

Siesta 5.0.1 MPI (Open MPI)

ウェブページ

<https://gitlab.com/siesta-project/siesta>

バージョン

5.0.1 (+ELPA 2024.03.001, ELSI 2.9.1, NetCDF 4.9.2, NetCDF Fortran 4.6.1, libxc 6.2.2)

ビルド環境

- GCC 13.1.1 (gcc-toolset-13)
- Intel MKL 2024.1
- Open MPI 4.1.6
- autoconf 2.72 (for ELPA)
- Python 3.9
 - ruamel.yaml (pip3.9 install ruamel.yaml --user)
- (5.0.0 向けに用意した netcdf, libxc, elpa, pexsi を利用)

ビルドに必要なファイル

- siesta-5.0.1.tar.gz
- wannier90-3.1.0.tar.gz
- (5.0.0 向けに用意した netcdf, libxc, elpa, pexsi を利用)

ビルド手順

```
#!/bin/sh

SIESTA_VERSION=5.0.1
INSTDIR=/apl/siesta/5.0.1

WORKDIR=/gwork/users/${USER}
BASEDIR=/home/users/${USER}/Software/Siesta/${SIESTA_VERSION}
TARBALL=${BASEDIR}/siesta-${SIESTA_VERSION}.tar.gz

WANNIER90_VERSION=3.1.0
BASEDIR_WANNIER90=/home/users/${USER}/Software/wannier90/${WANNIER90_VERSION}
TARBALL_WANNIER90=${BASEDIR_WANNIER90}/wannier90-${WANNIER90_VERSION}.tar.gz

PARALLEL=12

#-----
umask 0022
ulimit -s unlimited

module -s purge
module -s load gcc-toolset/13
module -s load mkl/2024.1
module -s load openmpi/4.1.6/gcc13

export LANG=C
export LC_ALL=C
export OMP_NUM_THREADS=1

# siesta

cd ${WORKDIR}
if [ -d siesta-${SIESTA_VERSION} ]; then
  mv siesta-${SIESTA_VERSION} siesta-erase
  rm -rf siesta-erase
fi

tar zxf ${TARBALL}
```

