

Siesta 5.0.1 MPI (Intel 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 11.2.1 (gcc-toolset-11)
- Intel MKL 2024.1
- Intel MPI 2021.11
- 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-impi

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/11
module -s load mkl/2024.1
module -s load intelmpi/2021.11

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}
```

```
cd siesta-${SIESTA_VERSION}

unset CC
unset FC
export WANNIER90_PACKAGE=${TARBALL_WANNIER90}

export LD_LIBRARY_PATH="${INSTDIR}/elpa/lib:${INSTDIR}/exts/lib:${LD_LIBRARY_PATH}"

mkdir build && cd build
cmake .. \
  -DCMAKE_INSTALL_PREFIX="${INSTDIR}" \
  -DCMAKE_PREFIX_PATH="${INSTDIR}/elpa:${INSTDIR}/exts" \
  -DCMAKE_C_COMPILER=mpicc \
  -DCMAKE_Fortran_COMPILER=mpif90 \
  -DPython3_EXECUTABLE=/usr/bin/python3.9 \
  -DSIESTA_WITH_MPI=ON \
  -DNetCDF_ROOT="${INSTDIR}/exts" \
  -DLAPACK_LIBRARY="-m64 -L${MKLROOT}/lib -Wl,--no-as-needed -lmkl_gf_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -lpthread -lm -ldl" \
  -DBLAS_LIBRARY="-m64 -L${MKLROOT}/lib -Wl,--no-as-needed -lmkl_gf_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -lpthread -lm -ldl" \
  -DSCALAPACK_LIBRARY="-lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_gf_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -lmkl_blacs_intelmpi_lp64 -lpthread -lm -ldl" \
  -DSIESTA_WITH_WANNIER90=ON \
  -DSIESTA_WITH_ELPA=ON \
  -DSIESTA_WITH_PEXSI=ON

make -j ${PARALLEL}
SIESTA_TESTS_VERIFY=1 ctest
make install

cd ../
cp -r Examples ${INSTDIR}
```

テスト

5.0.0 の時と同様の結果となっています。ログのコピーが `/apl/siesta/5.0.1-impi/test_results` にあります。

メモ

- 5.0.0 の情報を参照ください。
 - 導入手順はほぼ同一で、唯一 `cmake` 前に `LD_LIBRARY_PATH` の設定を追加しています。
 - `NetCDF`, `libxc`, `ELPA`, `PEXSI` については 5.0.0 のものをそのまま使っています。(インストールディレクトリ直下に `exts`, `elpa` というシンボリックリンクを事前に作成しています。)
- (出力では Version : unreleased 3852ac6d4 (2024-06-25) と表記されますが、実際のバージョンは 5.0.1 です。)
- (2025/2/13) `export I_MPI_HYDRA_TOPOLIB=ipl` で並列時の問題が解消することを確認。module ファイルを更新しました。