

本マニュアルの目的

本マニュアルでは、単一ユーザが独占的に Linux サーバ (CentOS 6.6) を使用して Quantum ESPRESSO のジョブを並列実行するための環境構築方法と Winmostar のリモートジョブ投入機能から Linux サーバへジョブを投入する方法を示しています。計算環境は全てユーザのホームディレクトリ配下で行うことを想定しています。複数ユーザが使用する共用サーバの環境を構築する方法、複数ノードを利用する環境を構築する方法、GPU を用いる環境を構築する方法などは本マニュアルに含まれませんので、別途お問い合わせください。

なお、本マニュアルでは Linux サーバ上でジョブスケジューラ TORQUE が使用可能であると仮定しています¹。また以下の命名としています。

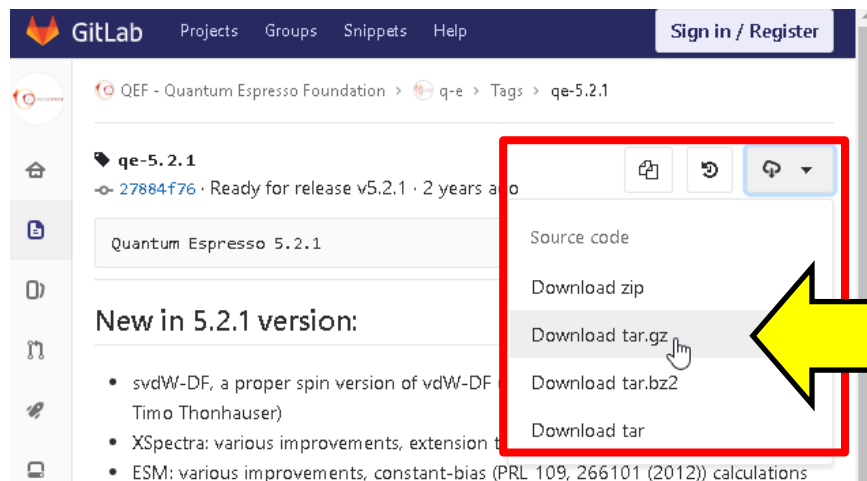
サーバホスト名 : remote_server

ユーザ名 : winmostar_user

I. インストール準備

- ① 以下のサイトにアクセスし、右上のダウンロードボタン (雲の形) → **Download tar.gz** をクリックし、q-e-qe-5.2.1.tar.gz をダウンロードする。

<https://gitlab.com/QEF/q-e/tags/qe-5.2.1>



- ② q-e-qe-5.2.1.tar.gz を ftp など Linux サーバに転送する。ここではホームディレクトリ直下の `~/q-e-qe-5.2.1.tar.gz` に置いたと仮定する。

- ③ Linux サーバにログインし、make, gfortran が利用できることを確認する。

```
$ which make
```

```
$ which gfortran
```

利用できない場合は yum などのパッケージ管理ソフトを用いて導入を行う。

例として、以下に CentOS 6.6 (x86_64) への導入に必要なコマンドを示す。

```
# yum install gcc gcc-fortran gcc-c++
```

¹ <http://www.adaptivecomputing.com/products/open-source/torque/>を参照。管理者権限で yum などを用いて導入する。あるいは、X-Ability のサイト内 http://winmostar.com/jp/gmx4wm_jp.html (4.5. Torque) 参照。

II. MPICH のインストール

Quantum ESPRESSO を並列実行しない場合は「III. Quantum ESPRESSO のビルド」に進む。

```
# yum install mpich-devel
$ export PATH=/usr/lib64/mpich/bin/mpiexec:$PATH
```

III. Quantum ESPRESSO のビルド

- ① 圧縮ファイルを解凍する。

```
$ cd
$ tar xzvf q-e-qe-5.2.1.tar.gz
```

- ② Quantum ESPRESSO をビルドする。

ここでは、configure のオプションに `--with-internal-blas` と `--with-internal-lapack` を指定しているが、環境に応じてこの部分は変更して構わない。

(MPI をインストールした場合)

```
$ cd q-e-qe-5.2.1
$ ./configure --with-internal-blas --with-internal-lapack
※ ./configure に成功すると [configure: success] というメッセージが出現する。
$ make all
※ make に成功すると、bin ディレクトリ以下に pw.x などのバイナリが出力される。
※ Makefile の依存関係が完全に記述されていないため、make コマンドの並列処理オプション (-j) は決して使用しない。
```

(MPI をインストールしなかった場合)

```
$ cd q-e-qe-5.2.1
$ ./configure --enable-parallel=no --with-internal-blas --with-internal-lapack
※ ./configure に成功すると [configure: success] というメッセージが出現する。
$ make all
※ make に成功すると、bin ディレクトリ以下に pw.x などのバイナリが出力される。
※ Makefile の依存関係が完全に記述されていないため、make コマンドの並列処理オプション (-j) は決して使用しない。
```

- ③ ~/.bashrc に、q-e-qe-5.2.1/bin ディレクトリを PATH へ追加する設定を追記する。

```
$ export PATH=${HOME}/q-e-qe-5.2.1/bin:$PATH
```

- ④ Linux サーバにログインし直し、以下のコマンドを実行して

「(ホームディレクトリ) /q-e-qe-5.2.1/bin/pw.x」と表示されることを確認する。

```
$ which pw.x
```

IV. Winmostar から Quantum ESPRESSO をリモートジョブ実行する。

- ① [Winmostar Quantum ESPRESSO 基礎編チュートリアル](#)の内容に従い操作を進めるが、キーワード設定ウインドウで **Run** ボタンを押さずに **OK** ボタンを押す。
- ② その後、[ユーザマニュアルのリモートジョブの実行手順](#)に従って操作を行い、**Get All Files** ボタンを押してファイルを取得するところまで実行する。
- ③ 再び [Winmostar Quantum ESPRESSO 基礎編チュートリアル](#)の内容に戻り、ローカルジョブの時と全く同じ操作方で結果解析を行う。

以上