

Molpro 2025.3.0

ウェブページ

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

バージョン

2025.3.0

ビルド環境

- GCC 13.3.1 (gcc-toolset-13)
- Intel MPI 2021.14.1
- Eigen 3.4.0
- OpenBLAS 0.3.29 (lp64)

ビルドに必要なファイル

- molpro-2025.3.0.tar.gz
- ga-5.9.tar.gz
- hdf5-1.14.6.tar.gz
- token

パッチファイル

- work.patch
- patch-argos-bininput.F
- patch-cic-ltfFortranInt.h
- patch-common_modules-common_cconf
 - 大きな CI 計算のためのパラメータの変更と、一時ディレクトリのデフォルトパスの変更をしています。
 - パッチファイル本体は /apl/molpro/2025.3.0/patches 以下に置いています。

ビルド手順

Global Arrays 5.9

```
#!/bin/sh

GA_VERSION=5.9
GA_TARBALL=/home/users/${USER}/Software/GlobalArrays/${GA_VERSION}/ga-${GA_VERSION}.tar.gz

WORKDIR=/gwork/users/${USER}
INSTALL_DIR=/apl/molpro/2025.3.0/ga-5.9

PARALLEL=12

#-----
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 ${INSTALL_DIR} ]; then
  rm -rf ${INSTALL_DIR}
fi
```

```

module -s purge
module -s load gcc-toolset/13
module -s load intelmpi/2021.14.1

tar xf ${GA_TARBALL}
cd ga-${GA_VERSION}

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

./autogen.sh
CC=mpicc CXX=mpicxx FC=mpif90 ./configure \
--prefix=${INSTALL_DIR} \
--with-mpi-pr \
--enable-i8 \
--with-blas=no \
--with-lapack=no \
--with-scalapack=no \
--disable-f77

make -j${PARALLEL}
make install
make check

```

HDF5 1.14.6

```

#!/bin/sh

MOLPRO_VERSION=2025.3.0
VERSION=1.14.6
INSTALL_PREFIX=/apl/molpro/2025.3.0/hdf5-${VERSION}

BASEDIR=/home/users/${USER}/Software/HDF5/${VERSION}
TARBALL=${BASEDIR}/hdf5-${VERSION}.tar.gz
WORKDIR=/gwork/users/${USER}

PARALLEL=16
export LANG=C

#-----
umask 0022

module -s purge
module -s load gcc-toolset/13
module -s load intelmpi/2021.14.1

cd ${WORKDIR}
if [ -d hdf5-${VERSION} ]; then
  mv hdf5-${VERSION} hdf5-erase
  rm -rf hdf5-erase &
fi

tar zxf ${TARBALL}
cd hdf5-${VERSION}
mkdir build && cd build
cmake .. \
  -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \
  -DHDF5_BUILD_FORTRAN=ON \
  -DHDF5_ENABLE_PARALLEL=ON \
  -DMPIEXEC_MAX_NUMPROCS=${PARALLEL}
make -j${PARALLEL}
make install
make test

```

Molpro 2025.3.0

```
#!/bin/sh
```

```
MOLPRO_VERSION=2025.3.0
```

```
MOLPRO_DIRNAME=molpro- $\{MOLPRO\_VERSION\}$ 
```

```
BASEDIR=/home/users/ $\{USER\}$ /Software/Molpro/ $\{MOLPRO\_VERSION\}$ 
```

```
MOLPRO_TARBALL= $\{BASEDIR\}$ / $\{MOLPRO\_DIRNAME\}$ .tar.gz
```

```
PATCH0= $\{BASEDIR\}$ /work.patch
```

```
PATCH1= $\{BASEDIR\}$ /patch-argos-binput.F
```

```
PATCH2= $\{BASEDIR\}$ /patch-cic-ItfFortranInt.h
```

```
PATCH3= $\{BASEDIR\}$ /patch-common_modules-common_cconf
```

```
TOKEN= $\{BASEDIR\}$ /token
```

```
WORKDIR=/gwork/users/ $\{USER\}$ 
```

```
INSTALLDIR=/apl/molpro/ $\{MOLPRO\_VERSION\}$ 
```

```
GA_ROOT= $\{INSTALLDIR\}$ /ga-5.9
```

```
HDF5_ROOT= $\{INSTALLDIR\}$ /hdf5-1.14.6
```

```
PARALLEL=12
```

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

```
umask 0022
```

```
ulimit -s unlimited
```

```
export LANG=
```

```
export LC_ALL=C
```

```
export OMP_NUM_THREADS=2
```

```
cd $WORKDIR
```

```
if [ -d  $\{MOLPRO\_DIRNAME\}$  ]; then
```

```
mv  $\{MOLPRO\_DIRNAME\}$  molpro_tmp
```

```
rm -rf molpro_tmp &
```

```
fi
```

```
module -s purge
```

```
module -s load gcc-toolset/13
```

```
module -s load intelmpi/2021.14.1
```

```
module -s load eigen/3.4.0
```

```
module -s load openblas/0.3.29-lp64
```

```
cd  $\{WORKDIR\}$ 
```

```
tar xf  $\{MOLPRO\_TARBALL\}$ 
```

```
cd  $\{MOLPRO\_DIRNAME\}$ 
```

```
patch -p0 <  $\{PATCH0\}$ 
```

```
patch -p0 <  $\{PATCH1\}$ 
```

```
patch -p0 <  $\{PATCH2\}$ 
```

```
patch -p0 <  $\{PATCH3\}$ 
```

```
export CFLAGS="-mpc80"
```

```
export FFLAGS="-mpc80"
```

```
export FCFLAGS="-mpc80"
```

```
export CXXFLAGS="-mpc80"
```

```
export CPPFLAGS="-I $\{GA\_ROOT\}$ /include -I $\{HDF5\_ROOT\}$ /include"
```

```
export LDFLAGS="-L $\{GA\_ROOT\}$ /lib -L $\{HDF5\_ROOT\}$ /lib"
```

```
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 PATH="${GA_ROOT}/bin:${PATH}" # where ga-config resides
export PATH="${HDF5_ROOT}/bin:${PATH}" # where h5pcc resides
export LD_LIBRARY_PATH="${HDF5_ROOT}/lib:${LD_LIBRARY_PATH}"
```

```
./configure --prefix=${INSTALLDIR} \
    --enable-aims \
    --enable-slater \
    --enable-openmp \
    --with-lapack="-L/apl/openblas/0.3.29/lp64/lib -lopenblas"
```

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

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

```
cp -a testjobs ${INSTALLDIR}/molpro*
cp -a bench ${INSTALLDIR}/molpro*
```

テスト

GA, Molpro のテストはすべて通過。

HDF5 の MPI_TEST_H5_f90_ph5_f90_filtered_writes_no_sel で失敗。
テストログは /apl/molpro/2025.3.0/hdf5-1.14.6/testlog にあります。

メモ

- OpenBLAS を使った方が速度が出るケースがあるため、今回は MKL のかわりに OpenBLAS を採用
- GCC14 + GA-5.9.2 + Intel MPI 2021.16.1 の環境では MPI 並列数を増やした時(64 で確認)にフリーズする場合がある。
 - 原因は不明。実行開始直後の GA 初期化の段階でデッドロックに陥ったように見えている。
 - 発生条件については詳細には確定できていない。
 - 今回最終的に採用した GCC13 + GA-5.9 + Intel MPI 2021.14.1 の条件では、確認した範囲ではこのフリーズは発生していない。
- 今回より並列対応の HDF5 が必須となっている模様。
- Molpro を cmake でビルドすることには失敗。
 - GMB については cmake を使わないと有効にできないようであるため、今回はスキップ
- GA についても cmake が利用可能なものの、cmake を使うと ga-config が導入されなかったため今回はスキップ。
 - (GA-5.9.2 での検証結果。GA-5.9 では未検証)