

xtb 6.7.0

ウェブページ

<https://xtb-docs.readthedocs.io/en/latest/>

<https://github.com/grimme-lab/xtb>

バージョン

6.7.0

ビルド環境

- gcc 10.3.1 (gcc-toolset/10)
- Ninja 1.11.1
- Python 3.10 (conda)

ビルドに必要なファイル

- 以下手順中で取得

ビルド手順

```
#!/bin/sh

VERSION=6.7.0
INSTALL_DIR=/apl/xtb/${VERSION}

WORKDIR=/gwork/users/$USER

XTB_GITHUB=https://github.com/grimme-lab/xtb.git
XTB_TAG=v${VERSION}

# -----

cd ${WORKDIR}
if [ -d ${VERSION} ]; then
  mv ${VERSION} ${VERSION}-remove
  rm -rf ${VERSION}-remove &
fi
git clone ${XTB_GITHUB} $VERSION
cd $VERSION
git checkout refs/tags/${XTB_TAG}

export OMP_NUM_THREADS=8
./apl/conda/20240305/conda_init.sh
```

```
module -s purge
module -s load gcc-toolset/10
module -s load ninja/1.11.1

# install meson
pip3 install --user meson==0.64.1
export PATH=~/.local/bin:$PATH

meson setup build \
    --buildtype release \
    --optimization 2 \
    -Dprefix=${INSTALL_DIR} \
    -Dlapack="openblas" \
    -Dopenmp="true"

ninja -C build test
ninja -C build install
```

テスト

以下の一つのテストで失敗。コンパイラのバージョンを変えたり MKL を使った場合でも成功しない。

- 117/148 xtb:unit / iff FAIL 0.70s exit status 2

メモ

- ORCA での利用を想定
- MKL を使った場合でも同様にビルド可能。今回は依存関係のシンプルな openblas を採用。
- meson はビルド時のみに必要なものであるため、システム側では導入せず。
 - バージョン 1.x 系については未検証
- 新しい GCC (11.x 以降)ではビルドに失敗したり、テストの失敗が多くなるため gcc10 を利用。
- GPU については未検討。