

Quantum Espresso 6.8 (HPE)

ウェブページ

<https://www.quantum-espresso.org/>

バージョン

6.8

ビルド環境

- Intel oneAPI Compiler Classic 2022.2.1
- Intel MKL 2022.2.1
- HPC-X 2.11 (Open MPI 4.1.4)
 - 実際のビルドには HPC-X 2.13.1 を使用。後で runtime のみ HPC-X 2.11 に切り替え。以下では HPC-X 2.11 を使ったとして記述

ビルドに必要なファイル

- qe-6.8-ReleasePack.tgz

ビルド手順

```
#!/bin/sh

QE_VERSION=6.8
BASEDIR=/home/users/${USER}/Software/QE/${QE_VERSION}
TARBALL=${BASEDIR}/qe-${QE_VERSION}-ReleasePack.tgz

INSTDIR=/apl/qe/6.8
PARALLEL=12

# -----
umask 0022

module -s purge
. ~/intel/oneapi/compiler/latest/env/vars.sh
module -s load mkl/2022.2.1
module -s load openmpi/4.1.4-hpcx/intel2022.2.1

export LANG=C
export LC_ALL=C
ulimit -s unlimited

cd ${INSTDIR}
if [ -d qe-${QE_VERSION} ]; then
  mv qe-${QE_VERSION} qe-erase
  rm -rf qe-erase &
fi

tar xzf ${TARBALL}
mv qe-${QE_VERSION}/* .
mv qe-${QE_VERSION}/[a-z]* .
rmdir qe-${QE_VERSION}

sed -i -e "s/wget -O/wget --trust-server-names -O/" \
  -e "s/curl -o/curl -L -o/" test-suite/check_pseudo.sh

export MPIF90=mpif90
export MPIFC=mpif90
export MPIF77=mpif90
export MPICC=mpicc
export MPICXX=mpicxx
```

```

FC=ifort F90=ifort F77=ifort CC=icc CXX=icpc \
FFLAGS="-O3 -assume byterecl -ip -g" \
./configure --enable-parallel --with-scalapack

# pwall(pw neb ph pp pwcond acfdt) cp ld1 tddftp hp xspectra gwI
echo "==== all ====="
make -j${PARALLEL} all

# QEHeat code: energy flux and charge current
echo "==== all_currents ====="
make -j${PARALLEL} all_currents

#for i in epw w90 couple d3q; do
for i in epw w90 couple; do
    echo "==== $i ====="
    make -j${PARALLEL} $i
done

for i in yambo; do
    echo "==== $i ====="
    make $i
done

cd test-suite
make run-tests-serial
make clean
make run-tests-parallel
cd ..

```

メモ

- HPC-X 2.13.1 を使うとマルチノード並列が動作せず。runtime ライブラリを HPC-X 2.11 に切り替えることで解消
- HPC-X 利用時に [LOG_CAT_MCAST] や [LOG_CAT_P2P] のメッセージが表示される場合がある。
 - `mpirun` に `-x HCOLL_ENABLE_MCAST=0` か `-mca coll_hcoll_enable 0` を追加することでエラーが表示されなくなる。
 - (前者の指定の方が限定的なので無難だろうか。)
 - メッセージが表示されても計算結果等には影響していないように見えている。