

Windows 版 NWChem インストールマニュアル

2023 年 5 月 4 日

1. NWChem のインストール

- Winmostar V11.5.0 以降を利用しかつ 64bit 環境をご利用の方は、[こちら](#)の手順で CygwinWM 2023/04/23 バージョン以降をインストールする。すでにインストールされている場合はそれを利用する。

※ 2023/04/23 バージョン以降の CygwinWM には推奨バージョンの 64bit 版 NWChem がプリインストールされている。

※ MPI 並列で NWChem を実行する場合は「2.MPICH のインストール」が必要となる。

- 上記に該当しない場合、または推奨バージョン以外の NWChem を利用したい方は、下記リンクからコンパイル済の NWChem の自己解凍書庫をダウンロードし実行する。

[nwchem-6.6_32bit_20170124.exe](#) (28MB)

実行してインストールした後、Winmostar のツール | **環境設定**メニューをクリックし**プログラムパス | NWChem** でインストールされた nwchem.exe を選択する。

※ MPI 並列で NWChem を実行する場合は「2.MPICH のインストール」が必要となる。

※ ブラウザの種類によってはダウンロードが上手くいかない場合がある。

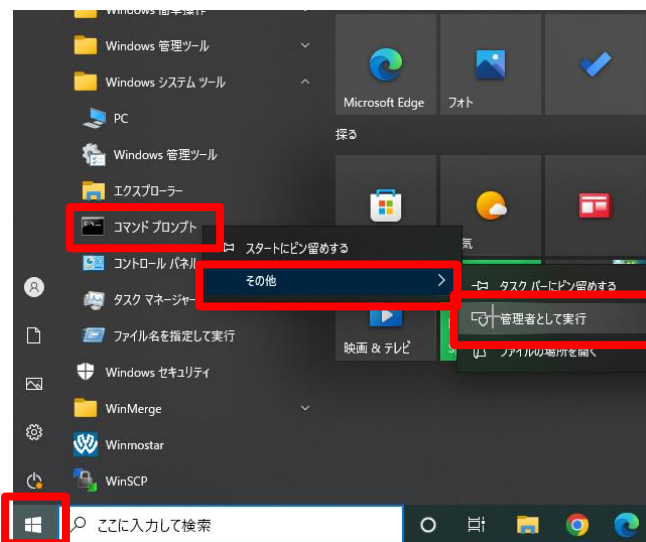
※ 上記コンパイル済みパッケージの作成手順は[こちら](#)。(非推奨、上級者向け)

2. MPICH の入手とインストール (NWChem の並列実行を行う場合のみ必要)

- [\[mpich2-1.4.1pl-win-x86-64.msi\]](#) (32bit 環境の場合は [\[mpich2-1.4.1pl-win-ia32.msi\]](#)) をダウンロードする。ダウンロードしたファイルの拡張子を変更された場合は「.msi」に戻す。
- 保存した msi ファイルをダブルクリックし、インストールする。設定は基本的にデフォルトで問題ない。

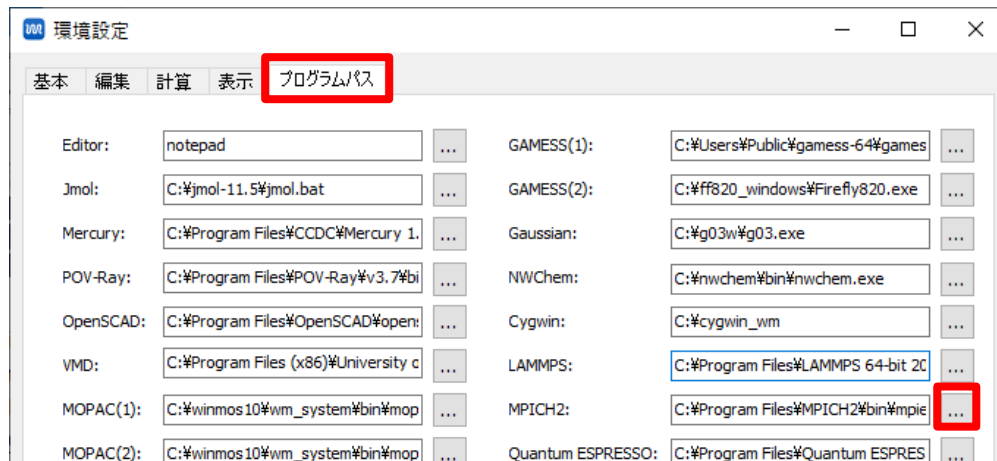
なお、.NET Framework 3.5 がインストールされていないと先に進めないため、その場合は、<https://www.microsoft.com/ja-jp/download/details.aspx?id=21> から .NET Framework 3.5 のインストーラ (dotNetFx35setup.exe) をダウンロードしてインストールする。dotNetFx35setup.exe を起動して反応がない場合でも処理が完了しているので先に進む。

- コマンドプロンプト (Windows PowerShell ではない) を **管理者権限** で立ち上げる。(Windows 10 Pro 21H1 ではスタートメニュー | Windows システムツール | コマンドプロンプトで右クリック→その他 | 管理者として実行)

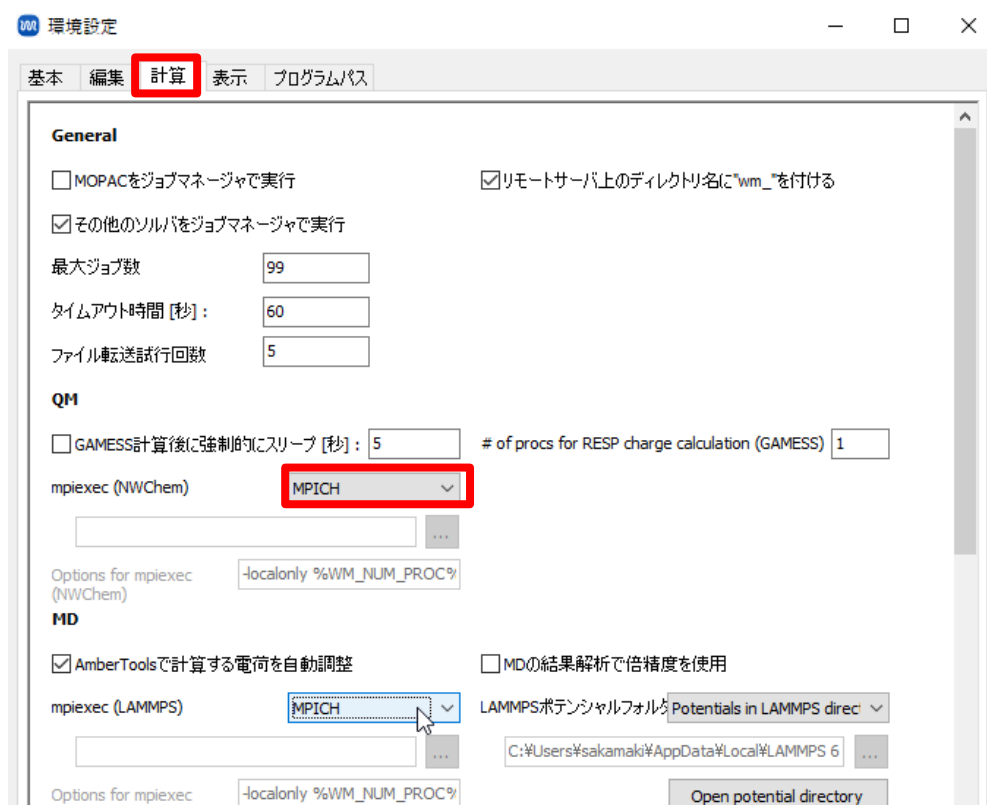


- 以下のコマンドを実行し、MPICH をインストールしたフォルダに移動する。
`C:¥> cd "C:¥Program Files¥MPICH2¥bin"`
- 以下のコマンドを実行し、「MPICH2 Process Manager, Argonne National Lab installed.」と表示されることを確認する。
`bin> smpd.exe -install`

- Winmostar を起動し、 ツール | 環境設定 をクリックする。プログラムパスを開き、MPICH2 の[...]ボタンをクリックする。MPICH のインストールフォルダの下にある bin フォルダの下の mpiexec.exe を開く。



- (Winmostar V11.5.0 以降のみ) 計算タブを開き mpiexec (NWChem) を「MPICH」に変更する (項目が出現しない場合は下までスクロールする)。



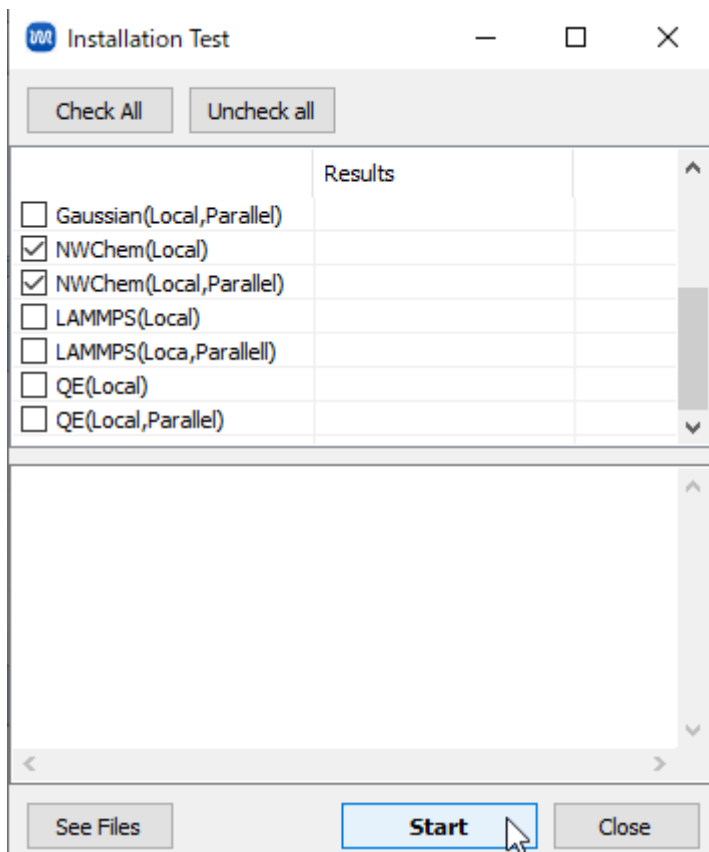
- 最後に環境設定ウィンドウ右下の OK ボタンをクリックする。

3. 簡易的な動作確認

- Winmostar のメインメニューのヘルプ | インストールテストをクリックする。
- 「NWChem(Local)」にチェックを入れる。MPICH もインストールした場合は「NWChem(Local,Parallel)」にもチェックを入れる。そして **Start** をクリックする。

Windows Defender などのセキュリティ警告が出た場合は**アクセスを許可**や**無視**をクリックする。

- 20～30 秒程度待ち「All tests passed.」と表示されることを確認する。



以上