で行う)

```
$ mpirun -n 2 nwchem_openmpi
```

以下のようなメッセージが出現するか確認します。

```
Unable to open nwchem.nw - appending .nw
nwchem: failed to open the input file

current input line :
0:
...
(以降省略)
```

- ※ Debian/Ubuntu での補足：実行時に mpirun コマンドがないと表示された場合は \$ sudo apt-get install openmpi-bin を実行する。

2. Linux サーバ上での最終確認

- ① Winmostar から接続するときの状況を再現するため、Linux サーバにログインしなおす。
- ② NWChem の動作を確認するため、NWChem の起動に必要な環境を設定するコマンドを入力しメモに控えておく。
本書の手順に従った場合は、以下のコマンドを入力する。

```
$ module load mpi/openmpi-x86_64
```

- ③ 以下のコマンドを実行してインストールした NWChem のパスが表示されることを確認する。確認できない場合は②の設定を見直す。

```
$ which nwchem_openmpi
```

- ④ 以下のコマンドを実行して NWChem のメッセージが表示されることを確認する。確認できない場合は②の設定を見直す。

```
$ mpirun -n 2 nwchem_openmpi
```

表示される例 :

```
Unable to open nwchem.nw - appending .nw
nwchem: failed to open the input file

current input line :
  0:
...
(以降省略)
```

3. Winmostar からの設定および動作確認

ユーザマニュアルの [7.2. リモートジョブの設定手順](#)に従って設定し動作確認を行う。

テンプレートスクリプトを編集する際には、「# Insert commands here」 から「# Do not modify the followings」の間に 2-②でメモに控えた内容を追記する。本書の手順に従った場合は以下のようなになる。

```
echo "*****"
echo "***      Set user-defined variables      ***"
echo "*****"
set -v
# Insert commands here
MPI_COMMAND="mpirun -n %WM_NUM_PROC% "
BIN_NW=nwchem_openmpi

module load mpi/openmpi-x86_64

# Do not modify the followings
```

以上