

# Linux サーバ版 OpenMX インストールマニュアル

2022 年 4 月 15 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 6.6) を使用して OpenMX のジョブを並列実行するための環境構築方法と 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配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。

なお、本マニュアルでは Linux サーバ上でジョブスケジューラ TORQUE が使用可能であると仮定しています<sup>1</sup>。また以下の命名としています。

サーバホスト名 : remote\_server

ユーザ名 : winmostar\_user

## I. インストール準備

- ① 以下のサイトにアクセスし、openmx3.8.tar.gz と patch3.8.5.tar.gz をダウンロードする。

<http://www.openmx-square.org/download.html>

### Download of OpenMX

#### Available packages in terms of GNU-GPL Version 3 (GPLv3)

- [openmx3.9 \(release date: 03/Dec./2019, 158 MB\)](#) + [patch \(02/Jan./2019\)](#) [README.txt](#)
- [openmx3.8 \(release date: 03/April/2016, 136 MB\)](#) + [patch \(12/June/2018\)](#) [README.txt](#)
- [openmx3.7 \(release date: 23/May/2013, 112 MB\)](#) + [patch \(21/Feb./2015\)](#) [README.txt](#)

- ② 以下のサイトにアクセスし、fermisurfer\_1.7.1.zip をダウンロードする。

<https://ja.osdn.net/projects/fermisurfer/releases/>



<sup>1</sup> <http://www.adaptivecomputing.com/products/open-source/torque/>を参照。管理者権限で yum などを用いて導入する。あるいは、X-Ability のサイト内 [http://winmostar.com/jp/gmx4wm\\_jp\\_linux.html](http://winmostar.com/jp/gmx4wm_jp_linux.html) (5. Torque) 参照。

- ③ openmx3.8.tar.gz, patch3.8.5.tar.gz と fermisurfer\_1.7.1.zip を FTP など で Linux サーバ に 転送する。ここではホームディレクトリ直下の

```
~/openmx3.8.tar.gz
```

```
~/patch3.8.5.tar.gz
```

```
~/fermisurfer_1.7.1.zip
```

に置いたと仮定する。

- ④ Linux サーバ に ログイン し、次のコマンドを実行することで必要なパッケージをインストールする。

- OpenMX のビルドに必要な

```
$ yum install fftw3-devel lapack-devel blas-devel openmpi-devel gcc-g++ gcc-gfortran
```

- Fermisurfer のビルドに必要な

```
$ yum install freeglut-devel.x86_64
```

- Winmostar から OpenMX を実行する際に必要

```
$ yum install dos2unix
```

- ⑤ ~/.bashrc に次を追加する。

```
export PATH=/usr/lib64/openmpi/bin/:$PATH
```

```
export LIBRARY_PATH=/usr/lib64/openmpi/lib/:$LIBRARY_PATH
```

```
export PATH=${HOME}/openmx3.8/work/:$PATH
```

```
export OPENMX_DATA_PATH=~/.openmx3.8/DFT_DATA13
```

- ⑥ ~/.bashrc の設定を有効化する。

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

## II. OpenMX3.8 のビルド

- ① 圧縮ファイルを解凍する。

```
$ cd
$ tar xzvf openmx3.8.tar.gz
```

- ② パッチをあてる。

```
$ cp patch3.8.5.tar.gz openmx3.8/source
$ cd openmx3.8/source
$ tar xzvf patch3.8.5.tar.gz
```

- ③ makefile を編集する。

```
$ vi makefile
```

139-141 行を以下のようにコメントアウトする。

```
#CC = mpicc -O3 -xHOST -ip -no-prec-div -openmp -I/opt/intel/mkl/include/fftw
#FC = mpif90 -O3 -xHOST -ip -no-prec-div -openmp
#LIB= -L/opt/intel/mkl/lib -mkl=parallel -lmkl_intel_lp64
-lmkl_intel_thread -lmkl_core -lpthread -lifcore -lmpi -lmpi_f90
-lmpi_f77
```

コメントアウトした直下に以下を書き加える。

```
CC = mpicc -fopenmp -O3 -I/usr/local/include
FC = mpif90 -fopenmp -O3 -I/usr/local/include
LIB = -L/usr/local/lib -lfftw3 -llapack -lblas -lmpi -lgfortran
-lmpi_mpihf -lmpi_usempi
```

- ④ コンパイルとインストールを行う。

```
$ make all
$ make install
```

- ⑤ 動作確認を行う。

```
$ cd ../work
```

```
$ openmx Cdia.dat
```

処理が終わって以下のメッセージが表示されたら正常に動作している。

```
The number of threads in each node for OpenMP parallelization is 1.
```

```
*****
*****
Welcome to OpenMX Ver. 3.8.5
Copyright (C), 2002-2014, T. Ozaki
OpenMX comes with ABSOLUTELY NO WARRANTY.
This is free software, and you are welcome to
redistribute it under the constitution of the GNU-GPL.
*****
*****
```

(途中省略)

```
RestartFileDFT      = 0      0.000      0      0.000
Mulliken_Charge     = 0      0.001      0      0.001
FFT(2D)_Density     = 0      0.003      0      0.003
Others               = 0      1.752      0      1.752
```

```
The calculation was normally finished.
```

- ⑥ Linux サーバにログインし直し、以下のコマンドを実行してインストールした OpenMX が表示されることを確認する。

```
$ which openmx
```

### III. Fermisurfer のビルド

- ① 圧縮ファイルを解凍する。

```
$ cd
$ unzip fermisurfer_1.7.1.zip
```

- ② コンパイルとインストールを行う。

```
$ cd fermisurfer/src
$ make all
$ cp bxsf2frmsf /usr/local/bin/
```

- ③ Linux サーバにログインし直し、以下のコマンドを実行してインストールした `bxsf2frmsf` が表示されることを確認する。

```
$ which bxsf2frmsf
```

#### IV. Winmostar から OpenMX をリモートジョブ実行する方法

- ① Winmostar を起動し **ファイル | 新規ファイル** をクリックする。
- ② **ファイル | インポート | Samples ファイル | dia.mol2** をクリックする。
- ③ **破棄して読み込み** をクリックする。
- ④ **固体 | OpenMX | キーワード設定** をクリックする。
- ⑤ **OpenMX Keyword Setup** ウィンドウ右下の **OK** をクリックする。
- ⑥ その後、[ユーザマニュアルのリモートジョブの実行手順](#)に従って操作を行い、**Get All Files** ボタンを押してファイルを取得するところまで実行する。

**MD | Gromacs | ログを表示** をクリックし、デフォルトで選択されたファイルを開く。OpenMX が正常に実行された場合は、開かれたテキストファイルの最後の方に「The calculation was normally finished.」と表示される。

以上