



QUANTUM ESPRESSO  
ユーザーマニュアル



# 目次

1	QUANTUM ESPRESSO について .....	2
2	QUANTUM ESPRESSO インストール概要 .....	3
3	QUANTUM ESPRESSO 実行コマンド .....	4
3.1	代表的な実行コマンド .....	4
3.2	関連プログラム群 .....	4
3.3	User guide 等 .....	4
4	QUANTUM ESPRESSO 実行例 .....	5
4.1	QUANTUM ESPRESSO 実行環境の設定 .....	5
4.2	シリアル(1CPU コア)の実行例 .....	8
4.3	MPI 並列の実行例 .....	8
5	既知の問題点 .....	9
6	可視化ツール .....	11
6.1	PWgui .....	11
6.2	その他の可視化ツール .....	11
A.	付録 .....	13
A.1.	HPC システムズ お問い合わせ先 .....	13

# 1 QUANTUM ESPRESSO について

---

QUANTUM ESPRESSO は、物質のナノスケールモデリングのための量子力学ソフトウェアパッケージです。密度汎関数法による平面波・擬ポテンシャルに基づく周期的密度汎関数理論 (DFT) 法を採用しています。基底を用いた電子構造計算とナノスケールでの材料モデリングのためのオープンソースコンピュータコードの統合スイートです。QUANTUM ESPRESSO は、QUANTUM ESPRESSO Foundation に参画している多数のグループにより開発されており、GNU General Public License 2.0 ライセンスに従って無償で配布されています。

QUANTUM ESPRESSO は、基本的なコアコンポーネントセット、より高度なタスクを実行するためのプラグインセット、そして、コアコンポーネントと相互運用可能なように設計されたサードパーティパッケージで構成されています。

QUANTUM ESPRESSO のパッケージは QUANTUM ESPRESSO ホームページからダウンロード可能です。当社では、数値精度を守りながら計算速度を最大化するように QUANTUM ESPRESSO をビルドしています。

本マニュアルでは QUANTUM ESPRESSO のインストールの概要とジョブの実行方法をご案内します。QUANTUM ESPRESSO の詳細については次のオンラインマニュアルをご確認下さい。

<https://www.quantum-espresso.org/resources/users-manual>

## 2 QUANTUM ESPRESSO インストール概要

---

本章では当社が行いました Q<sub>QUANTUM</sub> ESPRESSO のインストール内容を概説します。

Q<sub>QUANTUM</sub> ESPRESSO は次のディレクトリにインストールしてあります。

パッケージ	ディレクトリ
Q <sub>QUANTUM</sub> ESPRESSO	/usr/local/espresso-7.2/bin

Q<sub>QUANTUM</sub> ESPRESSO はソースコードで配布されています。Q<sub>QUANTUM</sub> ESPRESSO のインストールの際は次のコンパイラを使用してビルドを行なっています。

パッケージ	ディレクトリ
Intel oneAPI 2023.2.0	/opt/intel/oneapi/compiler/2023.2.1
Intel Math Kernel Library	/opt/intel/oneapi/mkl/2023.2.0
Intel MPI 2021.9.0	/opt/intel/oneapi/mpi/2021.9.0

test-suite を使用して、cp.x、pw.x、epw.x、ph.x、hp.x、kpw.x、turbo\_lanczos.x、turbo\_spectrum.x、turbo\_spectrum.x、all\_currents.x、を試験し、パスする事を確認してあります。また、テストが存在しないバイナリも、example を使用して、動作を確認してあります。

## 3 QUANTUM ESPRESSO 実行コマンド

---

QUANTUM ESPRESSO の実行ファイルは標準のビルド手順で作成されるものを用意しています。

### 3.1 代表的な実行コマンド

DFT による電子構造特性の計算のために、平面波基本セットと擬ポテンシャルを使用する次のコアパッケージが用意されています。基本的な QUANTUM ESPRESSO の実行コマンドです。

- pw.x (PWscf (PW))
  - 平面波 SCF 法により計算を実行します。
- cp.x (CP (CPV))
  - Car-Parrinello 法により計算を実行します。

### 3.2 関連プログラム群

様々なタスクを実行するため、プラグインを含めると 130 以上の実行コマンドがあります。代表的なものとして、電子密度の計算などのための pp.x、密度汎関数摂動論を用いたフォノンを計算する ph.x、Nudged Elastic Band (NEB) 法計算を行う neb.x などが用意されています。これらのプログラムは bin/ にシンボリックリンクの形でインストールしてあります。それぞれの使用方法はマニュアルと example をご参照下さい。

### 3.3 User guide 等

Doc/以下に、user-guide.pdf を開発陣が用意したドキュメント類をビルドしてインストールしてあります。QUANTUM ESPRESSO の使用方法等の詳細に関して、インターネットが使用出来ない場合など、ここにある user-guide.pdf をご参照下さい。

## 4 QUANTUM ESPRESSO 実行例

### 4.1 QUANTUM ESPRESSO 実行環境の設定

弊社出荷の RHEL/AlmaLinux 8 系 OS においては、`QUANTUM ESPRESSO` の実行環境の設定を、`QUANTUM ESPRESSO` を実行したいタイミングで、[Environment Module](#) と呼ばれる環境設定ユーティリティを用いて実施ください。Environment Module ではアプリケーション等のソフトウェア部品の環境設定を「モジュール」と呼び、`module load`・`module unload` というコマンドによりモジュールの有効化・無効化を実施できます。モジュールが有効化されているとき、そのアプリケーション等は、`PATH` 等の環境設定が済んで実行可能な状態になっています。

Environment Module で `QUANTUM ESPRESSO` を使用可能とするモジュール定義ファイルは次の場所に設置してあります。

```
/home/.common/modulefiles/oneAPI/oneAPI バージョン/QE/QUANTUM ESPRESSO バージョン
```

以下では Environment Module を用いた `QUANTUM ESPRESSO` 実行環境設定の方法を示します。

(1) 使用できるモジュールの一覧表示 : `module avail`

`module avail` コマンドにより、使用可能なモジュールの一覧を表示します。次は `QUANTUM ESPRESSO` 7.2 の場合の例です。

```
$ module_ avail
----- /home/.common/modulefiles/oneAPI/2023.2.0 -----
QE/7.2
(後略)
```

赤字で示したように、使用可能なモジュール（ソフトウェア名/バージョン）が表示されます。

## (2) モジュールの有効化・無効化 : `module load` ・ `module unload`

モジュールを有効にするコマンドは `module load` です。その後ろにモジュール名を付けて実行します。例えば QUANTUM ESPRESSO 7.2 のモジュールを有効化する場合、具体的なコマンドは次となります。

```
$ module load QE/7.2
```

逆に、有効化したモジュールを無効化するコマンドは `module unload` です。同様に、後ろにモジュール名を付けて実行します。

```
$ module unload QE/7.2
```

`module unload` は、有効化したモジュールによる環境設定が別の作業に悪影響を及ぼす際などに使用ください。有効化したモジュールによる環境設定が特に悪影響を及ぼしていない場合には、わざわざ無効化する必要はありません。

正常にモジュールを読み込めたかどうかについては、次の `module list` コマンドで確認できます。

## (3) 有効になっているモジュールの表示 : `module list`

`module list` により、Environment Module で有効化されているモジュールの一覧を表示します。

```
$ module list
```

例えば QE/7.2 のモジュールが有効になっている場合、次のように `Currently Loaded Modulefiles:` 行より下に表示されます。

```
# module list
Currently Loaded Modulefiles:
 1) tbb/2021.10.0          4) mkl/2023.2.0
 2) compiler-rt/2023.2.1 5) mpi/2021.9.0
 3) compiler/2023.2.1    6) QE/7.2
```

#### (4) ユーザーシェルログイン時にモジュールを自動的に有効化する方法

ユーザーログイン時に、自動的にモジュールの有効化を行いたい場合、ユーザーのシェル環境設定ファイルに `module load` コマンドを追記してください。

QUANTUM ESPRESSO 7.2 の場合の具体的な修正例を次に示します。

- ☞ Bash をお使いの場合  
ホームディレクトリの `.bashrc` の最終行に以下の追記を行います。
  
- ☞ Tcsh をお使いの場合  
ホームディレクトリの `.cshrc` の最終行に以下の追記を行います。

```
# ----- 任意のコメント -----  
# module_load_QE/7.2
```

モジュールの有効化が他のアプリケーションに悪影響を及ぼすようなケースも存在いたしますので、ログイン時のシェル環境における自動有効化については、有効時の影響に十分注意した上で行うようお願いいたします。



## 4.2 シリアル(1CPU コア)の実行例

インプットファイルが置かれているディレクトリに移動して、pw.x コマンドを実行します。

```
$ cd _jobdir
$ ls
sample.in
$ pw.x -i sample.in
```

標準出力で出力される結果をファイルに書き込む場合は、以下のようなリダイレクトを使用します。

```
$ cd _jobdir
$ ls
sample.in
$ pw.x -i sample.in > sample.out
```

## 4.3 MPI 並列の実行例

インプットファイルが置かれているディレクトリに移動して、mpirun コマンドを介して pw.x コマンドを実行します。

```
$ cd _jobdir
$ ls
sample.in
$ mpirun -np 16 pw.x -i sample.in > sample.out
```

※ -np 以降に並列数を指定します。上記は 16 並列を実行する例です。

## 5 既知の問題点

---

- `QUANTUM ESPRESSO 6.2`における仕様変更により、`West` は `make` のリストから除外され、ビルド出来なくなり、使用出来ません。
- `SternheimerGW` は `make` のリストから除外されました。その為、ビルドは出来ず、使用も出来ません。
- `Environ` は `ver. 0.2` までは、`gipaw.x` に適用されていましたが、`ver. 1.0` 以降では `pw.x` に適用されるように仕様変更になりました。`QUANTUM ESPRESSO 6.2.1` までと `6.3` 以降では異なるプログラムに適用されているのでご注意ください。
- `Example` のインプットを利用して、動作を確認してありますが、`Example` はバグなどが多数存在します。`atomic` の `all-electron` のインプットファイルの数値の一部など修正出来るものは修正してはありますが、一部、明かに仕様変更やバグによって動作不良するままのものがあります。また、`environment_variable` の設定、例えばオプション `npool` が必要なのに設定していないなどで動作出来ないインプットなどもありますので、ご使用になられる場合は、ご注意ください。
- `COUPLE` の `example` には、開発陣の用意した `makefile` がありますが、これは `6.2.1` までの `QUANTUM ESPRESSO` の仕様に従ったもので、`6.3` 以降の仕様変更に追随していない為、そのままではビルド出来ません。大幅に修正する事でビルド自体は可能ですが、ソースも仕様変更追随していない為、`example` は、動作は出来ません。
- `QUANTUM ESPRESSO 6.2` 以降、`UPF` ファイルは `ver. 2.0` を使用するよう仕様になっています。`pseudo` ディレクトリにあるものは修正済みですが、`UPF` ファイルをダウンロードしてきた場合、`ppinfo` タグの部分で、`![CDATA[...]]` となっているものがあります。このタグは `UPF ver2.0` のフォーマット違反になる為、「`![CDATA[`」と「`]]`」を消去して下さい。
- `pw_export.x` はビルドされない仕様に変更になっている為、ビルドして使用する事が不可能になっています。`QUANTUM ESPRESSO 6.3` の `pw_export.x` を使用しても、`QUANTUM ESPRESSO 7.1` や `7.2` では仕様変更になって使用する事は出来ません。`pw_export.x` をどうしてもご使用になりたい場合は、`QUANTUM ESPRESSO 6.3` をご使用下さい。
- `plumed` は `make` のリストから除外されている為、ビルド出来ず、使用も出来ません。
- `PlotPhon` は `QUANTUM ESPRESSO 7.0` よりソースが除外されている為、ビルドも使用も出来ません。
- `QHA` は `QUANTUM ESPRESSO 7.0` よりソースが除外されている為、ビルドも使用も出来ません。
- `EPW` はシリアルでのテストは全てパスしましたが、並列のテストでは1つのテストが数値ズレになっています。パラレルでも `QUANTUM ESPRESSO 7.1` でパスした `QUANTUM ESPRESSO 7.1` の `EPW ver5.5` を同梱してあります。`bin/epw55.x` が同梱した `EPW v5.5` のバイナリです。但し、`QUANTUM ESPRESSO 7.2` のテストのリファレンスは `v5.7` のもので、計算方法なども異なる事から、`QUANTUM ESPRESSO 7.2` のテストでは数値ズレとなる結果があります。`QUANTUM ESPRESSO 7.1` での `EPW v5.5` のテストのログを `log-epw55-QE71-serial`、`log-epw55-QE71-parallel` として、`QUANTUM ESPRESSO 7.2` の `test-suite` で実行した数値ズレのあるテストのログを `log-epw55-serial`、

log-epw55-parallel として置いてあります。EPW v5.5 のバイナリを使用させる場合の参考にしてください。

- Intel oneAPI 2023. 2. 0 に同梱されている IntelMPI は 2021. 10. 0 ですが、このバージョンでは Q<sub>QUANTUM</sub> ESPRESSO 7.2 ではバージョン特異的に問題が生じる事が判明しています。動作自体は IntelMPI 2021. 10. 0 で可能ですが、異常にメモリを使用してしまいます。他のバージョンの IntelMPI ではこうした問題が起きない事を確認し、IntelMPI 2021. 10. 0 でのみ起きる現象である事を確認しました。この問題を回避する為、IntelMPI 2021. 9. 0 を同梱して、これを用いてビルドし、動作に異常が無い事を確認してあります。ご使用になる際には IntelMPI 2021. 9. 0 をロードする設定を変更しないように注意して下さい。

## 6 可視化ツール

---

Q<sub>UANTUM</sub> ESPRESSO はテキスト形式で入力用データファイルを作成し、計算結果もテキスト形式で出力されます。計算結果などのファイルから Gnuplot などの形式に変換して可視化するツールを自作するというのが Q<sub>UANTUM</sub> ESPRESSO の公式な回答です。ユーザーが作成したツールで使用頻度が高いものなどは開発陣が bin ディレクトリに多量に入れてありますので、それらをご活用下さい。Q<sub>UANTUM</sub> ESPRESSO をこれから始めるという場合や、Q<sub>UANTUM</sub> ESPRESSO の計算結果を可視化したい場合、簡単なツールはないかとお問い合わせを頂く場合があります。Q<sub>UANTUM</sub> ESPRESSO のホームページにはいくつか可視化ツールとして紹介されています。

### 6.1 PWgui

Q<sub>UANTUM</sub> ESPRESSO に同梱されている GUI のツールです。

実行コマンド : pwgui

### 6.2 その他の可視化ツール

Q<sub>UANTUM</sub> ESPRESSO の実行結果を可視化するためのツールが存在します。詳細に関しては、各ツールのホームページなどをご参照下さい。

XCrySDen (Q<sub>UANTUM</sub> ESPRESSO 以外にも様々なアプリケーションに対応している可視化ツールです。対応している Q<sub>UANTUM</sub> ESPRESSO のバージョンがかなり古く、動作出来ないインプットなども多数存在します。

配布元 : <http://www.xcrysden.org/>

J-ICE (Q<sub>UANTUM</sub> ESPRESSO の出力ファイルを可視化することができます。)

Web ブラウザ上で動作 : <https://sourceforge.net/projects/j-ice/>

ASE (ASE は原子分子シミュレーション用 Python サイトパッケージです。ASE には GUI が付属しています。簡単な可視化は ASE GUI から可能です。ASE はこれで全て完結するものではなく、可視化ツール (VMD や VESTA) とそれに対応したサイトパッケージか python から自作が必要になるかと思えます。)

python 上で動作 : <https://gitlab.com/ase/ase>

VESTA (ユーザーがデータ変換用のプログラムを作る必要があります。)

配布元 : <http://jp-minerals.org/vesta/en/>

VMD (ユーザーがデータ変換用のプログラムを作る必要があります。)

配布元 : <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

Winmostar (Windows で動作します。ソルバーが Linux 環境の場合、計算だけ Linux で行なって、出力をパソコンに持ってきて Winmostar を使う形になります。有償アプリです。)

販売元 : <https://winmostar.com/jp/>

Advance/NanoLabo (オープンソースの材料解析ソフトウェアに対応したグラフィカルユーザーインターフェース(GUI)です。有償アプリです。)

販売元 : <https://www.nanolabo.advancesoft.jp/>

# A. 付録

---

## A.1. HPC システムズ お問い合わせ先



弊社ホームページ [http://www.hpc.co.jp/support\\_index.html](http://www.hpc.co.jp/support_index.html)

サポート案内やお問い合わせの多い内容など様々な情報を掲載しております。  
是非ご活用ください。

### HPC システムズ株式会社

〒108-0022 東京都港区海岸 3-9-15 LOOP-X 8 階

### HPC 事業部



【営業】 03-5446-5531    【サポート】 03-5446-5532

お電話によるサポート受付は祝日、弊社指定休日を除く月曜日から金曜日の 9:30～17:30  
とさせていただきます。



【FAX】 03-5446-5550



【電子メール】 [hpcs\\_support@hpc.co.jp](mailto:hpcs_support@hpc.co.jp)