

CREST 3.0.1

ウェブページ

<https://github.com/crest-lab/crest>

<https://crest-lab.github.io/crest-docs/>

バージョン

3.0.1

ビルド環境

- Intel oneAPI Compiler 2024.1.0 (icx and ifort)
- MKL 2024.1

必要なファイル

(下記手順中でダウンロード)

ビルド手順

```
#!/bin/sh

VERSION=3.0.1
INSTALL_PREFIX=/apl/crest/3.0.1

CREST_GITHUB=https://github.com/crest-lab/crest.git

WORKDIR=/gwork/users/${USER}

PARALLEL=24
export LANG=C

#-----
umask 0022

module -s purge

. ~/intel/oneapi/compiler/latest/env/vars.sh # 2024.1.0

module -s load mkl/2024.1

cd ${WORKDIR}
if [ -d crest ]; then
  mv crest crest_erase
  rm -rf crest_erase &
```

fi

```
export FC=ifort
export CC=icx

git clone ${CREST_GITHUB} -b v${VERSION}
cd crest

sed -i -e "s/-align array64byte//" config/CMakeLists.txt

mkdir build && cd build
cmake .. -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX}

make -j${PARALLEL}
make test
make install

cd ../
cp -r examples ${INSTALL_PREFIX}
```

テスト

すべてパス

メモ

- MKL 2023.1.0 を使った場合(static, dynamic)、Intel MKL ERROR: Parameter 6 was incorrect on entry to DLASWP. のメッセージが滝のように出力されるケースがある
 - <https://github.com/crest-lab/crest/issues/285> にあがっているインプットで --alpb water を追加して実行し確認。
 - MKL 2023.2.0, 2024.1.0 を使った場合は今のところこの MKL ERROR は発生していない。
 - 配布されているバイナリ版(3.0.1, continuous release (2024/5/7 付け))でもこの問題が発生しているように見える？
- Intel コンパイラで CMake で普通にビルドした場合、QCG のサンプル計算(https://crest-lab.github.io/crest-docs/page/examples/qcg/example_2.html)の最後の方でエラー終了することを確認
 - <https://github.com/crest-lab/crest/issues/278> の issue 中のコメントで指摘されている内容と同じに見える
 - Intel コンパイラの場合に自動で追加される -align array64byte が原因のようで、上記手順のようにこれを外すと少なくともエラー終了は回避できる。meson 版ではこのオプションは追加されないと思われる。
- meson でのビルドでは intel 2024.1.0 を使うことができていない。2023.1.0 ではビルドできることを確認。
 - 2023.1.0 では export FC="ifort -diag-disable=10448" のように指定する必要があった(環境依存かもしれない)