

パソコン(Mac OS)に quantum ESPRESSO をインストールするための準備

Reference: http://www.stat.phys.titech.ac.jp/SATL_ge_tutorial/

Mac では Macports や fink を利用して gfortran を入れれば quantum ESPRESSO もコンパイルできます。ただし、fink では後述の XCrysdn もインストールできるので、fink を利用するのがお勧めです。

以下 fink のインストールについて説明します。fink をインストールする場合、ソースをコンパイルするのにかなり時間がかかりますので、ご注意ください。(パソコンの性能にもよりますが、最低数時間は待つ必要があります)

まず、<http://www.finkproject.org/download/srcdist.php> に従い、fink をインストールしてください。インストールに際して聞かれる質問は全部デフォルトの値を用いて問題ないと思います。

fink を既に入れている場合はそれを使ってもよいですが、もし何か問題が生じたら以下のページを参考に <http://www.finkproject.org/download/10.9-upgrade.php?phpLang=en> インストールされているパッケージのリストを作っておいて、fink を入れ直してみてください。

fink のインストールのページにある

```
./bootstrap
```

が終わったら、

```
./sw/bin/init.sh
```

として fink の環境設定を行います。(このコマンドは .profile などを書いておくとログインするたびに自動で環境設定が行われます。)次に

```
fink selfupdate
```

として fink を最新の状態にします。

次に fortran をインストールします。

```
fink install gcc5
```

これで、fink のインストールから ESPRESSO コンパイルの準備までが完了です。なお、後に必要となる XCrysdn もここでインストールしておいてください。

```
fink install xcrysdn
```

ここでは、quantum ESPRESSO のインストール方法を説明します。インストール方法に関しては以下のページにも情報がありますので、そちらも参考にして下さい。

- http://www.quantum-espresso.org/wp-content/uploads/Doc/user_guide.pdf

最新版のダウンロード

- espresso-5.2.1.tar.gz (<http://qe-forge.org/gf/download/frsrelease/199/855/espresso-5.2.1.tar.gz>)
- PHonon-5.2.1.tar.gz (<http://qe-forge.org/gf/download/frsrelease/199/849/PHonon-5.2.1.tar.gz>)

ファイルの展開とパッチの適用

展開したいディレクトリに上記の3つファイルを置いた上で、以下の通りファイルを展開してパッチをあてます。

```
tar zxvf espresso-5.2.1.tar.gz
cd espresso-5.2.1
tar zxvf ../PHonon-5.2.1.tar.gz
```

configure

コンパイラなどの環境を調べて `make.sys` をつくります。intel のコンパイラ、あるいは gcc, gfortran が入っている状況であれば、

```
./configure
```

でうまくいく場合が多いです。fink を利用している場合は

```
CC=/sw/bin/gcc-5 ./configure
```

のように fink の gcc を明示してやる必要があります。

LAPACK や FFT のライブラリ等も自動で探してきますが、自分で設定したい場合は、`./configure` で作成された `make.sys` を適宜編集して下さい。なお、この `make.sys` は `configure` するたびに上書きされてしまうので注意して下さい。

make

単に `make` とうつと以下のように出力されます。

```
to install, type at the shell prompt:
./configure
make target
```

where target is one of the following:

<i>pw</i>	<i>basic code for scf, structure optimization, MD</i>
<i>ph</i>	<i>phonon code, Gamma-only version and third-order derivatives</i>
<i>pwcond</i>	<i>ballistic conductance</i>
<i>neb</i>	<i>code for Nudged Elastic Band method</i>
<i>pp</i>	<i>postprocessing programs</i>
<i>cp</i>	<i>CP code: CP MD with ultrasoft pseudopotentials</i>
<i>ld1</i>	<i>utilities for pseudopotential generation</i>
<i>upf</i>	<i>utilities for pseudopotential conversion</i>
<i>tddfpt</i>	<i>time dependent dft code</i>
<i>gui</i>	<i>Graphical User Interface</i>
<i>pwall</i>	<i>same as "make pw ph pp pwcond neb"</i>
<i>all</i>	<i>same as "make pwall cp ld1 upf tddfpt"</i>
<i>xspectra</i>	<i>X-ray core-hole spectroscopy calculations</i>
<i>gipaw</i>	<i>NMR and EPR spectra</i>
<i>w90</i>	<i>Maximally localised Wannier Functions</i>
<i>want</i>	<i>Quantum Transport with Wannier functions</i>
<i>yambo</i>	<i>electronic excitations with plane waves</i>
<i>plumed</i>	<i>Metadynamics plugin for pw or cp</i>
<i>clean</i>	<i>remove executables and objects</i>
<i>veryclean</i>	<i>revert distribution to the original status</i>
<i>tar</i>	<i>create a tarball of the source tree</i>
<i>doc</i>	<i>build documentation</i>
<i>links</i>	<i>create links to all executables in bin/</i>

これを参考に必要なプログラムをコンパイルして下さい。普通の計算では、

```
make pw
make pp
make ph
```

としておけば充分です。

この状態で以下のコマンドを実行すれば scf 計算が行われます。

```
~/espresso-5.2.1/bin/pw.x < input.in > output.out
```