

OpenMXのコンパイル方法

Truong Vinh Truong Duy
The University of Tokyo

2015/03/11

OpenMXのダウンロード

1. OpenMXのダウンロード

```
% wget http://www.openmx-square.org/openmx3.7.tar.gz  
% tar openmx3.7.tar.gz
```

2. パッチのダウンロード

```
% wget http://www.openmx-square.org/bugfixed/15Feb21/patch3.7.10.tar.gz  
% cp ./patch3.7.10.tar.gz openmx3.7/source  
% cd openmx3.7/source  
% tar zxvf patch3.7.10.tar.gz
```

3. これから、OpenMXのコンパイルへ

OpenMX Ver.3.7のコンパイル

1. openmx3.7/source/makefileのCC,FC,LIBを適切に設定する

CC: C コンパイラ

FC: Fortran コンパイラ

LIB: FFTライブラリ, LAPACKとBLASライブラリ

2. コンパイル

```
% make
```

3. インストール

```
% make install
```

4. 実行ファイル

```
openmx3.7/work/openmx
```

CC,FC,LIBの基本的な設定

FFTRoot=/path/to/fft/folder (FFTライブラリ)

LBSRoot=/path/to/lapack/and/blas/folder (LAPACKとBLASライブラリ)

openmp_flag = -openmp (インテルコンパイラ)

openmp_flag = -fopenmp (GNUコンパイラ)

openmp_flag = -mp -Dnosse (PGIコンパイラ)

fortran_lib = -lifcore (インテルコンパイラ)

fortran_lib = -lgfortran (GNUコンパイラ)

fortran_lib = -pgf90libs (PGIコンパイラ)

CC=mpicc -O3 openmp_flag
-I/\$(FFTRoot)/include ¥
-I/\$(LBSRoot)/include

FC=mpif90 -O3 -I/\$(LBSRoot)/include

LIB=-L/\$(FFTRoot)/lib -lfftw ¥
-L/\$(LBSRoot)/lib -llapack -lblas ¥
fortran_lib

サンプル1: インテルコンパイラとMKLライブラリ

FFTRoot=/usr/local/fftw3 (FFTライブラリ)
LBSRoot=/opt/intel/mkl (MKLのLAPACKとBLASライブラリ)
openmp_flag = -openmp (インテルコンパイラ)
fortran_lib = -lifcore (インテルコンパイラ)

CC=mpicc -O3 -openmp ¥
-I/\$(FFTRoot)/include ¥
-I/\$(LBSRoot)/include
FC=mpiifort -O3 -I/\$(LBSRoot)/include
LIB=-L/\$(FFTRoot)/lib -lfftw3 ¥
-L/\$(LBSRoot)/lib/intel64 -lmkl_intel_lp64 ¥
-lmkl_intel_thread -lmkl_core -lpthread ¥
-lifcore

サンプル2: PGIコンパイラとACMLライブラリ

FFTRoot=/usr/local/fftw3 (FFTライブラリ)
LBSRoot=/usr/local/acml/gnu64 (ACMLのLAPACKとBLASライブラリ)
openmp_flag = -mp -Dnosse (PGIコンパイラ)
fortran_lib = -pgf90libs (PGIコンパイラ)

CC=mpicc -O3 -mp -Dnosse ¥
-I/\$(FFTRoot)/include ¥
-I/\$(LBSRoot)/include
FC=mpif90 -O3 -I/\$(LBSRoot)/include
LIB=-L/\$(FFTRoot)/lib -lfftw3 ¥
-L/\$(LBSRoot)/lib/ -lacml ¥
-pgf90libs

サンプル3: GNUコンパイラとMKLライブラリ

FFTRoot=/usr/local/fftw3 (FFTライブラリ)
LBSRoot=/opt/intel/mkl (MKLのLAPACKとBLASライブラリ)
openmp_flag = -fopenmp (GNUコンパイラ)
fortran_lib = -lgfortran (GNUコンパイラ)

CC=mpicc -O3 -fopenmp ¥
-I/\$(FFTRoot)/include ¥
-I/\$(LBSRoot)/include
FC=mpif90 -O3 -I/\$(LBSRoot)/include
LIB=-L/\$(FFTRoot)/lib -lfftw3 ¥
-L/\$(LBSRoot)/lib/intel64 -lmkl_intel_lp64 ¥
-lmkl_intel_thread -lmkl_core -lpthread ¥
-lgfortran

サンプル4: GNUコンパイラとACMLライブラリ

FFTRoot=/usr/local/fftw3 (FFTライブラリ)
LBSRoot=/usr/local/acml/gnu64 (ACMLのLAPACKとBLASライブラリ)
openmp_flag = -fopenmp (GNUコンパイラ)
fortran_lib = -lgfortran (GNUコンパイラ)

CC=mpicc -O3 -fopenmp ¥
-I/\$(FFTRoot)/include ¥
-I/\$(LBSRoot)/include
FC=mpif90 -O3 -I/\$(LBSRoot)/include
LIB=-L/\$(FFTRoot)/lib -lfftw3 ¥
-L/\$(LBSRoot)/lib/ -lacml ¥
-lgfortran

役に立つコマンド

- コンパイラが分からないとき

```
%mpicc -compile-info      (MPICHの場合)
```

```
%mpicc -help              (OpenMPIの場合)
```

- フォートランライブラリが見つからないとき

```
/usr/bin/ld: cannot find -lifcore      (インテルコンパイラ)
```

```
/usr/bin/ld: cannot find -lpgf90      (PGIコンパイラ)
```

```
/usr/bin/ld: cannot find -lgfortran   (GNUコンパイラ)
```

まず、コンパイラのフォルダーを探す

```
%which ifort              (インテルコンパイラ)
```

```
/opt/intel/fce/10.0.026/bin/ifort
```

```
%which pgf90              (PGIコンパイラ)
```

```
/opt/pgi/linux86-64/7.0/bin/pgf90
```

```
%which gfortran          (GNUコンパイラ)
```

```
/usr/bin/gfortran
```

次に、LIBに追加

```
LIB= ... -L/opt/intel/fce/10.0.026/lib -lifcore (インテルコンパイラ)
```

```
LIB= ... -L/opt/pgi/linux86-64/7.0/lib -pgf90libs (PGIコンパイラ)
```

```
LIB= ... -L/usr/lib -lgfortran (GNUコンパイラ)
```

よく出るエラーメッセージ1

- オブジェクトファイルがありません

```
gcc: openmx.o: No such file or directory
gcc: openmx_common.o: No such file or directory
.....
```

OR

```
icc: error #10236: File not found: 'elpa1.o'
icc: error #10236: File not found: 'solve_evp_real.o'
icc: error #10236: File not found: 'solve_evp_complex.o'
.....
```

- 原因: (1) **openmp_flag**が違う、または、(2) **mpicc**、**mpif90**が違う
- 解決法

- (1) **openmp_flag**をチェック

```
openmp_flag = -openmp      (インテルコンパイラ)
openmp_flag = -fopenmp    (GNUコンパイラ)
openmp_flag = -mp -Dnosse (PGIコンパイラ)
```

- (2) **mpicc**、**mpif90**をチェック(**mpicc**でなく**mpiicc**、**mpipgcc**。 **mpif90**でなく**mpiifort**、**mpifc77**、**mpipgf77**、**mpipgf90**など)

よく出るエラーメッセージ2

- MPIフォートランライブラリが見つかりません

```
elpa1.o: In function `elpa1_mp_tridiag_real_':  
elpa1.f90:(.text+0x2b7): undefined reference to `mpi_comm_rank_'  
elpa1.f90:(.text+0x2d6): undefined reference to `mpi_comm_size_'  
elpa1.f90:(.text+0x2f5): undefined reference to `mpi_comm_rank_'  
elpa1.f90:(.text+0x314): undefined reference to `mpi_comm_size_'  
.....
```

- 原因:リンクをするとき、CコンパイラがMPIフォートランライブラリを見つけられない。特に、インテルコンパイラによく起こる問題。

- 解決法

- LIBにMPIフォートランライブラリを追加

```
LIB = ... -lmpi_f77 -lmpi_f90 -lifcore
```

よく出るエラーメッセージ3

- OpenMPランタイムライブラリが見つかりません

```
/libmkl_intel_thread.a(dgeqrf_par.o): In function `mkl_lapack_dgeqrf':  
__tmp_par_dgeqrf_omp.f:(.text+0x730): undefined reference to  
`__kmpc_critical'  
__tmp_par_dgeqrf_omp.f:(.text+0x833): undefined reference to `__kmpc_flush'  
__tmp_par_dgeqrf_omp.f:(.text+0x85c): undefined reference to `__kmpc_flush'  
__tmp_par_dgeqrf_omp.f:(.text+0xa32): undefined reference to `__kmpc_flush'  
.....  
libmkl_intel_thread.a(zher2k_drv.o): In function `mkl_blas_zher2k':  
../../../../blas/thread/32e/level3/zher2k.c:(.text+0x66b): undefined  
reference to `__kmpc_global_thread_num'  
../../../../blas/thread/32e/level3/zher2k.c:(.text+0x68b): undefined  
reference to `__kmpc_ok_to_fork'  
../../../../blas/thread/32e/level3/zher2k.c:(.text+0x6aa): undefined  
reference to `__kmpc_push_num_threads'
```

- **原因:**リンクをするとき、CコンパイラがOpenMPランタイムライブラリを見つけられない。特に、MKLライブラリによく起こる問題。

- **解決法**

- LIBにOpenMPランタイムライブラリを追加

```
LIB = ... -liomp5 -lpthread
```

よく出るエラーメッセージ4

- MKLライブラリが見つかりません

```
/usr/bin/ld: cannot find -lmkl_intel_lp64
collect2: ld returned 1 exit status
make: *** [openmx] Error 1
```

- 原因:リンクをするとき、CコンパイラがダイナミックにMKLライブラリを見つけられない。特に、MKLライブラリによく起こる問題。

- 解決法

- LIBのMKLイブラリ部分をダイナミックからスタティックに変更

```
LIB=-L/$(FFTRoot)/lib -lfftw3 ¥
-L/$(MKLROOT)/lib/intel64 -Wl,--start-group
$(MKLROOT)/lib/intel64/libmkl_lapack95_lp64.a ¥
$(MKLROOT)/lib/intel64/libmkl_intel_lp64.a ¥
$(MKLROOT)/lib/intel64/libmkl_intel_thread.a ¥
$(MKLROOT)/lib/intel64/libmkl_core.a -Wl,--end-group ¥
-lifcore
```

OpenMX Forum

[New Thread](#) | [Return Home](#) | [Points of Concern](#) | [Search](#) | [Past Log](#) | [Administration](#)

| List of Threads | | | | | |
|---|--------------------|---------|-------|---|--|
| Topics | Author | Replies | Views | Last Modified | |
| From Administrator | Taisuke Ozaki | 0 | 3732 | 2005/01/09 05:33 by Taisuke Ozaki | |
| Optical propertiese of Graphene | Smart | 0 | 11 | 2015/03/08 17:42 by Smart | |
| What does d1~d5 mean in PDOS file? | Seungjin | 2 | 22 | 2015/03/04 13:00 by Seungjin | |
| openmx and linux distribution | Mosahhar | 10 | 121 | 2015/03/02 19:03 by marindulak | |
| Output files on HPC facilities | Mauro Sgroi | 1 | 28 | 2015/02/26 09:40 by T. Ozaki | |
| DFT+U: different oxidation states on the same element (charge ordering) | Mauro Sgroi | 2 | 45 | 2015/02/23 23:27 by Mauro Sgroi | |
| Pseudo-potential for fictitious atoms | PR | 3 | 62 | 2015/02/23 03:21 by PR | |
| Patch 3.7.10 to OpenMX Ver. 3.7 | T. Ozaki | 0 | 48 | 2015/02/21 23:16 by T. Ozaki | |
| Patch 3.7.9 to OpenMX Ver. 3.7 | T. Ozaki | 2 | 45 | 2015/02/21 22:50 by marindulak | |
| atomic structure for NEGF | Darek | 5 | 76 | 2015/02/20 19:31 by Darek | |
| Small problem in bandgnu13 file | Seungjin | 1 | 35 | 2015/02/20 16:57 by T. Ozaki | |
| installation problem | Mosahhar | 1 | 47 | 2015/02/20 13:18 by T. Ozaki | |
| OpenMX consumes memory and dies | Artem Pulkin | 1 | 46 | 2015/02/20 13:15 by T. Ozaki | |
| Compile Error! | masoud | 12 | 379 | 2015/02/19 00:05 by Masoud | |
| scf convergence problem on Iron based supercell consisting of 484 atoms | Yueqiang Gu | 5 | 46 | 2015/02/11 11:47 by Yueqiang Gu | |
| scf convergence problem of Pt(111) slab | Wang Yuanqing | 10 | 88 | 2015/02/10 21:45 by T. Ozaki | |
| pseudo-atomic basis orbitals | Riemann | 1 | 49 | 2015/02/10 21:38 by T. Ozaki | |
| how to read *.md file using XCrySDen software | Wang Yuanqing | 3 | 145 | 2015/02/10 19:13 by Denis Music | |
| Total energy in NEGF | Artem Pulkin | 6 | 92 | 2015/01/29 18:56 by Artem Pulkin | |
| Transmisson through silicene | Vahid | 0 | 61 | 2015/01/22 20:23 by Vahid | |
| MLWF obtained from OpenMX | Guodong Yu | 4 | 83 | 2015/01/22 11:10 by Guodong Yu | |
| Electrostatic potential between leads in NEGF transport calculations | Konstantin Khromov | 2 | 59 | 2015/01/20 19:45 by Konstantin Khromov | |
| gcc error | William | 1 | 129 | 2014/12/15 14:27 by T.V.T. Duy | |
| problem about example Gly_NH.dat | Wang Yuanqing | 2 | 102 | 2014/12/12 10:46 by Yuanqing Wang | |
| The 3rd OpenMX/QMAS workshop | T. Ozaki | 0 | 233 | 2014/12/11 23:56 by T. Ozaki | |