

Tutorial

チュートリアル

Compile and Execution

コンパイルと実行

Compile コンパイル

- 1) `$cd src/`
- 2) Copy the “make.inc.org” as “make.inc”
- 3) Edit the “make.inc” to specify the MPI-Fortran compiler, options, and BLAS and LAPACK (or ScaLAPACK)
- 4) If you use other external library (e.g. FFTE or FFTW), you need to specify some macros (INCLUDE_DIR and ???_L) for the include files and the library itself
- 5) You also need to do preprocessing (see next page)
- 6) `$ make`
- 7) The execution file name is “rsdft.x”

- 1) `$cd src/`
- 2) “make.inc.org” を “make.inc” という名前でコピーする
- 3) “make.inc” を編集し、MPI版Fortranコンパイラ, オプション, BLASおよびLAPACK (または ScaLAPACK) へのリンクを指定する
- 4) 他のライブラリ(e.g. FFTE, FFTW)を使う場合は, マクロ(INCLUDE_DIR and ???_L) にインクルードファイルおよびライブラリのリンクを指定する
- 5) プリプロセッサにもかける必要がある(次々ページ参照)
- 6) `$ make`
- 7) 実行ファイル名は “rsdft.x” である

Preprocessing

- Preprocessing option (such as `-cpp` of ifort) is always necessary
- Keywords for preprocessing
 - `_DRSDFT_` (to generate double-precision real code)
 - `_FFTW_` (FFTW is used)
 - `_FFTE_` (Takahashi's parallel FFT is used)
 - `_LAPACK_` (not to use ScaLAPACK)
- In usual, keywords can be specified as follows:
`ifort · · -cpp -D_DRSDFT_ · ·`

プリプロセッサ

- コンパイル時にプリプロセッサのオプション (ifort であれば `-cpp`) が必要である
- 次のキーワードが指定可能である
 - `_DRSDFT_` (倍精度実数版のコード生成)
 - `_FFTW_` (FFTW を利用する場合)
 - `_FFTE_` (FFTE を利用する場合)
 - `_LAPACK_` (ScaLAPACKを使わない場合)
- Intel Fortranの場合、以下のように指定する:
`ifort .. -cpp -D_DRSDFT_ ..`

Execution 実行

- 1) Prepare the input files and pseudopotential files
- 2) If you do a thread-parallel calculations, an environment variable "OMP_NUM_THREADS" should be specified
- 3) `$mpirun -np ?? ./rsdft.x`

- 1) 入力ファイルおよび擬ポテンシャルファイルを用意
- 2) スレッド並列計算を行う場合は、環境変数 OMP_NUM_THREADS を設定する
- 3) `$mpirun -np ?? ./rsdft.x`

EXAMPLES/

EXAMPLES/C60_rsmol

分子版コード(RSMOL)によるC60分子の自己無撞着電子状態計算

Input File

```
fort.1  
fort.2  
fort.970  
C_psv.dat
```

Execution

```
mpirun -np 16 ./rsdft.x
```


EXAMPLES/GNR

Self-Consistent Field calculation and band-structure calculation for graphene nano ribbon
グラフェンナノリボンの自己無撞着場計算およびバンド計算

antiferro/ SCF calculation with antiferro-magnetic initial spin configuration
反強磁性の初期スピン配置を設定した計算

antiferro/band/ band structure calculation

ferro/ SCF calculation with ferro-magnetic initial spin configuration
強磁性の初期スピン配置を設定した計算

ferro/band/ band structure calculation

Input File

```
fort.1  
fort.2  
fort.970  
fort.980  
C_psv.dat  
H_psv.dat
```

Execution

```
mpirun -np 32 ./rsdft.x  
mpirun -np 64 ./rsdft.x
```

after the band-structure calculation is finished,
the gnuplot data can be generated by using utility/band2gp
バンド計算終了後、utility/band2gp によりgnuplot用データが作成できる

EXAMPLES/N2

rsmol/scf/ SCF calculation with RSMOL (single point)
(分子版プログラムによる自己無撞着場計算(一点計算))

rsmol/scf_and_opt/ Atomic structure optimization calculation with RSMOL
(分子版プログラムによる原子構造最適化計算)

supercell/scf/ SCF calculation with RSSOL (single point)
(固体版プログラムによる自己無撞着場計算(一点計算))

supercell/scf_and_opt/ Atomic structure optimization with RSSOL
(固体版プログラムによる原子構造最適化計算)

RSSOL ・ ・ Usual RSDFT for 3D-periodic systems

RSMOL ・ ・ double-precision-real version of RSDFT with the input parameter "SYStype=1"
(The boundary condition is set for isolated systems)

EXAMPLES/Si2

SCF and band calculation on crystalline Si

EXAMPLES/Si216

SCF calculation of Si with a large-size super cell (216 Si atoms)

EXAMPLES/Si2_HSE

SCF and band calculation on crystalline Si with HSE hybrid-XC functional
(The execute files is compiled with FFTW)

EXAMPLES/Si64V1_BandUnfolding

Atomic structure optimization on the monovacancy in 64-atom Si supercell
Si64原子スーパーセル中の単原子空孔の構造最適化計算

band_unfolding/

The band structure of Si64-V1 is unfolded to the Si2 primitive cell
Si64-V1のバンド構造をSi2プリミティブセルにアンフォールドする計算例

EXAMPLES/Si8_Symmetry

SCF calculation on the 8-atom Si cell with and without symmetry operation

対称性を利用する場合としない場合の8原子SiセルのSCF計算