



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	シリアル(1CPU コア)の実行例	5
4.2	MPI 並列の実行例	5
5	既知の問題点	6
6	可視化ツール	8
6.1	XCrySDen	8
6.2	その他の可視化ツール	8
A.	付録	9
A.1.	HPC システムズ お問い合わせ先	9

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

本項では当社が行いました QUANTUM ESPRESSO のインストール内容を概説します。

QUANTUM 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
QUANTUM ESPRESSO	/usr/local/espresso-バージョン/bin

QUANTUM ESPRESSO はソースコードで配布されています。QUANTUM 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 Parallel Studio XE 2019 Composer Edition (19.0.5)	/opt/intel/psxe2019/ parallel_studio_xe_2019.5.281
Intel Math Kernel Library	/opt/intel/psxe2019/mkl
Intel MPI 2018 update 4	/opt/intel/psxe2018/impi/2018.4.274

test-suite を使用して、cp.x、pw.x、epw.x、ph.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。

QUANTUM ESPRESSO の環境設定はインストールの際に、設定してあります。各ユーザーのホームディレクトリのファイルで行われています。tcsh をご使用の場合は ~/.cshrc、bash をご使用の場合は ~/.bashrc ファイル内で /home/.common 以下に用意した QUANTUM ESPRESSO の環境設定スクリプトを実行します。

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 60 以上の実行コマンドがあります。代表的なものとして、データ解析やプロットिंगの為に `pp.x`、格子振動の変動パターンなどを計算する `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、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 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
```

4.2 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。上記では 16 並列を実行する場合の例です。

5 既知の問題点

- 2020 年 4 月 1 日現在、QUANTUM ESPRESSO 6.2.1、6.3、6.4.1 では、QUANTUM ESPRESSO 6.2 における仕様変更により、West がビルド出来なくなり、使用出来ません。
- SternheimerGW は β リリースの為か、QUANTUM ESPRESSO 6.3、6.4.1 では、恐らくソースのバグと思われる理由により、ビルドには成功するものの、異常挙動する為、未作成です。
- D3Q は QUANTUM ESPRESSO 6.3 ではソースコードが用意されておらず、使用出来ませんでした。QUANTUM ESPRESSO 6.4.1 では、対応ソースコードが用意された為、使用可能です。
- 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、6.4.1 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。Environ を適用した pw.x は、未適用の pw.x と比べて、若干、低速です(5%程度)。pw.x は実行時間が長い場合が多い事を考慮して、Environ 適用版の pw.x を、Environ/bin/に pw-qe641-environ11.x として別に用意してあるので、必要な場合は、こちらを使用して下さい。また、Environ 対応 pw.x のテストは 6.4.1 より加わった pw_gcs のテストがエラーとなりました。これは、テストは用意されたものの、ソースは未対応の為と考えられます。その他はシリアルでは問題無いものの、パラレルでは pw_gcs を除いて 10 のテストが数値ズレのエラーとなりました。並列での数値補正のバグの可能性が疑われます。誤差は全て小数点 4 桁以下でした。さらに Environ に関して、QUANTUM ESPRESSO 6.4.1 では example の一部のインプット (example_06)は、テストでも動作しなかった pw_gcs の example である為、こちらでも動作しません。
- 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残っています。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。
- EPW の spin orbit coupling(soc)において、ph.x で計算して出力した結果を、epw.x にインプットとして読み込ませる時、このファイルは xml 形式のファイルでないと動作しない仕様ですが、マニュアルには記載がありません。対応方法の例として example の pb/wSOC の pp.in を fildyn='pb.dyn' から fildyn='pb.dyb.xml' と修正してあります。epw.x の soc でエラー終了してしまった場合など、ご参考にして下さい。
- 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 以降の仕様変更には追従していない為、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、ソースも仕様変更には追従していない為、example は、動作はするものの、完全に以前と同じ動作は出来ません。COUPLE をご使用される場合、6.2.1 以前のバージョンと必要なライブラリ等、仕様が大きく異なっている点にご注意下さい。

- 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 UFP 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。
- 一部のバイナリ、`phcg.x` と `pw_export.x` は、QUANTUM ESPRESSO 6.3 のバイナリを同梱してあります。`phcg.x` はバグにより、6.4.1 のものが上手く動作しない為、6.3 の `phcg.x` バイナリを別にインストールしてあります。`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なのですが、WANT などのコンポーネントでは、他コンポーネントと連動させる場合などで、`pw_export.x` を前提としている場合がある為、QUANTUM ESPRESSO 6.3 の `pw_export.x` バイナリを同梱してあります。
- PWgui のスタートアップ画面の PWgui のバージョンナンバーは、6.4 となっていますが、これはスタートアップ画面のメンテナンスの問題で、6.4 のままになっている為です。実際に使用しているソースは 6.4.1 のものです。

6 可視化ツール

QUANTUM 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。QUANTUM ESPRESSO のユーザーはこのような形式に慣れている方が少なくないですが、QUANTUM ESPRESSO をこれから始めるという場合や、QUANTUM 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。QUANTUM 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 XCrySDen

QUANTUM 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。XCrySDen は当社にてパッケージ提供が可能です（ご入用の場合はお問い合わせ下さい）。

実行コマンド : xcrysdn

配布元 : <http://www.xcrysden.org/>

ただし、XCrySDen で対応している QUANTUM ESPRESSO のバージョンが古い為、一部のインプットやアウトプットなど動作出来ないものもあります。VMD を使用して可視化したい場合など、ファイル形式を変換するツールが XCrySDen には含まれています。

6.2 その他の可視化ツール

弊社では標準的な可視化ツールを XCrySDen としていますが、この他にも QUANTUM 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。

J-ICE (QUANTUM 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 : <http://j-ice.sourceforge.net/ondemand/index.html>

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

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