

Quantum Espresso 6.7.0

ウェブページ

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

バージョン

6.7.0

ビルド環境

- Intel Parallel Studio 2018 update 4

ビルドに必要なファイル

- q-e-qe-6.7.0.tar.gz

ビルド手順

```
#!/bin/sh

VERSION=6.7.0
BASEDIR=/home/users/${USER}/Software/QE/${VERSION}
TARBALL=${BASEDIR}/q-e-qe-${VERSION}.tar.gz

INSTDIR=/local/apl/lx/espresso670
PARALLEL=12

# -----
umask 0022

module purge
module load intel_parallelstudio/2018update4

export LANG=C
export LC_ALL=C
ulimit -s unlimited

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 zxf ${TARBALL}
mv q-e-qe-${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 CXX=icpc \
FFLAGS="-O3 -assume byterecl -ip -g" \
./configure --enable-parallel --with-scalapack=intel

# pwall(pw neb ph pp pwcond acfdt) cp ld1 tddfpt hp xspectra gw1
echo "==== all ===="
make -j${PARALLEL} all

for i in epw w90 couple; do
```

```
echo "==== $i ====="
make -j${PARALLEL} $i
done

for i in yambo; do
echo "==== $i ====="
make $i
done

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

メモ

- テストは全て通過
- Intel 2020u2 は yambo (内の fftw)のコンパイルに失敗。(既知のエラー)
 - <https://community.intel.com/t5/Intel-C-Compiler/icc-and-fftw-and-INT-MAX/m-p/1219856?profile.language=en>
- Intel 2019u5 や 2019u5(コンパイラ, MKL) + 2020u2(MPIのみ) はテストを正常に通過しなかったため回避
- GCC 9 よりも Intel18 の方が少し速度が出るようです(Au surf の系で検証)。
- plumed は obsolete 扱いのようで、Makefile からも消えていたので無し。
- gipaw は現時点ではこのバージョンに対応していない?