

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 7.8) 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、本書の手順は Linux サーバがインターネットに接続していることを前提としています。

1. コンパイラの確認・インストール

- ① Linux サーバにログインし、以下のコマンドで make がインストールされているか確認する。

```
$ which make
```

インストールされていない場合は yum などのパッケージ管理ソフトウェアを用いてインストールする。CentOS 7.8 で yum を使う場合は以下のように実行する。

```
$ sudo yum install make
```

- ② 以下のコマンドで gfortran のバージョンが 4.9 以上であるか確認する。

```
$ gfortran --version
```

gcc がインストールされていない、あるいは gfortran のバージョンが 4.8 以前である場合は、yum などのパッケージ管理ソフトウェアを用いて gfortran 4.9 以降をインストールする。CentOS 7.8 で yum を使う場合は以下のように実行する。

```
$ sudo yum install centos-release-scl
```

```
$ sudo yum install devtoolset-7
```

上記の手順でインストールした場合は、現在のシェルで Quantum ESPRESSO をビルドするために、以下のコマンドを実行して gfortran を有効にする。なお、~/.bashrc にこのコマンドを追記すると Linux サーバにログインし直すたびにこのコマンドの実行が不要となるが、同サーバ上における他のソフトウェアとの設定の調整が必要となる。本書では ~/.bashrc への追記は必須ではない。

```
$ scl enable devtoolset-7 bash
```

- ③ 以下のコマンドで m4 がインストールされているか確認する。

```
$ which m4
```

インストールされていない場合は yum などのパッケージ管理ソフトウェアを用いてインストールする。CentOS 7.8 で yum を使う場合は以下のように実行する。

```
$ sudo yum install m4
```

- ④ 以下のコマンドで git がインストールされているか確認する。

```
$ which git
```

インストールされていない場合は yum などのパッケージ管理ソフトウェアを用いてインストールする。CentOS 7.8 で yum を使う場合は以下のように実行する。

```
$ sudo yum install git
```

- ⑤ 以下のコマンドでPython3 がインストールされているか確認する。

```
$ which python3
```

インストールされていない場合は yum などのパッケージ管理ソフトウェアを用いてインストールする。CentOS 7.8 で yum を使う場合は以下のように実行する。

```
$ sudo yum install python3
```

2. MPI のインストール

yum などのパッケージ管理ソフトウェアにより MPICH をインストールしても構わないが、問題が起こる場合は本書の手順に従いインストールする。

- ① ウェブブラウザで <https://www.mpich.org/static/downloads/3.4.2/mpich-3.4.2.tar.gz> をダウンロードする。

- ② 保存した mpich-3.4.2.tar.gz を SCP, 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に置いたと仮定する。

- ③ Linux サーバにログインし、圧縮ファイルを解凍する。

```
$ cd
```

```
$ tar xzvf mpich-3.4.2.tar.gz
```

- ④ 以下の手順に従って MPICH 環境のセットアップを行う。詳しくは Installers' Guide

(<http://www.mpich.org/static/downloads/3.4.2/mpich-3.4.2-installguide.pdf>) 参照のこと。

```
$ mkdir -p ~/mpich-install-3.4.2
```

```
$ mkdir -p ~/tmp/mpich-3.4.2
```

```
$ cd ~/tmp/mpich-3.4.2
```

```
$ ~/mpich-3.4.2/configure --prefix=${HOME}/mpich-install-3.4.2 --with-device=ch3
```

```
$ make
```

```
$ make install
```

- ⑤ 現在のシェルで Quantum ESPRESSO をビルドするために、以下のコマンドを実行して MPICH を有効にする。なお、~/.bashrc にこのコマンドを追記すると Linux サーバにログインし直すたびにこのコマンドの実行が必要となるが、同サーバ上における他のソフトウェアとの設定の調整が必要となる。本書では ~/.bashrc への追記は必須ではない。

```
$ export PATH=${HOME}/mpich-install-3.4.2/bin:$PATH
```

- ⑥ 以下のコマンドを実行してインストールした mpirun のパスが表示されることを確認する。

```
$ which mpirun
```

- ⑦ MPI の動作確認のため、以下のコマンドを実行して現在のディレクトリ名が 2 つ表示されることを確認する。

```
$ mpirun -n 2 pwd
```

3. Quantum ESPRESSO のインストール

- ① 以下のサイトにアクセスし、ユーザ情報の登録を行う。

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

register

Would you mind telling something about yourself?

In order to keep providing the best open-source quantum simulation software available, to meet user expectations and the requests of our funding agencies, we need to know a little bit about you for our files.

The QUANTUM ESPRESSO Foundation is committed to your privacy. We do not request your name and the anonymous data that we collect will only be used to draft statistics about the number of (unique) downloads and the geographical, gender, and professional distribution of our users. This statistics may be published on this web site or used to write the reports that our public funding agencies request and to stir the future policies of the QUANTUM ESPRESSO Foundation and Project.

nickname *

winmostar_user

email *

username@winmostar.com

password *

••••••••

Weak

Enter password again *

••••••••

country *

Japan

registration type *

Individual

gender *

Prefer not to say

degree *

none

- ② 以下のサイトにアクセスし、登録したユーザ情報と表示されているセキュリティコードを入力し、download ボタンをクリックする。

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

download

To download the files you must be registered. If you are a registered user you can go directly to "download", otherwise please "register".

In order to download our free software and documentation, we kindly ask you to identify yourself through a nickname that you can obtain through a simple, non-intrusive, and strictly anonymous registration procedure. Once registered, you will not be asked any data for a second time.

Log In

nickname or e-mail

username@winmostar.com

password

••••••••

security code: 606

enter the security code:

606

☒ remember me

download

register

lost password

- ③ Quantum ESPRESSO V. 7.1 のダウンロードリンクをクリックし、qe-7.1-ReleasePack.tar.gz をダウンロードする。

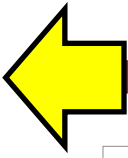
download

logo

SOFTWARE	DOCUMENTATION	OTHER
Full source code of QUANTUM ESPRESSO v7.2. Ready for compilation in all supported platforms. For more details and instructions see the release notes contained in the archive.	The full documentation bundle of QUANTUM ESPRESSO v7.2. Here you can find all the information on the features and capabilities of QUANTUM ESPRESSO.	This archive contains the XSD schemas used by QUANTUM ESPRESSO applications in version 7.2. To download the package, press the button below.
Quantum ESPRESSO V.7.2 https://www.quantum-espresso.or	Quantum ESPRESSO V.7.2 Docs https://www.quantum-espresso.or	Quantum ESPRESSO V.7.2 Schemas https://www.quantum-espresso.or

PREVIOUS VERSIONS

Quantum ESPRESSO V.7.1 https://www.quantum-espresso.or	Quantum ESPRESSO V.7.0 https://www.quantum-espresso.or	Quantum ESPRESSO V.6.8 https://www.quantum-espresso.or
--	--	--



- ④ `qe-7.1-ReleasePack.tar.gz` を SCP など で Linux サーバ に転送する。ここではホームディレクトリ直下に置いたと仮定する。
- ⑤ Linux サーバ にログインし、以下のコマンドで圧縮ファイルを解凍する。

```
$ cd
$ tar xvfz qe-7.1-ReleasePack.tar.gz
```
- ⑥ 以下のコマンドで Quantum ESPRESSO をビルドする。`configure` のオプションを調整することで性能のチューニングが可能だが、設定は環境依存となるため本書では扱わない。なお、`make libfox` を実行せずに `make all` を実行すると FoX のコンパイルでエラーが起きることがある。また、Quantum ESPRESSO のバージョンによっては `make` コマンドの並列処理オプション (`-j`) を使用するとビルドに失敗することがある。

```
$ cd qe-7.1
$ ./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。
$ rm external/lapack/.appveyor.yml
$ rm external/lapack/.travis.yml
$ make libfox
$ make all
```
- ⑦ 非並列の動作テストのため以下のコマンドを実行する。

```
$ cd test-suite
$ make run-custom-test testdir=pw_scf
```

テストに成功すると、以下のように表示される。

```
All done. 27 out of 27 tests passed.
```

- ⑧ 並列の動作テストのため以下のコマンドを実行する。

```
$ make run-custom-test-parallel testdir=pw_scf
```

テストに成功すると、以下のように表示される。

```
All done. 27 out of 27 tests passed.
```

4. Linux サーバ上での最終確認

- ① Winmostar から接続するときの状況を再現するため、Linux サーバにログインしなおす。

- ② MPI の動作を確認するため、MPI の起動に必要な環境を設定するコマンドを入力しメモに控えておく。本書の手順に従った場合は、以下のコマンドを入力する。

```
$ export PATH=$PATH:${HOME}/mpich-install-3.4.2/bin
```

- ③ 以下のコマンドを実行してインストールした mpirun のパスが表示されることを確認する。確認できない場合は②の設定を見直す。

```
$ which mpirun
```

- ④ MPI の動作確認のため、以下のコマンドを実行して現在のディレクトリ名が 2 つ表示されることを確認する。確認できない場合は②の設定を見直す。

```
$ mpirun -n 2 pwd
```

- ⑤ Quantum ESPRESSO の動作を確認するため、Quantum ESPRESSO の起動に必要な環境を設定するコマンドを入力しメモに控えておく。本書の手順に従った場合は、以下のコマンドを入力する。

```
$ export PATH=$PATH:${HOME}/qe-7.1/bin
```

```
$ scl enable devtoolset-7 bash
```

- ⑥ 以下のコマンドを実行してインストールした Quantum ESPRESSO のパスが表示されることを確認する。確認できない場合は⑤の設定を見直す。

```
$ which pw.x
```

- ⑦ 以下のコマンドを実行して Quantum ESPRESSO が起動しバージョンが表示されることを確認する。確認できない場合は⑤の設定を見直す。Quantum ESPRESSO が起動したら Ctrl-c で終了する。

```
$ mpirun -n 2 pw.x
```

表示される例：

```
Program PWSCF v.7.1 starts on ...
...
(途中省略)
...
Parallel version (MPI), running on 2 processors

MPI processes distributed on 1 nodes
344 MiB available memory on the printing compute node when the environment start

Waiting for input...
```

5. Winmostar からの設定および動作確認

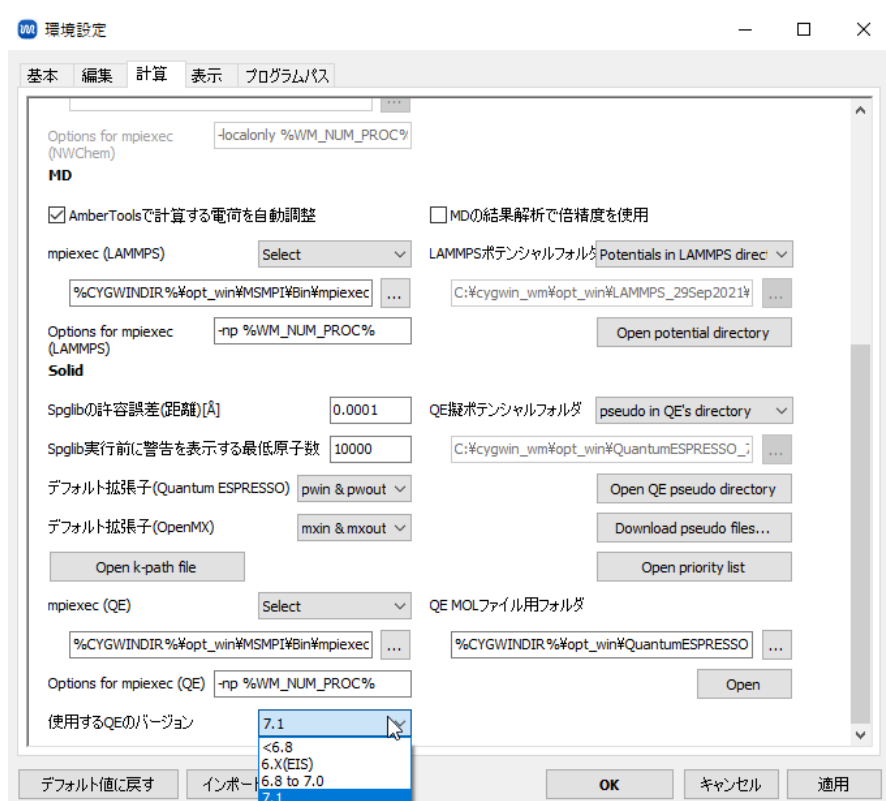
ユーザマニュアルの [7.2. リモートジョブの設定手順](#)に従って設定し動作確認を行う。

テンプレートスクリプトを編集する際には、「# Insert commands here」 から「# Do not modify the followings」の間に 4-②と 4-⑤でメモに控えた内容を追記する。本書の手順に従った場合は以下ようになる。

```
echo "*****"
echo "***      Set user-defined variables          ***"
echo "*****"
set -v
# Insert commands here
MPI_COMMAND="mpirun -n %WM_NUM_PROC% "
export PATH=$PATH:${HOME}/mpich-install-3.4.2/bin
scl enable devtoolset-7 bash
export PATH=$PATH:${HOME}/qe-7.1/bin

# Do not modify the followings
```

Winmostar V11.5.0 以降を利用している場合は、続けて Winmostar の **ツール | 環境設定** をクリックし、**計算タブ** の **Solid | 使用する QE のバージョン**（見つからない場合は下までウィンドウをスクロールする）を、Linux 上にインストールした Quantum ESPRESSO のバージョンに合わせて変更する。本書の手順に従った場合は「7.1」を選択する。複数のバージョンの Quantum ESPRESSO を切り替えながら使う場合は、Quantum ESPRESSO の入力ファイルを生成する前に都度**使用する QE のバージョン**を変更する。



以上