

超大規模電子構造計算プログラムパッケージ

ELSESES

クイックスタートガイド

2010年2月8日

ELSESES version 0.02.04

Copyright (C) ELSESES. 2007-2010 all rights reserved

1 ELSESES のインストール

1.1 ファイルの展開

ELSESES のアーカイブを展開してください。そして生成される `elses` ディレクトリに入ってください。

```
prompt> tar zxvf elses-v*.tar.gz
prompt> cd elses
```

1.2 コンパイラの指定

使用する Fortran90 コンパイラやオプション、線形計算のための LAPACK ライブラリを `Makefile.inc` で指定してください。ELSESES では LAPACK ライブラリと BLAS ライブラリを使用しますので、これらは別途用意する必要があります。

```
## for GNU Fortran compiler (gfortran)
FC = gfortran
FFLAGS = -O2 -fopenmp
LDFLAGS = -fopenmp
LIBS = -L/usr/local/lib -llapack -lblas
```

なお、このファイル中にはいくつかのコンパイラ用の設定がコメント文として書き込まれていますので、適宜ご利用ください。下記のコンパイラに関しては公式なマシン環境として動作確認を行ってあります。

- Intel Fortran compiler 10.1.013 (ifort)
- GNU Fortran compiler 4.3 (gfortran)

Intel Fortran compiler の場合には標準パッケージに含まれる `mkl` が Lapack、BLAS と互換性をもっていますので、これを利用して動作確認を行っています。また、Intel Fortran compiler 11 については、§5.3 を参照してください

1.3 コンパイルの実行

`elses` ディレクトリにて `make` コマンドを実行すると全体のコンパイルが行われます。GNU `make` の `gmake` コマンドを利用できる場合は `make` コマンドの代わりに `gmake` コマンドを実行してください。

```
prompt> make
もしくは
prompt> gmake
```

上記でうまくいかない場合には、§5.1 を参照してください。

2 ELSES の実行

2.1 入力ファイル

ELSES の実行には、計算条件を指定する設定ファイル (ファイル名の例 : config.xml)、原子構造を指定する構造ファイル (ファイル名の例 : H2O.xml)、そして各原子種の設定を記述するエレメントファイル (ファイル名の例 : O.xml ; オプション) という 3 つのファイルを入力として用意する必要があります。GENO 用として各ファイルのサンプルが sample ディレクトリにおいてありますので参考にしてください。用意してあるサンプルデータは以下のとおりです。

- sample/H2O/ 水分子の構造最適化計算
- sample/FeO/ FeO の構造最適化計算
- sample/C6H6/ ベンゼンの構造最適化計算

2.2 ELSES の実行

H2O のサンプルデータでのテスト計算は次のように `elses` を実行することで行えます。

```
prompt> cd sample/H2O/  
prompt> ../../bin/elses config.xml > log.txt
```

標準出力に多くのデータが出力されますので、適当なファイルにこのようにして内容を保存してください。また実行の際に `verbose mode` を指定することにより、より詳細な計算データを標準出力させることが可能です。verbose mode を使用する場合には、

```
prompt> bin/elses -verbose sample/H2O/config.xml > log.txt
```

のように入力してください。さらに `verbose level` を指定することも可能です。

2.3 計算結果の出力

ELSES による計算結果は、

- Output.txt 各 MD ステップにおけるいくつかのエネルギーと力。
- position.*** 原子座標等の時系列データ (構造可視化用)。拡張子は出力形式指定により変化。

に出力されます。Output.txt に出力される情報は、

- EBD : 電子系の全エネルギー
- ECSC: Charge Self-consistent 計算におけるエネルギー
- ECC : イオン間の反発エネルギー
- EKE : イオン系の運動エネルギー
- ETOT=EBD + ECSC + ECC : 全エネルギー
- Force Amp. Average : 各原子に働く力の平均値
- Force Amp. Max : 原子に働く力の最大値
- The atom that gives the max. force amp. : 力の最大値を与える原子のインデックス

となっています。

MD ステップは step_count と表示され、初期構造が step_count=0 に相当します。構造可視化については、3.1.7 節および 4 章を参照してください。

```
Output; step_count=          0
Output energy
Band      Energy : EBD  [au]:      -5.354889612444059
ECSC      Energy : ECSC [au]:      0.005896973224723
Core-core Energy : ECC  [au]:      0.133744388618370
Kinetic   Energy : EKE  [au]:      0.000000000000000
EBD+ECSC+ECC Energy : ETOT [au]:  -5.215248250600966

Output Force Amplitude
Force Amp. Average [au] [eV/A]=    0.001847988466501      0.095028171963333
Force Amp. Max     [au] [eV/A]=    0.002694530626049      0.138559479311817
The atom that gives the max. force amp. =      2
-----
Output; step_count=          1
Output energy
Band      Energy : EBD  [au]:      -5.353475253629405
ECSC      Energy : ECSC [au]:      0.005855611875832
Core-core Energy : ECC  [au]:      0.131310482105255
Kinetic   Energy : EKE  [au]:      0.000000000000000
EBD+ECSC+ECC Energy : ETOT [au]:  -5.216309159648318

Output Force Amplitude
Force Amp. Average [au] [eV/A]=    0.001601750944725      0.082366024992552
Force Amp. Max     [au] [eV/A]=    0.002283671110843      0.117432059216136
The atom that gives the max. force amp. =      3
```

3 ELSESES の入力ファイル

3.1 計算条件設定ファイル

設定ファイルを編集することにより ELSESES での計算条件を変更することができます。なお、設定ファイルは xml の文法に従って記述してください。サンプルデータとして用意されている水分子の設定ファイル `sample/H2O/config.xml` は、次のようになっています。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<config name="H2O">

<system>
  <cluster structure="H2O.xml" />
  <boundary x="nonperiodic" y="nonperiodic" z="nonperiodic" />
  <temperature unit="kelvin"> 273.15 </temperature>
  <element name="H" model="geno" filename="H.xml"/>
  <element name="O" model="geno" filename="O.xml" />
</system>

<calc mode="optimization">
<genoOption>
  <CSC_method> ELSTNER </CSC_method>
  <CSC_max_loop_count> 10000 </CSC_max_loop_count>
  <CSC_charge_convergence> 1d-6 </CSC_charge_convergence>
  <CSC_charge_mixing_ratio> 0.1 </CSC_charge_mixing_ratio>
</genoOption>
<optimization>
  <sd_ratio> 0.2 </sd_ratio> <max_num_iter> 200 </max_num_iter>
</optimization>
<dynamics scheme="velocity verlet">
  <delta unit="fsec"> 1.00 </delta>
  <total unit="fsec"> 500.00 </total>
</dynamics>
</calc>

<output>
  <restart filename="restart.xml" interval="1" />
  <position filename="position.xyz" interval="1" />
</output>

</config>
```

3.1.1 計算する原子構造の指定

`system` タグの中の `cluster` タグで系の原子構造データを設定できます。タグの `structure` 属性で原子構造データのファイル名を指定します。この原子構造データのファイルについては後で説明します。

```
<cluster structure="H2O.xml" />
```

3.1.2 エlementファイルの指定

計算に用いるパラメータを記述したElementファイルを、system タグの中の element タグで指定します。ファイル名の記述は必須です。なお、指定したElementファイルが存在しない場合には、ELSESES にデフォルトで設定されているパラメータの値を用いて計算を行います。

```
<element name="H" model="geno" filename="H.xml"/>
```

3.1.3 計算モードの選択

ELSESES では、構造最適化計算と定温ダイナミクス計算が実行可能です。実行する計算内容は calc タグの mode 属性で指定します。mode="optimization" で構造最適化、mode="dynamics" で定温ダイナミクス計算が実行されます。

```
<calc mode="optimization">
</calc>
```

```
<calc mode="dynamics">
</calc>
```

3.1.4 optimize mode の設定

optimize mode で計算を行う場合には、optimization タグ内で MD ステップの総回数を max_num_iter で指定します。現段階の ELSESES には最適構造の収束判定は実装されていません。

```
<optimization>
  <sd_ratio> 0.2 </sd_ratio>
  <max_num_iter> 200 </max_num_iter>
</optimization>
```

3.1.5 dynamics mode の設定

dynamics mode で計算を行う場合には、MD の経過時間を dynamics タグで設定します。dynamics タグの中の delta タグの数値で MD のひとつの時間ステップの時間刻み幅を設定できます。また、total タグの数値で MD でシミュレートする系の時間を設定できます。どちらも時間の単位は unit 属性で設定し、フェムト秒 (unit="fsec") と原子単位 (unit="a.u.") が指定できます。

```
<dynamics scheme="velocity verlet">
  <delta unit="fsec"> 1.00 </delta>
  <total unit="fsec"> 500.00 </total>
</dynamics>
```

3.1.6 Charge Self-Consistent 計算の設定

ELSESES では電荷自己無撞着 (CSC) 計算が可能です。genoOption タグ内の CSC_method タグで ELSTNER を指定してください。

```

<genoOption>
  <CSC_method> ELSTNER </CSC_method>
  <CSC_max_loop_count> 10000 </CSC_max_loop_count>
  <CSC_charge_convergence> 1d-6 </CSC_charge_convergence>
  <CSC_charge_mixing_ratio> 0.1 </CSC_charge_mixing_ratio>
</genoOption>

```

また、CSC 計算を行わない場合には CSC_max_loop_count タグで 0 を指定してください。

```

<genoOption>
  <CSC_method> ELSTNER </CSC_method>
  <CSC_max_loop_count> 0 </CSC_max_loop_count>
  <CSC_charge_convergence> 1d-6 </CSC_charge_convergence>
  <CSC_charge_mixing_ratio> 0.1 </CSC_charge_mixing_ratio>
</genoOption>

```

3.1.7 出力ファイルの設定

output タグの中の position タグで各 MD ステップでの原子の座標を蓄積して保存するファイルを指定できます。ファイル名はタグの filename 属性で、間隔は interval 属性でそれぞれ設定できます。また、output タグの中の restart タグで原子の座標や速度などのデータを保存するファイルを指定できます。ファイル名はタグの filename 属性で、間隔は interval 属性でそれぞれ設定できます。このファイルは ELSESES でダイナミクス計算を再開するための再計算用データファイルとなります。

```

<output>
  <restart filename="restart.xml" interval="1" />
  <position filename="position.xyz" interval="1" />
</output>

```

また、ELSESES ではファイル名の拡張子を変更することによって、以下の 4 種類のファイル出力が可能です。

(1) xyz 形式

```
<position filename="position.xyz" interval="1" />
```

出来るファイル：position.xyz

周期系非対応。力の表示なし。

対応ソフト：vmd, molden, vesta(*)

(2) axsf 形式 (animated xsf 形式)

```
<position filename="position.axsf" interval="1" />
```

出来るファイル：position.axsf

周期系対応。力の表示あり。

対応ソフト：xcrysden,

(3) xsf 形式

```
<position filename="position.xsf" interval="1" />
```

出来るファイル：連番ファイル (MDstep 番号が入っている)

(例:position0000000000.xsf , position0000000010.xsf,...)

周期系対応。力の表示あり。

対応ソフト：xcrysden, vesta(**)

(4) pdb 形式

例： <position filename="position.pdb" interval="1" />

出来るファイル：連番ファイル (MDstep 番号が入っている)

(例:position000000000.pdb, position000000010.pdb,...)

周期系非対応。力の表示なし。

対応ソフト：vmd, rasmol, molden, vesta

注：rasmol で連続読込・動画作成を実現する rasmol 専用スクリプトも出力される。

(ファイル名は、rasmol-batch.txt、rasmol- setting.txt)

(*) 最初の snapshot しか読み込まれない。

(**) 元素記号の部分を原子番号に置き換えないと正しく読み込まれない。

例：「H」 「1」

3.2 原子パラメータの設定 (GENO 型ハミルトニアン)

エレメントファイルを用意することにより、ELSES 内で使われる原子パラメータを設定することができます。エレメントファイルを用意しない場合は、プログラムに含まれるデフォルト値が設定されます (デフォルト値の詳細は別紙のドキュメントを参照)。エレメントファイルを使用する場合には、計算に必要な全ての情報を入力する必要があります。サンプルデータとして用意されている水分子における酸素原子のエレメントファイル sample/H2O/O.xml は、以下のようになっています。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<element type="Huckel" name="O">
  <mass> 16.0d0 </mass>
  <initial_charge> 0 </initial_charge>
  <principal_quantum_number> 2 2 2 </principal_quantum_number>
  <initial_occupation> 2.d0 1.333d0 1.333d0 1.333d0 </initial_occupation>
  <initial_diagonal_elements> -28.20d0 -12.4d0 -12.4d0 -12.4d0 </initial_diagonal_elements>
  <zeta> 2.575d0 2.275d0 2.275d0 2.275d0 </zeta>
  <chemical_hardness> 12.4d0 </chemical_hardness>
  <repulsive_rescaling> 1.0 1.0 1.0 1.0 </rescaling_zeta>
</element>
```

また、d 軌道を用いた計算を行う場合には、サンプルリストのパラメータ以外に、zeta2、c1、c2 といったパラメータの入力も必要になります。d 軌道に関する入力例は、/sample/FeO/Fe.xml を参照ください。

3.3 原子パラメータの設定 (NRL 型ハミルトニアン)

Naval Research Laboratory (NRL) 型のハミルトニアンを用いるときは、NRL のサイト (<http://cst-www.nrl.navy.mil/bind>) からパラメータファイルをダウンロードし、XML 形式に変換する必要があります。なお、ELSES で NRL ハミルトニアンを用いる場合、現状では単体系のみに対応しています。

以下では金を例とし、ダウンロードしたパラメータファイルを au_par_99.txt とします。変換は tool/elses-xml-generate-nrl-param を以下のように使います。

```
prompt> elses-xml-generate-nrl-param au_par_99.txt au_par_99.xml Au
```

コマンドの引数は順番に、ダウンロードしたパラメータファイル、生成される XML ファイル名、元素名、です。XML ファイル名は任意です。

出力された XML ファイル (例では au_par_99.xml) を実行ディレクトリにコピーし、configuration XML ファイルの system タグ下に以下のように記述します。

```
<element name="Au" model="NRL" filename="au_par_99.xml"> </element>
```

3.3.1 原子軌道の種類

原子の質量は mass タグ内で指定し、原子の初期電荷は initial_charge タグで指定します。この時の電荷は中性原子からのズレで入力してください。どちらも原子単位系での入力になります。

```
<mass> 16.0d0 </mass>
<initial_charge> 0 </initial_charge>
```

計算に用いる原子軌道の種類は、principal_quantum_number タグで設定します。現在の ELSESES では、s 軌道 1 個、p 軌道 3 個、d 軌道 5 個を用いた計算が可能です。各軌道の主量子数を、s、p、d 軌道の順番で指定します。また、初期の各軌道の電子占有数は initial_occupation タグで指定します。軌道の種類を指定する場合と同様に、s、p、d 軌道の順番で占有数を指定します。

```
<principal_quantum_number> 2 2 2 2 </principal_quantum_number>
<initial_occupation> 2.d0 1.333d0 1.333d0 1.333d0 </initial_occupation>
```

3.3.2 Slater 軌道に関するパラメータの設定

計算で用いる軌道エネルギーを initial_diagonal_elements タグで設定できます。軌道エネルギーを s、p、d 軌道の順番で eV 単位で指定してください。Slater 軌道の広がりを決める ζ は、zeta タグで設定します。原子単位系で s、p、d 軌道の順番で指定してください。

```
<initial_diagonal_elements> -28.20d0 -12.4d0 -12.4d0 -12.4d0 </initial_diagonal_elements>
<zeta> 2.575d0 2.275d0 2.275d0 2.275d0 </zeta>
```

3.3.3 Repulsive part の設定

Repulsive part 計算時の STO の ζ を $\zeta^{rep} = (\text{repulsive_rescaling}) * \zeta$ の形で設定できます。repulsive_rescaling タグ内で、s、p、d 軌道の順番で指定してください。

```
<repulsive_rescaling> 1.0 1.0 1.0 1.0 </rescaling_zeta>
```

3.3.4 Chemical hardness の設定

CSC 計算を行う際の chemical hardness の値を設定することができます。数値は eV 単位で指定してください。

```
<chemical_hardness> 12.4d0 </chemical_hardness>
```


3.4 構造ファイルの書式

構造ファイルを編集することで各原子の初期座標や初期速度、座標を固定するかなどを変更できます。サンプルデータとして用意されている水分子の設定ファイル `sample/H2O/H2O.xml` は、次のようになっています。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<structure name="H2O" mdstep="0">

  <unitcell>
    <vector unit="angstrom"> 10.0 0.0 0.0 </vector>
    <vector unit="angstrom"> 0.0 10.0 0.0 </vector>
    <vector unit="angstrom"> 0.0 0.0 10.0 </vector>
  </unitcell>

  <heatbath>
    <massperatom unit="a.u."> 0.2500000000000000E+02</massperatom>
    <position unit="a.u."> 0.0000000000000000E+00 </position>
    <velocity unit="a.u."> 0.0000000000000000E+00 </velocity>
  </heatbath>

  <atom element="O" class="" motion="free">
    <position unit="angstrom"> 0.000000000 0.000000000 0.000000000 </position>
  </atom>
  <atom element="H" class="" motion="free">
    <position unit="angstrom"> 0.584410971 0.761619206 0.000000000 </position>
  </atom>
  <atom element="H" class="" motion="free">
    <position unit="angstrom"> 0.584410971 -0.761619206 0.000000000 </position>
  </atom>
```

ただし、このファイルは次の章で説明する付属ユーティリティプログラムで自動生成されます(3.4節参照)ので、このファイルを手作業で編集する機会は少ないです。いくつかの基本的な項目の変更方法を以下で説明します。

3.4.1 特定原子の座標を固定する場合

各 `atom` タグの `motion` 属性に `fixed` を指定するとその原子の MD 計算での運動を固定することができます。

```
<atom element="H" motion="fixed"> ... </atom>
```

3.4.2 原子の初期座標の設定

各 `atom` タグの中の `position` タグの数値でその原子の 3 次元座標を設定できます。座標の単位はタグの `unit` 属性に `"angstrom"` を指定すればオングストロームとなり、“a.u.”を指定すれば原子単位系の長さとなり、また `"internal"` を指定すれば `unitcell` で指定した基本格子ベクトルに対する内部座標となります。

3.4.3 原子の初期速度の設定

各 `atom` タグの中の `velocity` タグの数値でその原子の 3 次元速度を設定できます(オプション)。

3.5 構造ファイルの作成方法

XML 形式の構造データファイルは ELSESES 付属のユーティリティプログラム `tool/elses-xml-generate` を用いて簡単な XYZ 形式の原子座標データファイルから生成することができます。

3.5.1 XYZ 形式の分子座標データファイルの用意

ELSESES で計算する分子の XYZ 形式のデータファイルを用意してください。XYZ 形式とは分子の各原子の元素名と座標が以下のような簡単な形式で保存されたデータファイルです。このファイルでの座標の単位はオングストロームです。ファイル名は任意ですが、ここでは `H2O.xyz` としておきます。

```
3
H2O
O 0.000000000 0.000000000 0.000000000
H 0.584410971 0.761619206 0.000000000
H 0.584410971 -0.761619206 0.000000000
```

3.5.2 構造データ生成指定ファイルの用意

この XYZ 形式のファイルから XML 形式の構造ファイルを生成するための以下のような別の XML 形式による生成設定ファイルを用意してください。ファイル名は任意ですが、ここでは `generate.xml` としておきます。

```
<?xml version="1.0" encoding="UTF-8"?>
<generate name="H2O">
  <unitcell>
    <vector unit="angstrom"> 10.0 0.0 0.0 </vector>
    <vector unit="angstrom"> 0.0 10.0 0.0 </vector>
    <vector unit="angstrom"> 0.0 0.0 10.0 </vector>
  </unitcell>

  <cluster structure="H2O.xyz">
  </cluster>
</generate>
```

このファイルの冒頭では、直方体形状の系の各辺の長さを `unitcell` タグで指定してください。

```
<unitcell>
  <vector unit="angstrom"> 10.0 0.0 0.0 </vector>
  <vector unit="angstrom"> 0.0 10.0 0.0 </vector>
  <vector unit="angstrom"> 0.0 0.0 10.0 </vector>
</unitcell>
```

各辺のベクトルが直交座標となるように座標値を指定してください。現在、平行六面体などの斜交座標での計算には対応していません。座標の単位は `unit` 属性で `angstrom` にすることもできます。

3.5.3 構造データ生成ユーティリティの実行

この構造データ生成設定ファイルに対してユーティリティプログラム `tool/elses-xml-generate` を次のように実行すると、構造データファイル `H2O.xml` が生成されます。

```
prompt> elses-xml-generate generate.xml H20.xml
```

ここでこのコマンドの第一引数が入力となる構造データ生成設定ファイルで、第二引数が出力となる XML 形式の構造データファイルです。

4 各種可視化ソフトへの対応

ELSES では、以下の可視化ソフトに対応した出力が可能となっています。詳しい操作方法は、各ソフトのマニュアルを御確認ください。それぞれのソフトウェアで対応しているファイル形式が異なりますので、3.1.7 節を参照し、適切なファイル形式で出力してください。この章では、rasmol によるバッチ処理について説明します。なお、Jmol でも同じスクリプト言語によるバッチ処理が可能です。

- rasmol (<http://openrasmol.org/>)
- Jmol (<http://jmol.sourceforge.net/>)
- molden (<http://www.cmbi.ru.nl/molden/molden.html>)
- xcrysdn (<http://www.xcrysdn.org/>)
- VMD (<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>)
- VESTA (http://www.geocities.jp/kmo_mma/crystal/jp/vesta.html)

4.1 rasmol によるバッチ処理

rasmol はバッチファイルを使った連続処理が可能で、以下その例を説明します。内容的には、時系列的な構造データファイル (pdb 形式) を順次読み込み、可視化させていくと同時に画像ファイル (gif 形式) に変換していくというものです。

4.1.1 シミュレーション実行前の設定

シミュレーション実行前に、config.xml の中で、出力インターバルを設定します。また、3.1.7 節にある通り、出力ファイル形式を pdb に設定してください。

```
<position filename="H2O-position.pdb" interval="4" />
```

上記の例だと、4MD step ごとに出力します。(1, 5, 9, 13,..... iteration.....)

4.1.2 バッチ処理に必要なファイル

シミュレーション終了後、各 MD ステップごとのデータファイル (PDB 形式) が、多数出力されます。ファイル名は例えば「snap0000000001.pdb」で、番号部分は MD ステップの数を表します。他に、以下の rasmol 用スクリプトファイルができます。

- rasmol-batch.txt
- rasmol-setting.txt

4.1.3 rasmol の起動

バッチファイルがあるディレクトリで、rasmol を起動します。可視化画面とコマンドラインが開くので、コマンドラインで

```
RasMol > set write on
```

を実行します (ファイルへの書き込みを許可する、という意味です)

4.1.4 rasmolでのバッチ処理

rasmol コマンドライン上で、

```
RasMol > script rasmol-batch.txt
```

を実行します。すると、snapshot が順次読み込まれ、表示され、静止画像ファイルに変換されます。

例 ; snap0000000001.pdb snap0000000001.gif

4.1.5 バッチファイルの中身について

rasmol-batch.txt はバッチファイルで、以下が 1snapshot ごとの動作を表します。

```
zap
set specular on
background white
load pdb snap0000000001.pdb
echo load snap0000000001.pdb
script rasmol-setting.txt
write gif snap0000000001.gif
```

最後の行の「gif」の部分を変えると、gif 以外の画像を生成できます。詳細は、rasmol の解説 WebPageなどを参照してください。

一方、rasmol-setting.txt は、描画の設定で、現在は、以下の中身になっています。

```
select all
color green
spacefill 150
wireframe 100
#pause
```

最終行の「#」はコメントアウトを意味し、最終行は無効になっています。「#」をはずすと、1 スナップショットごとに動作が一時停止し、リターンキーを押すと次のスナップショットに移ります。詳細は、rasmol の解説 WebPageなどを参照してください。

5 トラブルシューティング

5.1 コンパイルがうまくいかない場合

通常は §1 で説明した方法でコンパイルできますが、それがうまくいかない場合には、下記コマンドを逐次実行し、ご報告ください。ただし、「make」の部分は必要に応じて「gmake」に置き換えてください。

```
prompt> make clean
prompt> make xml
prompt> make elses
prompt> make tool
prompt> make tool-LDOS
```

5.2 実行時エラー : 「XML parsing Error」

実行時エラーとなり標準出力に「XML parsing Error」と出る場合、入力用 XML ファイルが XML の文法を満たしていません (例えば、タグが閉じていない)。多くの場合、もう少し詳しいエラーメッセージがでていて、間違った箇所が分かります。XML 文法は、一般的な XML の解説文書をごらんください。また、汎用の XML 文法チェッカー (例えば xmlint) を使ってみると、間違いを発見しやすい場合があります。

xmlint チェッカーの使い方は、linux のコマンドラインならば、

```
prompt> xmlint -noout XML ファイル
```

で使用できます。

5.3 実行時エラー : 「alloc. error」

実行時エラーとなり標準出力に「alloc. error」と出る場合には、メモリ不足により配列の確保 (allocation) に失敗しています。

5.4 Intel fortran compiler 11 のバグについて

Intel compiler version 11.0 以降、version 11.1.056 未満のものは、コンパイラの不具合のために ELSES のコンパイルが途中で止まります。ユーザーから提供された、この問題に対するパッチをパッケージに同梱しています。該当するバージョンをお使いの方は `elses-ice-20090606.ReadMe` をご一読の上 `elses-ice-20090606.patch` を適用してみてください。

Intel compiler version 11.1.056 でも、以下のようなメッセージが出てコンパイルが途中でとまる場合があります。

```
elses-md-main.f90(26): internal error: Please visit
'http://www.intel.com/software/products/support' for assistance.
call get_elapse_wall_clock_time(elapse_time)
[ Aborting due to internal error. ]
```

これも、コンパイラの不具合であり、基本的には Intel の修正を待つ必要があります。しかし、そのまま (make clean などせず) 何度か make を繰り返すと make できる場合がありますので、よろしければお試しください。