

# Linux サーバ版 Quantum ESPRESSO インストールマニュアル

2022 年 4 月 15 日

## 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<sup>1</sup>。また以下の命名としています。

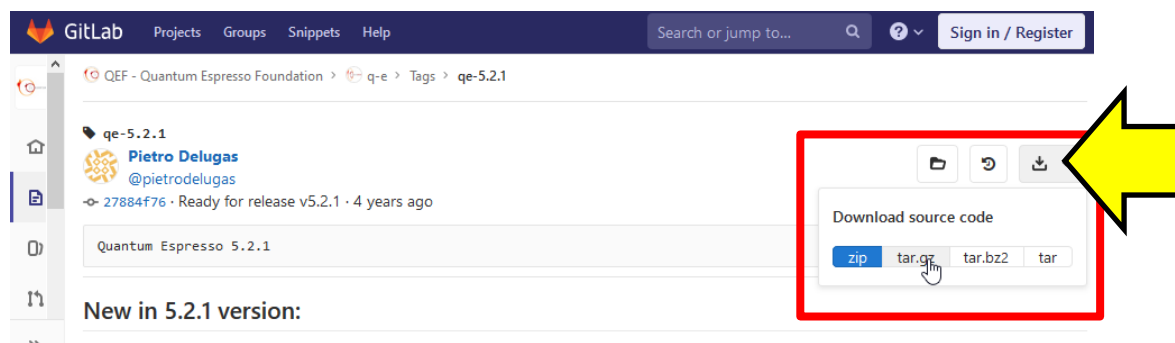
サーバホスト名 : remote\_server

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 (箱の形) → **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 SCP 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 7.8 (x86\_64) への導入に必要なコマンドを示す。

```
$ sudo yum install gcc gcc-fortran gcc-c++
```

## 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。

```
$ sudo yum install mpich-devel
```

<sup>1</sup> <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、Winmostar サイト内のインストール方法 <https://winmostar.com/jp/installation/> 項目(10)参照。

```
$ export PATH=/usr/lib64/mpich/bin:$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

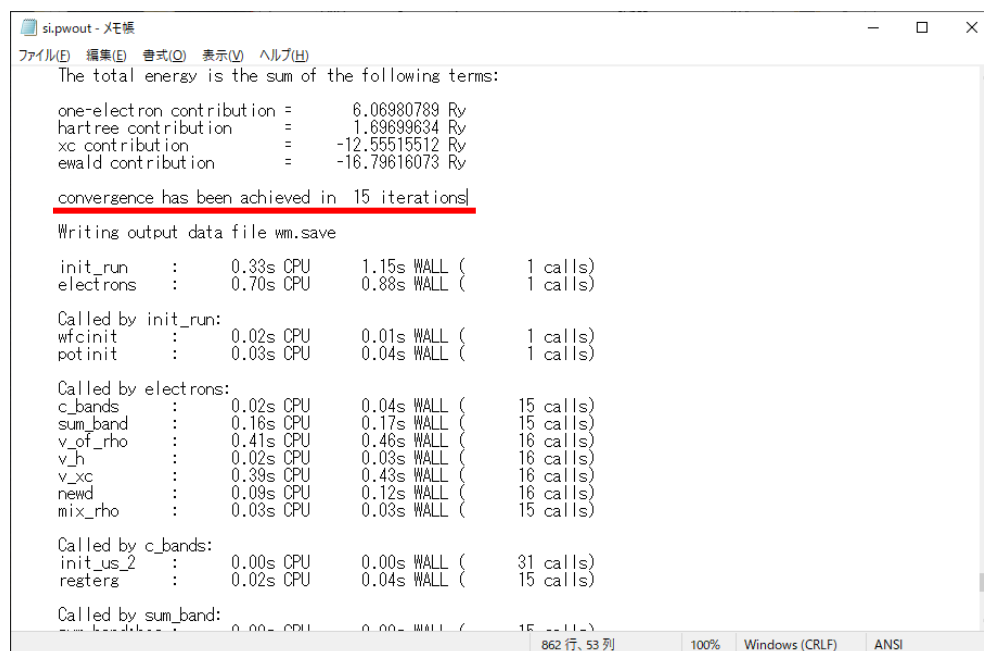
「(ホームディレクトリ) /q-e-qe-5.2.1/bin/pw.x」と表示されることを確認する。

```
$ which pw.x
```

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

- ① Winmostar を起動しファイル | 新規ファイルをクリックする。
- ② ファイル | インポート | Samples ファイル | si.cif をクリックする。
- ③ 破棄して読み込みをクリックする。
- ④ 固体 | Quantum ESPRESSO | キーワード設定をクリックする。
- ⑤ 現在のセルはプリミティブセルに変換可能です。変換しますか?との質問にははいを選択する。
- ⑥ Quantum ESPRESSO Keyword Setup ウィンドウ右下の OK をクリックする。
- ⑦ 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 をクリックしてファイルを取得するところまで実行する。
- ⑧ 固体 | Quantum ESPRESSO | ログを表示をクリックし、デフォルトで選択されたファイルを開く。

Quantum ESPRESSO が正常に実行された場合は、開かれたテキストファイルのほぼ最後に convergence has been achieved in ... と表示される。



```
si.pwout - Xモック
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
The total energy is the sum of the following terms:
one-electron contribution = 6.06980789 Ry
hartree contribution      = 1.69699634 Ry
xc contribution           = -12.95515512 Ry
ewald contribution        = -16.79616073 Ry
convergence has been achieved in 15 iterations!
Writing output data file wm.save
init_run   : 0.33s CPU 1.15s WALL ( 1 calls)
electrons  : 0.70s CPU 0.88s WALL ( 1 calls)
Called by init_run:
wfcinit    : 0.02s CPU 0.01s WALL ( 1 calls)
potinit    : 0.03s CPU 0.04s WALL ( 1 calls)
Called by electrons:
c_bands    : 0.02s CPU 0.04s WALL ( 15 calls)
sum_band   : 0.16s CPU 0.17s WALL ( 15 calls)
v_of_rho   : 0.41s CPU 0.46s WALL ( 16 calls)
v_h        : 0.02s CPU 0.03s WALL ( 16 calls)
v_xc       : 0.39s CPU 0.43s WALL ( 16 calls)
newd       : 0.09s CPU 0.12s WALL ( 16 calls)
mix_rho    : 0.03s CPU 0.03s WALL ( 15 calls)
Called by c_bands:
init_us_2  : 0.00s CPU 0.00s WALL ( 31 calls)
resterg    : 0.02s CPU 0.04s WALL ( 15 calls)
Called by sum_band:
sum_band   : 0.00s CPU 0.00s WALL ( 15 calls)
862行、53列 100% Windows (CRLF) ANSI
```

以上