

Linux サーバ版 OpenMX インストールマニュアル

2024 年 10 月 8 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 (Rocky 9) 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¹。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

また、ここでインストールする OpenMX のバージョンは 3.9 ですが、OpenMX3.8 のインストール手順を V に詳述します。

Rocky8 と違って Rocky9 の場合 lapack をソースからビルドする必要があります。

I. インストール準備

- ① 以下のサイトにアクセスし、openmx3.9.tar.gz と patch3.9.9.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 の 1.7.1.tar.gz をダウンロードする。

<https://github.com/mitsuaki1987/fermisurfer/releases/>

¹ <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 (5. Torque) 参照。

FermiSurfer 1.7.1 is released

Bug fix

- Mac OSXでコンパイルが出来ない問題を修正しました (naotoumezawa氏、Louis Bouchard氏の厚意による)。

▼ Assets 2

Source code (zip)	Nov 27, 2016
Source code (tar.gz)	Nov 27, 2016

- ③ openmx3.9.tar.gz, patch3.9.9.tar.gz と 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

~/openmx3.9.tar.gz

~/patch3.9.9.tar.gz

~/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

```
$ sudo dnf config-manager --set-enabled crb
```

```
$ sudo dnf install epel-release
```

```
$ sudo dnf install fftw3-devel lapack-devel blas-devel openmpi-devel gcc-c++ gcc-gfortran make scalapack-openmpi-devel wget
```

- Fermisurfer の ビルド に 必要

```
$ sudo dnf install freeglut-devel
```

- Winmostar から OpenMX を 実行 する 際 に 必要

```
$ sudo dnf 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=${HOME}/openmx3.9/work/:$PATH
```

```
export OPENMX_DATA_PATH=~/.openmx3.9/DFT_DATA19
```

- ⑥ ~/.bashrc の 設定 を 有効化 する。

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

II. LAPACK のビルド

```
$ wget https://github.com/Reference-LAPACK/lapack/archive/v3.9.0.tar.gz
$ tar xvfz v3.9.0.tar.gz
$ cd lapack-3.9.0
$ cp make.inc.example make.inc
$ make blaslib
$ make lapacklib
```

III. OpenMX のビルド

- ① 圧縮ファイルを解凍する。

```
$ cd
$ tar xzvf openmx3.9.tar.gz
```

- ② パッチをあてる。

```
$ cd openmx3.9/source
$ tar xzvf ../../patch3.9.9.tar.gz
```

- ③ makefile を編集する。

```
$ vi makefile
```

8-11 行を以下のようにコメントアウトする。

```
#MKLROOT = /opt/intel/mkl
#CC = mpicc -O3 -xHOST -ip -no-prec-div -qopenmp -I/opt/intel/mkl/include/fftw
#FC = mpif90 -O3 -xHOST -ip -no-prec-div -qopenmp
#LIB= -L${MKLROOT}/lib/intel64 -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core
-lmkl_blacs_openmpi_lp64 -lmpi_usempif08 -lmpi_usempi_ignore_tkr -lmpi_mpih -liomp5 -lpthread -lm
-ldl
```

コメントアウトした直下に以下を書き加える。

```
CC = mpicc -fopenmp -O3 -z muldefs -Dkcomp
FC = mpif90 -fopenmp -O3 -fallow-argument-mismatch -Dkcomp
LIB = -lfftw3 ~/lapack-3.9.0/liblapack.a ~/lapack-3.9.0/librefblas.a -lmpi -
lgfortran -lmpi_mpih -lscalapack
```

- 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. 3.9.9
```

```
Copyright (C), 2002-2019, 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	0.002	0	0.002
Mulliken_Charge	=	0	0.002	0	0.002
FFT(2D)_Density	=	0	0.011	0	0.011
Others	=	0	3.638	0	3.638

```
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
```

IV. Fermisurfer のビルド

- ① 圧縮ファイルを解凍する。

```
$ cd
$ unzip 1.7.1.zip
```

- ② コンパイルとインストールを行う。

```
$ cd fermisurfer-1.7.1/src
$ make all
$ sudo 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
```

V. 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。

VI. (補足) OpenMX3.8 のインストール手順

- 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 openmx3.8.tar.gz, patch3.8.5.tar.gz を FTP など 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
```

に置いたと仮定する。

- ③ 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

```
$ sudo dnf config-manager --set-enabled crb
```

```
$ sudo dnf install fftw3-devel lapack-devel blas-devel openmpi-devel gcc-c++ gcc-  
gfortran make
```

- ④ ~/.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
```

- ⑤ ~/.bashrc の設定を有効化する。

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

- ⑥ 圧縮ファイルを解凍する。

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

- ⑦ パッチをあてる。

```
$ cd openmx3.8/source
```

```
$ tar xzvf ../../patch3.8.5.tar.gz
```

- ⑧ 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 -z muldefs
```

```
FC = mpif90 -fopenmp -O3 -fallow-argument-mismatch
```

```
LIB = -lfftw3 -llapack -lblas -lmpi -lgfortran -lmpi_mpfh
```

⑨ コンパイルとインストールを行う。

```
$ make all
```

```
$ make install
```

以上