

## Molpro 2021.3.1

### ウェブページ

<https://www.molpro.net/>

### バージョン

2021.3.1 (latest commit: 2021/11/23 17:31:27 +0100)

### ビルド環境

- GCC 9.3.1 (devtoolset-9)
- Intel Parallel Studio 2018 update4 (mkl and mpi)
- Global Arrays Toolkit 5.8

### ビルドに必要なファイル

- Molpro\_release.tar.gz (ダウンロードした Molpro\_release を tar.gz で固めたもの)
- ga-5.8.tar.gz
- work.patch
  - work directory のデフォルト値を変更
- patch-argos-bininput.F
- patch-cic-ltfFortranInt.h
- patch-common\_modules-common\_cconf1
  - 巨大 CI 計算用のパラメータ変更
- patch-mpp-ga\_impl\_select
  - 1 ノード時のスクラッチファイルのデフォルト設定の変更
- patch-common\_modules-common\_cftypes
- patch-util-iom
- patch-util-iow
  - システムのライブラリ側で対応できていない文字列用 findloc のための work-around
  - (CentOS 7 環境で devtoolset-9 を使って shared 設定でビルドしたために必要になった回避策です。)
- secure\_sprintf.patch
  - GA のビルドエラー回避
- token

### ビルド手順

```
#!/bin/sh

GA_VERSION=5.8
GA_ARCHIVE=/home/users/${USER}/Software/GlobalArrays/${GA_VERSION}/ga-${GA_VERSION}.zip

MOLPRO_VERSION=2021.3.1
MOLPRO_DIRNAME=Molpro_release
PARALLEL=12
BASEDIR=/home/users/${USER}/Software/Molpro/${MOLPRO_VERSION}
MOLPRO_TARBALL=${BASEDIR}/${MOLPRO_DIRNAME}.tar.gz

PATCH_SNPRINTF=${BASEDIR}/secure_sprintf.patch
PATCH0=${BASEDIR}/work.patch
PATCH1=${BASEDIR}/patch-argos-bininput.F
PATCH2=${BASEDIR}/patch-cic-ltfFortranInt.h
PATCH3=${BASEDIR}/patch-common_modules-common_cconf1
PATCHX=${BASEDIR}/patch-mpp-ga_impl_select

PATCH10=${BASEDIR}/patch-common_modules-common_cftypes
PATCH11=${BASEDIR}/patch-util-iom
PATCH12=${BASEDIR}/patch-util-iow

TOKEN=${BASEDIR}/token

WORKDIR=/work/users/${USER}
```

```
GA_INSTALLDIR=${WORKDIR}/ga-temporary
INSTALLDIR=/local/apl/lx/molpro${MOLPRO_VERSION}
```

```
#-----
```

```
umask 0022
ulimit -s unlimited
```

```
export LANG=
export LC_ALL=C
export OMP_NUM_THREADS=1
```

```
cd $WORKDIR
if [ -d ga-${GA_VERSION} ]; then
  mv ga-${GA_VERSION} ga_tmp
  rm -rf ga_tmp &
fi
if [ -d ga-temporary ]; then
  mv ga-temporary ga_tmp_tmp
  rm -rf ga_tmp_tmp &
fi
if [ -d ${MOLPRO_DIRNAME} ]; then
  mv ${MOLPRO_DIRNAME} molpro_tmp
  rm -rf molpro_tmp &
fi
```

```
module purge
module load scl/devtoolset-9
module load mk/2018.0.4
module load mpi/intelmpi/2018.4.274
```

```
unzip -q ${GA_ARCHIVE}
#tar xzf ${GA_ARCHIVE}
cd ga-${GA_VERSION}
```

```
export CFLAGS="-mpc80"
export FFLAGS="-mpc80"
export FCFLAGS="-mpc80"
export CXXFLAGS="-mpc80"
```

```
export F77=mpif90
export F90=mpif90
export FC=mpif90
export CC=mpicc
export CXX=mpicxx
export MPIF77=mpif90
export MPICC=mpicc
export MPICXX=mpicxx
export GA_FOPT="-O3"
export GA_COPT="-O3"
export GA_CXXOPT="-O3"
```

```
# --with-ofi failed...
```

```
./autogen.sh
cp -f $PATCH_SNPRINTF autotools/m4-1.4.17/
cd $WORKDIR/ga-${GA_VERSION}
./autogen.sh
./configure --enable-i8 \
  --with-mpi3 \
  --prefix=${GA_INSTALLDIR}
```

```
make -j ${PARALLEL}
make check
make install
cp config.log ${GA_INSTALLDIR}
```

```
cd ../
tar zxf ${MOLPRO_TARBALL}
cd ${MOLPRO_DIRNAME}

patch -p0 < ${PATCH0}
patch -p0 < ${PATCH1}
patch -p0 < ${PATCH2}
patch -p0 < ${PATCH3}
patch -p0 < ${PATCHX}

patch -p0 < ${PATCH10}
patch -p0 < ${PATCH11}
patch -p0 < ${PATCH12}

export PATH="${GA_INSTALLDIR}/bin:$PATH" # where ga-config exists

CPPFLAGS="-I${GA_INSTALLDIR}/include" \
LDLFLAGS="-L${GA_INSTALLDIR}/lib" \
./configure --prefix=${INSTALLDIR}

sed -i -e "s/^VERBOSE.*$/VERBOSE=/" CONFIG

make -j ${PARALLEL}
cp $TOKEN lib/.token

make tuning

MOLPRO_OPTIONS="" make quicktest
MOLPRO_OPTIONS=-n2 make test
```

## メモ

- (パッチファイルは /local/apl/lx/molpro2021.3.1/patches 以下にまとめて置いてあります)
- ga のテストが一個前回と同様に失敗しています
- molpro のテストはすべて通過しています
  - slater はテストを通過しなかったため、あらかじめ無効化しています
- このバージョンでは 1 ノードでの実行時にはローカルディスクを使う設定がデフォルトとなっていますが、当センターのシステムではローカルディスクは利用できないため、デフォルト設定を従来のものに変更しています。
  - 実行時に "--ga-impl disk" をつけることで本来のデフォルト設定(disk option)になります。
- インストール後、一部ファイルのパーミッション等を一部変更しています(上記手順には含まれていません)
- CentOS 7 + devtoolset-9 環境ではリンク時に findloc の文字列版のためにエラーとなります
  - 同等機能の関数を用意することで無理矢理回避しています
  - (static link ならば問題無くビルドできたかもしれません)