

ISSPのkuguiとohtakaでのインストール

kuguiでのインストール

1. ログイン。
2. miseあるいはanacondaを用いてpythonとツールをインストール
3. ecaljのインストールとテスト

```
git clone https://github.com/tkotani/ecalj.git
cd ecalj
```

そのあとインストール+テストのコマンドを打ちます。コンソールで

```
qsub job_install_kugui.sh --gpu
```

です。これを実行すると、コンパイルのあとテスト計算が進んでいく。--gpuが必要。
InstallAllは\$HOME/binを作りそこへecaljのバイナリやスクリプトのコピーを行います。
困る場合は現在のコピーのバックアップをとったうえでecaljに上書きさせる、
というのでもいいかもしれません。あるいはInstallAllの中でbinを検索し書き直してください。
そこにパスを通しておく必要があります。テストはOKを出しながら進んでいきます
[エラーっぽいメッセージをだすのですが気にしないでいいです。](#)
最後は

```
PASSED! ni_crpa/Screening_W-v_crpa.h
PASSED! srvo3_crpa/Screening_W-v.h
PASSED! srvo3_crpa/Screening_W-v_crpa.h
OK! ALL PASSED ===
    See work/summary.txt
Elapsed time for make          : 51 seconds
Elapsed time for testecalj.py: 409 seconds
```

という感じで終了します。これでインストールとテスト完了です。合計10分ぐらいです。
これができたら次に進んでください。コンパイル、テストと進行していくのですが、
テストに突入すれば、

```
tail -f ecalj/SRC/TestInstall/summary.txt
```

を見ていれば、順にテストが進んでいくのが確認できます。最後にPASSED! srvo3_crpa/Screening_W-v_crpa.h
と表示され、FAILとかエラーがなければOKです。

4.GPU計算テスト

ecalj/Samples_ISSP/inas2gasb2_kugui
に移動して、

```
qsub job_kugui.sh
```

を実行。cat lgwscしてみて

```
===== QSGW iteration end   iter 2 ===  
OK! ===== All calculation finished for   gwsc =====
```

で終了していればOKです。

ohtakaでのインストール

ほぼ同様です。ただしインストールは

```
sbatch jobinstall_ohtaka.sh
```

です。の段階でその最後がOK! ALL PASSED！が見れないならインストールできてないです。

それを確認後、計算テストは
ecalj/Samples_ISSP/inas2gasb2
にて

```
sbatch job_ohtaka.sh
```

を行ってください。GPUテストはinas2gasb2_ohtakaにあります。

ISSPシステムでのカスタマイズについて

ecaljソースコードの変更点は
https://ecalj.github.io/ecaljdoc/guide/server_config
に書いてくれています。あるいは、
job_install_kugui.shなどを見てください。