

## Quantum ESPRESSO 6.3 for LX

### ウェブページ

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

### バージョン

6.3

### ビルド環境

▶ Intel Parallel Studio 2017update4

### ビルドに必要なファイル

▶ q-e-qe-6.3.tar.gz

▶ want-latest.tar.gz

▶ (本インストール時に相手方のサーバから取得できなかったため。通常はスクリプトによる自動取得で問題ありません。)

### ビルド手順

```
#!/bin/sh
VERSION=6.3
BASEDIR=/home/users/${USER}/Software/QE/${VERSION}
TARBALL=${BASEDIR}/q-e-qe-${VERSION}.tar.gz
INSTDIR=/local/apl/lx/espresso63
#LIBXC=${INSTDIR}/libxc-4.2.3
WANT_LATEST=${BASEDIR}/want-latest.tar.gz
PARALLEL=12

# -----
umask 0022

module purge
module load intel_parallelstudio/2017update4

export LANG=
export LC_ALL=C
# from $MKLRROOT/tools/mkl_link_tool
MKL_SCALAPACK_LIBS="-L${MKLRROOT}/lib/intel64 -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_intelmpi_lp64 -
lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -lpthread -lm -ld"

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

tar xzf ${TARBALL}
mv q-e-qe-${VERSION}/" .
mv q-e-qe-${VERSION}/.[a-z]" .
rmdir q-e-qe-${VERSION}

export MPIF90=mpiifort
export MPIFC=mpiifort
export MPIF77=mpiifort
export MPICC=mpiicc
export MPICXX=mpiicpc

FC=ifort F90=ifort F77=ifort CC=icc \
FFLAGS="-O2 -assume byterecl -ip -g" BLAS_LIBS="-mkl=sequential" \
LAPACK_LIBS="-mkl=sequential" FFT_LIBS="-mkl=sequential" \
SCALAPACK_LIBS=${MKL_SCALAPACK_LIBS} LDFLAGS="-static-intel" \
./configure --with-scalapack

# MKL instead of FFTW and add libxc
#LIBXC_ESC="echo ${LIBXC} | sed -e 's/\\\\\\\\\\\\\\\\/g'"
#sed -i -e "s/D__FFTW3/D__DFT1 -D__LIBXC/" \
# -e "/^LD_LIBS/s/$/ -L${LIBXC_ESC}/lib -lxcf90 -lxc/" \
# -e "/^FLAGS/s/$/ -I${LIBXC_ESC}/include/" \
# make.inc
sed -i -e "s/D__FFTW3/D__DFT1/" make.inc
cp ${WANT_LATEST} archive

echo "==== plumed===="
make -j${PARALLEL} plumed
for i in pw cp neb ph pp pwcond ld1 xspectra upf tddft; do
  echo "==== $i===="
  make -j${PARALLEL} $i
done
```

```
for i in want gipaw yambo gwl; do
  echo "==== $i ====="
  make $i
done
# i couldn't understand the situation of west and d3q
WANNIER90_VER=2.1.0
cd install; make -f plugins_makefile uncompress-w90; cd ../
PWD_ESC=$(pwd | sed -e 's/\//\\/'g)
sed -i -e "/include/s/.*/include ${PWD_ESC}\wannier90-${WANNIER90_VER}\make.inc/" wannier90-
${WANNIER90_VER}/src/Makefile.2
for i in epw w90 SternheimerGW couple; do
  echo "==== $i ====="
  make -j$(PARALLEL) $i
done

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

## テスト

全てパス。test-suite/userconfig で定義されるtoleranceのデフォルト値が変更されたことが主な原因のようです。

## メモ

- ▶ 最適化オプションで -O3 -xHost を有効にするとむしろ遅くなる(公式ベンチマーク small-benchmarks/test\_4 での検証)
- ▶ OpenMPは有効にしています
- ▶ libxc(4.2.3で試行)を用いると小さくない数値エラーを出すテストが複数あったため今回は回避
- ▶ Westは指定のバージョンのダウンロードができず、他バージョンを使った場合もコードが対応していないように見えたため断念
- ▶ d3q は状況が良くわからないため回避