
【Q-Chem 5.2 のインストール】 — Linux OS へのオンラインインストール（推奨） —

(株) アフィニティサイエンス

概要：Linux OS へのインストールには、オンラインインストールと、予めインストーラパッケージをダウンロードするオフラインインストールの 2 つの方法があります。
ここでは、推奨されているオンラインインストールについて、その手順を説明していきます。

1. 事前準備

- ① Q-Chem をインストールするディレクトリを指定もしくは作成
("installation directory")

例 1) 複数ユーザで使用する場合

(* 共有ディレクトリを指定、管理者権限が必要です.)

`/usr/local/qchem5.2`

例 2) 単独のユーザで使用する場合

`/home/[ユーザ名]/qchem`

- ② 一時ファイルの格納や、ジョブをリスタートする時に使用するスクラッチディレクトリを指定もしくは作成
("scratch directory")

(* クラスタ環境で使用する際は、全てのノードに対して共有されたディレクトリにしておく必要があります.)

例) `/tmp`

(* `/tmp` は既に存在していますので作成する必要はありません.)

- ③ 注文番号を入手

("order number")

(* アフィニティサイエンス 営業部までご連絡下さい.)

- ④ ライセンスファイル受取先のメールアドレスを用意

(* オンラインインストールの中でライセンスリクエストが自動的になされ、指定したメールアドレスにライセンスファイルが 1 ~ 2 日程度で届きます.)

2. パッケージとライセンスのオプション

① パッケージのオプション

i. 共有メモリ

- Linux 64-bit 共有メモリバージョン
(“Linux 64-bit shared memory parallel code”)
- Linux 64-bit NVIDIA/BrianQC GPU サポートバージョン
(“Linux 64-bit shared memory parallel code with NVIDIA/BrianQC GPU support”)
(* BrianQC がインストールされます.)

ii. クラスタ

- Linux 64-bit クラスタバージョン (MPICH 使用)
(“Linux 64-bit cluster-parallel code based on MPICH”)
(* MPICH が組込まれています.)
- Linux 64-bit クラスタバージョン (MPICH3 使用)
(“Linux 64-bit cluster-parallel code based on MPICH3”)
(* MPICH3 が別途必要です.)
- Linux 64-bit クラスタバージョン (OpenMPI 1.10 使用)
(“Linux 64-bit cluster-parallel code based on OpenMPI 1.10”)
(* OpenMPI 1.10 が別途必要です.)

(* Q-Chem 4.x ままで提供されていた “Linux 64-bit serial/multicore-parallel code” バージョンは提供されません.)

(* Q-Chem 5.0 以降は BrianQC による GPU サポート版が提供されています.)

② ライセンスのオプション

i. ノード固定ライセンス

- (“Node-locked licensing”)
- (* ライセンスは特定のマックアドレス固定でマシン毎に付与されます.)
- (* コンピュータ単体での使用, 小さなクラスタ環境に適しています.)

ii. リモートライセンス

- (“FlexNet based remote licensing”)
- (* FlexNet を使用したライセンスサーバが必要です.)
- (* 大規模なクラスタやマルチユーザ環境に適しています.)

3. インストール

- ① オンライン用インストールスクリプトのダウンロード

```
wget -N https://downloads.q-chem.com/qcinstall.sh
```

を実行します。

- ② インストールスクリプトのパーミッションを実行可能に変更

```
chmod +x ./qcinstall.sh
```

を実行します。

- ③ インストールスクリプトの実行

```
./qcinstall.sh
```

を実行します。

- ④ インストール画面上の指示に従って進行

- a) welcome 画面

```
*****
*                                     *
*               Welcome to Q-Chem Installation               *
*                                     *
*****

This is the online installation package for Q-Chem.
Internet access is required to download the distribution.
```

- b) Q-Chem をインストールするディレクトリの入力

上記 1.事前準備で用意されたインストールディレクトリを絶対パスで入力します。

例 1) /usr/local/qchem5.2

例 2) /home/[ユーザ名]/qchem

```
Please specify the path of the new Q-Chem installation directory,
or type 'x' to exit
```

```
> installation directory (絶対パス)
```

```
Q-Chem will be installed in "installation directory"
```

c) インストールするパッケージの選択

上記 2.パッケージのオプションにありました使用可能パッケージが表示されますので、インストールするパッケージの番号を選択します。

```
You are installing Q-Chem 5.2.0
Available packages for LINUX_Ix86_64:
 1 -- Linux 64-bit shared-memory version
 2 -- Linux 64-bit cluster version (built-in MPICH)
 3 -- Linux 64-bit cluster version (requires MPICH3)
 4 -- Linux 64-bit cluster version (requires OpenMPI 1.10)
 5 -- Linux 64-bit version with NVIDIA GPU support (installs BrianQC)

Please choose package to install or press 'x' to exit [1-5]
> _
```

d) スクラッチディレクトリの入力

上記 1.事前準備で用意されたスクラッチディレクトリを絶対パスで入力します。

例) /tmp

```
*****
*
*               Q-Chem Runtime Environment               *
*
*****

$QCSCRATCH:
A scratch directory, specified by the $QCSCRATCH variable, is
required for storing temporary files and for restarting jobs.
In a cluster environment the scratch directory must be a
shared directory available to all of the nodes.

Please specify the full path for a scratch directory
> scratch directory (絶対パス)
```

e) 使用メモリのデフォルト最大値の入力

使用メモリの最大値をデフォルトで何メガバイトにしておくかを入力します。(既定値は 8000 です.)

```
Default Upper Memory Limit:
The MEM_TOTAL keyword in Q-Chem input files specifies the
maximum amount of memory used by each Q-Chem process.
Here you can set a default value for MEM_TOTAL, which
will be saved in $QC/config/preference file. You can edit
this file later or specify MEM_TOTAL in input files.

Please specify a default value for MEM_TOTAL in megabytes [8000]
> 使用メモリのデフォルト最大値
```

f) 設定ファイルの格納場所表示

システム・コンフィグレーション・プリファレンスファイルの場所と環境変数ファイルの場所が表示されます。

```
*****
*                                     *
*               Q-Chem Runtime Environment               *
*                                     *
*****

The Q-Chem system configuration preference file is:
config/preferences の場所

The environment variables file is:
config/shellvar.txt の場所

*****
```

g) ライセンス契約の確認

ライセンス契約内容を閲覧するかどうかを聞いてきますので, y を入力し内容をご確認下さい.

```

*****
*                                     *
*               Q-Chem License Agreement               *
*                                     *
*****

Please review Q-Chem's licensing agreement before registration.

Would you like to view the licensing agreement? <y/n>...<y>y
-----

                High-Performance User License Agreement
                for Q-Chem* Software
-----

This document is a legal agreement between you (the "Licensee")
and Q-Chem, Inc. (the "Licensor"). Please read this agreement carefully
before installing Q-Chem (the "Software Product").

By installing the Software Product, the Licensee agrees to the terms
of this agreement. If the Licensee does not agree to the terms of this
agreement, promptly return the uninstalled Software Product along with all
accompanying materials at the Licensee's expense to:

                Q-Chem, Inc.
                Four Triangle Drive, Suite 160
                Export, PA 15632
                USA

or the authorized distributor from whom it was purchased.

1. Grant of License. This agreement grants the Licensee the following rights:

```

h) ライセンス契約の受諾

ライセンス契約に合意するかどうかを聞いてきますので、（よろしければ）y を入力します。

7. Miscellaneous. This agreement is governed by the laws of the Commonwealth of Pennsylvania, United States and applicable international laws. Should the Licensee have any questions concerning this agreement or if the Licensee desires to contact the Licensor for any reason, please call +1 (724) 325-9969 or write: Q-Chem, Inc., Four Triangle Drive, Suite 160, Export, PA 15632-9255, USA.
8. Limited Warranty. The Licensor warrants that the software medium will be free from defects in materials and workmanship under normal use and service for a period of one (1) year from the date of receipt. To the extent allowed by applicable law, implied warranties on the software medium, if any, are limited to ninety (90) days.

The Licensor specifically does NOT warrant the results of calculations performed using the Software Product. The Licensee is responsible for assuring that the mathematical, engineering, scientific use or any other application of the Software Product is qualified according to the applicable professional norms.
9. Customer Remedy Under Warranty. The Licensor's entire liability and exclusive remedy shall be replacement of the software medium that does not meet the Licensor's Limited Warranty and which is returned to the Licensor with a copy of the Licensee's receipt, paid invoice or other proof of purchase. This Limited Warranty is void if failure of the software medium has resulted from accident, abuse or misapplication. Any replacement software medium will be warranted for the remainder of the original warranty period or thirty (30) days, whichever is longer. Outside the United States, neither these remedies nor any product support services offered by the Licensor are available without a copy of the Licensee's receipt, paid invoice or other proof of purchase from an authorized distributor.
10. Disclaimer of Warranty. The Licensor and its suppliers disclaim all other warranties, either expressed or implied, including, but not limited to, implied warranties of merchantability and fitness for a particular purpose with regard to the Software Product and any accompanying software medium.
11. No Liability for Consequential Damages. In no event shall the Licensor or its suppliers be liable for any special incidental, indirect or consequential damages whatsoever (including, without limitation, damages for loss of business profits, business interruptions, loss of business information or any other pecuniary loss) arising out of the use of or inability to use the Software Product, even if the Licensor has been advised of the possibility of such damages.
12. No Third Party Liability. The Licensee agrees to indemnify the Licensor, its distributors and its suppliers from assertions by Third Parties against the Licensor resulting from the use of this Software Product by Licensee for the benefit of said Third Parties. Under no circumstance shall the Licensor be held liable for the application selected, employed or otherwise made the responsibility of the Licensee for the benefit of any Third Party.

*Q-Chem is a trademark of Q-Chem, Inc.

Do you accept the terms of the licensing agreement? <y/n>...<y>y_

- i) ライセンス登録（注文番号とライセンスファイル送付用メールアドレスの入力）

上記 1.事前準備で用意された注文番号とライセンスファイルの送付先メールアドレスを入力します。

```

*****
*
*                               Q-Chem License Registration                               *
*
*****

Registration is required to use Q-Chem. Please provide a valid
e-mail address in order to receive a Q-Chem license file.

- If you are a current Q-Chem user, please provide the order number
  below. It can be found in the e-mail you received from Q-Chem.

- If you are a new Q-Chem user without an order number, please enter 0
  below and provide the registration information subsequently.

Please enter your order number: ##### 注文番号

[IMPORTANT: a valid Email is REQUIRED to receive license]
Please enter your email address CORRECTLY: *****@*****.***

User Registration Information:                                     メールアドレス
-----
Order Number: #####
Email:          *****@*****.***

Is the above information correct?<y/n>...<y>y_

```

表示された内容で宜しければ y を入力します。

j) ライセンスオプションの選択

上記 2.ライセンスのオプションにありましたノード固定ライセンスか FlexNet を使用するリモートライセンスにするかを選択し、1 か 2 を入力します。

```
*****
*
*                               Q-Chem Licensing Options
*
*****

Q-Chem has two options for licensing:

1-- Node-locked licensing where licenses are issued
   for specific machines. This is appropriate for
   single computers and most small clusters.

2-- FlexNet based remote licensing. This option
   requires a central licensing server and is
   appropriate for larger clusters and multi-
   user environments.

Please specify the licensing scheme from above. (<1>/2)
> 1_
```

k) ライセンス要求データの Q-Chem サーバへの送信

注文番号、メールアドレス、インストールしたマシンのデータが自動的に Q-Chem サーバに送られます。また、ここで画面上に表示されたライセンス要求内容が登録したメールアドレスに送られます。(ライセンスデータの内容ではありません。)

メール送信に失敗した場合は、インストールディレクトリに作成された license.dat ファイルをメール添付して、license@q-chem.com までライセンスをリクエストしてください。

(＊画面は次ページ)

```

machine ID data
The installer is now submitting license data to the Q-Chem server

Message from Q-Chem Server:

The following license data has been received.
A copy of this message has been sent to
*****@*****.***

2019年 6月 11日 火曜日 12:43:46 DST
#sta_regi
  Order Number: #####
  User Name:
  Department:
  Group Leader:
  Institute:
  Email: *****@*****.***
#end_regi
QCPLATFORM  LINUX_Ix86_64
QCMP        SEQ
QCVERSION   5.2.0
QCOLDVER    5.2.0
#sta_sid
machine ID data
#end_sid
This is not your license, you will receive the license
in another email shortly.

-----

Summary of License Data Gathering

The licenses data has been submitted to Q-Chem
office. You should receive a confirmation email
and subsequently the license file at the email
address *****@*****.***

If you do not receive the confirmation email
within an hour please email the file
[インストールディレクトリ]/license.dat
to license@q-chem.com to request your license.

-----

```

1) インストールサマリ画面

実行環境の設定方法が表示されます。

```

*****
*
*                               Q-Chem Installation Summary
*
*
*****

Q-Chem installation/update has been completed.

To run Q-Chem calculations simply source the setup script below.

For tcsh or csh:
source [インストールディレクトリ]/qcenv.csh

For bash:
.[インストールディレクトリ]/qcenv.sh

You can put the above lines in your shell startup script
~/.cshrc for tcsh/csh or ~/.bashrc for bash.

To get the latest Q-Chem updates please run

[インストールディレクトリ]/qcupdate.sh

To regenerate license data please run

[インストールディレクトリ]/qcinstall.sh --update-lic

*****

```

Q-Chem の計算をさせるためのセットアップスクリプトをシェルの実行環境に反映させる必要があります。

- tcsh 又は csh 系ユーザは、シェルのリソースファイル ~/.cshrc に
‘source [インストールディレクトリ]/qcenv.csh’ を追加します。
- bash 系ユーザは、シェルのリソースファイル ~/.bashrc に
‘.[インストールディレクトリ]/qcenv.sh’ を追加します。
- その後、シェルを再起動するか source コマンドを使って環境設定を現在のシェルに反映させます。

source ~/.cshrc

または

source ~/.bashrc

⑤ ライセンスファイルの保存

インストールから 1~2 日で “Q-Chem 5.2 License – OrderID: ####” というタイトルのメールが “Q-Chem License” office@q-chem.com より送られてきます。

‘qchem.license.dat.[ホストマシン名]’ という名前でライセンスファイルが添付されています。

最後の [ホストマシン名] という拡張子を削除し、‘qchem.license.dat’ という名前で Q-Chem インストールディレクトリ直下にある qcaux/license ディレクトリ内に保存します。

⑥ Q-Chem の実行

正しいライセンスファイルが格納されると、コマンド

qchem [入力ファイル] [出力ファイル]

により Q-Chem を実行することができます。

EOD