

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-ItfFortranInt.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

```

```

#!/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=${BASEDIR}/patch-cic-ltfFortranInt.h
PATCH3=${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 が導入されなかつ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)