

OpenMXのコンパイル方法

Truong Vinh Truong Duy
(The University of Tokyo)

2014/10/10

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/14Feb17/patch3.7.8.tar.gz  
% cp ./patch3.7.8.tar.gz openmx3.7/source  
% cd openmx3.7/source  
% tar zxvf patch3.7.8.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
```

List of Threads				
Topics	Author	Replies	Views	Last Modified
 From Administrator	Taisuke Ozaki	0	3516	2005/01/09 05:33 by Taisuke Ozaki
 схема карбюратор даз	MargoLexaDook	0	0	2014/10/08 09:43 by MargoLexaDook
 converge probem in a surface system.	Pang Rui	0	17	2014/10/03 21:43 by Pang Rui
 DFT-D2	Julieth	0	59	2014/09/26 01:05 by Julieth
 Compile Error	Hossein	1	57	2014/09/25 18:43 by Artem Pulkin
 Installing Openmx with Ifort and lcc	Vahid	0	46	2014/09/21 14:22 by Vahid
 Transport Properties in Charged Compounds	Leone	2	56	2014/09/16 01:21 by Leone
 problem with graphene	Nehmat	1	80	2014/09/15 22:33 by Artem Pulkin
 Segmentation fault : NEGF step.1 The calculations for leads	Lee	1	76	2014/09/15 22:01 by Artem Pulkin
 installation problem	Khalid	8	3224	2014/09/10 11:14 by T.V.T. Duy
 problem with band interpolation using HS.out	M. Chen	0	60	2014/09/05 04:58 by M. Chen
 O(N) method in Openmx	Chen	0	158	2014/09/01 05:59 by Chen
 lapack subroutines for diagonalization	John Chan	1	103	2014/08/29 18:36 by Artem
 One more NEGF issue	Artem	13	673	2014/08/25 21:03 by Artem
 Dipole correction for slab calculation	Sung Beom Cho	5	240	2014/08/21 16:51 by T. Ozaki
 FFT of atomic orbitals	M. Chen	1	120	2014/08/20 08:21 by T. Ozaki
 One more question about NEGF performance	Artem	1	181	2014/08/18 18:17 by Artem
 bandstructure of GaAs	Zahra	1	719	2014/08/11 17:13 by T. Ozaki
 ADPACK calculations for ions etc.	M. O.	1	134	2014/08/11 17:09 by T. Ozaki
 Gold nanowire NEGF simulation no convergence	Hassan	3	910	2014/08/09 05:43 by Hassan Farooq
 Optimized norm-conserving Vanderbilt pseudopotentials	chrinide	0	216	2014/07/24 19:52 by chrinide
 MPSH enabled OPENMX	Jaber Jahanbin	0	342	2014/06/22 22:48 by Jaber Jahanbin
 Bi2Te3 topological insulator	Artem	3	834	2014/06/21 10:11 by T. Ozaki
 small residule charges after SCF is completed	Chen	6	322	2014/06/16 15:24 by T. Ozaki
 NEGF Convergence problem in Magnetic junction	Umar	3	336	2014/06/10 18:36 by Artem