

## Molpro 2019.2.3 for LX

### ウェブページ

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

### バージョン

2019.2.3

### ビルド環境

- Intel Parallel Studio 2017 update8
  - ifort 17.0.8
  - icc 17.0.8
  - mkl 2017.0.4
  - impi 2017.0.4
- Global Arrays Toolkit 5.7

### ビルドに必要なファイル

- Molpro\_release.tar.gz (ダウンロードした Molpro\_release を tar.gz で固めたもの)
- ga-5.7.tar.gz
- work.patch

```
--- utilities/molpro.template.orig 2018-12-10 16:29:50.000000000 +0900
+++ utilities/molpro.template 2018-12-10 16:39:13.000000000 +0900
@@ -446,6 +446,12 @@
 shift
 done

+MOLPRO_OPTIONS=""
+-d/work/users/$USER/ \
+-l/work/users/$USER/ \
+-W/work/users/$USER/wfu \
+${MOLPRO_OPTIONS}
+
+if test "x${option_d}" = x ; then
+# Now we have to replicate everything inside molpro.exe to try and get the same value of -d that it would
option_d="/tmp"
```

- token

### ビルド手順

```
#!/bin/sh

GA_VERSION=5.7
MOLPRO_VERSION=2019.2.3
MOLPRO_DIRNAME=Molpro_release
PARALLEL=12
BASEDIR=/home/users/${USER}/Software/Molpro/2019.2.3
MOLPRO_TARBALL=${BASEDIR}/${MOLPRO_DIRNAME}.tar.gz
PATCH=${BASEDIR}/work.patch
TOKEN=${BASEDIR}/token

WORKDIR=/work/users/${USER}
GA_INSTALLDIR=${WORKDIR}/ga-temporary
INSTALLDIR=/local/apl/lx/molpro${MOLPRO_VERSION}

#-----
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 ga-temporary ]; then
  mv ga-temporary ga_tmp_tmp
  rm -rf ga_tmp_tmp &
fi
if [ -d ${MOLPRO_DIRNAME} ]; then
  mv ${MOLPRO_DIRNAME} molpro_tmp
  rm -rf molpro_tmp &
fi

module purge
module load scl/devtoolset-3
module load intel_parallelstudio/2017update8

tar xzf /home/users/${USER}/Software/GlobalArrays/${GA_VERSION}/ga-${GA_VERSION}.tar.gz
cd ga-${GA_VERSION}

export F77=mpiifort
export F90=mpiifort
export FC=mpiifort
export CC=mpiicc
export CXX=mpiicpc
export MPIF77=mpiifort
export MPICC=mpiicc
export MPICXX=mpiicpc
export GA_FOPT="-O3 -ip -w -xHost"
export GA_COPT="-O3 -ip -w -xHost"
export GA_CXXOPT="-O3 -ip -w -xHost"

./configure --with-blas8 \
  --enable-i8 \
  --prefix=${GA_INSTALLDIR}

make -j ${PARALLEL}
make check
make install
cp config.log ${GA_INSTALLDIR}

cd ../
tar xzf ${MOLPRO_TARBALL}
cd ${MOLPRO_DIRNAME}
patch -p0 < ${PATCH}

export PATH="${GA_INSTALLDIR}/bin:$PATH" # where ga-config exists

CPPFLAGS="-I${GA_INSTALLDIR}/include" \
LDLDFLAGS="-L${GA_INSTALLDIR}/lib" \
./configure --prefix=${INSTALLDIR} \
  --enable-integer8 \
  --enable-slater

LD_LIBRARY_PATH_ESC=`echo $LD_LIBRARY_PATH | sed -e 's/\/\///g'`
sed -i -e "s/^VERBOSE.*$/VERBOSE=/" \
  -e "s/^LD_ENV=.*$/LD_ENV=$LD_LIBRARY_PATH_ESC/" CONFIG
unset LD_LIBRARY_PATH_ESC

make -j ${PARALLEL}

```

```
cp $TOKEN lib/.token

make tuning

MOLPRO_OPTIONS=-n2 make quicktest
MOLPRO_OPTIONS=-n2 make test

# failed tests: loc_eom3.test

#make install # do it manually
```

最後の make install だけはスクリプトの処理が終了後、手動実行しています。

## テスト

- loc\_eom3: 数値エラー。以前のバージョンと同様
- PNO\_RCCSD/PNO\_UCCSD (マニュアルには記述が見つからない method)を使っているテスト全て
  - form\_pnoccsd, gly2\_pnorccsd, gly2\_pnorccsd\_multinode, h2odim\_pno\_singdom, h2odim\_pnorccsd

## メモ

- 2019.1.2 導入時に手違いで導入できていなかったスクラッチや波動関数の出力先を /work/users にするためのパッチ (work.patch)ですが、今回は正しく適用できています。
- 距離の "ANGS" は 2019.1.2 では使えませんでした、このバージョンでは使えるようです。
- intel2019 でのビルドは可能でしたが、速度面でのメリットが見られず、テストもいくつか追加で失敗したため、採用を見送りしました。
  - (Intel MPI 2019 では GA のテストでエラーが出たり、そもそも挙動が怪しかったりしたので intel2019 + mkl2019 + impi2018 という変則ビルドでテストしています)
- intel2018u4 では GA のビルドはできたものの、molpro のビルド中にエラー終了しました。