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、<u>こちら</u>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。

<u>nwchem-6.6_32bit_20170124.exe</u> (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。

- 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)
 - [mpich2-1.4.1p1-win-x86-64.msi] (32bit 環境の場合は [mpich2-1.4.1p1-winia32.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が変更された場合は「.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。プログラムパスタブを開き、
 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。

🛛 環境設定								—		×
基本 編集	計算表	示 プログラムパ	12							
Editor:	notenad				GAMESS(1):	C:¥Users¥P	ublic¥a	amess-64	4¥names	
Jmol:	C:¥imol-1	1.5¥imol.bat			GAMESS(2):	C:¥ff820 w	indows	¥Fireflv8	20.exe	
Mercurv:	C:¥Progra	am Files¥CCDC¥M	lercury 1.		Gaussian:	C:¥a03w¥a	03.exe			
POV-Ray:	C:¥Progra	am Files¥POV-Ray	/¥v3.7¥bi		NWChem:	C:¥nwchem	¥bin¥nı	wchem.e	xe	
OpenSCAD:	C:¥Progra	am Files¥OpenSC/	AD¥open:		Cygwin:	C:¥cygwin_	wm			
VMD:	C:¥Progra	am Files (x86)¥Un	iversity c		LAMMPS:	C:¥Program	Files¥L	AMMPS (54-bit 20	
MOPAC(1):	C:¥winmo	os10¥wm_system¥	¥bin¥mop		MPICH2:	C:¥Program	Files¥I	MPICH2¥	bin¥mpie	
MOPAC(2):	C:¥winme	os10¥wm_system¥	¥bin¥mop		Quantum ESPRESSO:	C:¥Program	Files¥(Quantum	ESPRES	
Winmostaı	r V11.5.	.0 以降のみ)) 計算タ)	ブを	開き mpiexec(NWChen	n) を	[MP]	[CH]	に変更
(項目が出	現しな	い場合は下る	までスクι	ц <i>—</i> ,	ルする)。					
瑨境設定								_		×
	計符 主	÷∓ ⊰⊓∦∋/ (2							
	11 4 30									^
General										
■ MOPACをジ	泊ブマネー ジ	^j ゃで実行		\checkmark	ヨリモートサーバ上のディ	レクトリ名(C [*] Wr	n_"を付	ける		
☑その他のソ	ルバをジョブ	マネージャで実行	_							
最大ジョブ数		99								
タイムアウト時間	間[秒]:	60								
ファイル転送討	衍回数	5								
QM				_						
GAMESS	算後に強制	心にスリープ [秒]	: 5	#	of procs for RESP charg	ge calculation	(GAME	SS) 1		
mpiexec (NWC	Jhem)	MPICH	`	~						
Options for mp (NWChem)	piexec	-localonly %WM	1_NUM_PROC	%						
MD				_						
AmberTool	sで計算する	>電荷を自動調整			」MDの結果解析で倍精	度を使用				
mpiexec (LAMI	MPS)	MPICH	\}`	< LA	AMMPSボナンジャルフォル	O Potentials in		PS direct	~	
					C:¥Users¥sakamaki¥/	AppData¥Loca	I¥LAMN	MPS 6	••	
Options for mp	Diexec	-localonly %WM	1_NUM_PROC	7		Open pot	tential (directory		

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

Installation Test		_		×
Check All Uncheck all				
R	esults			^
Gaussian(Local,Parallel)				
NWChem(Local)				
NWChem(Local,Parallel)				- 11
LAMMPS(Local)				- 11
LAMMPS(Loca,Parallell)				- 11
QE(Local)				- 11
QE(Local,Parallel)				~
				~
				\sim
<				>
See Files	Start	6	Close	÷

以上