

LAMMPS 16Mar18 (stable release) for LX (gcc)

ウェブページ

<http://lammps.sandia.gov/>

バージョン

16Mar18

ビルド環境

- GCC 6.3.1
- Intel MKL 2018 Update 2
- Intel MPI 2017.3.196
- libjpeg-turbo 1.2.90

ビルドに必要なファイル

- lammps-stable.tar.gz (16Mar18)
- (一部ファイルは以下スクリプト中で取得)

ビルド手順

(2018/7/4 修正)

```
#!/bin/sh

VERSION=16Mar18
INSTALL_PREFIX=/local/apl/lx/lammps${VERSION}-gnu

BASEDIR=/home/users/${USER}
LAMMPS_TARBALL=${BASEDIR}/lammps-stable.tar.gz

WORKDIR=/work/users/${USER}
WORKDIR_LAMMPS=${WORKDIR}/lammps-${VERSION}
WORKDIR_LAMMPS_ESC=`echo ${WORKDIR_LAMMPS} | sed -e 's/V/\\\\\V/g'` 

PARALLEL=12

module purge
module load mkl/2018.0.2
module load mpi/intelmpi/2018.2.199
module load scl/devtoolset-6

#-- libs

MKLROOT_ESC=`echo /local/apl/lx/intel2018update2/compilers_and_libraries_2018.2.
199/linux/mkl | sed -e 's/V/\\\\\V/g'` 
LATTE_GIT=https://github.com/lanl/LATTE           # latte
LATTEDIR=${WORKDIR_LAMMPS}/lib/latte/LATTE
LATTEDIR_ESC="${WORKDIR_LAMMPS_ESC}/lib/latte/LATTE"
METIS_VER=5.1.0
METIS=http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/fetch/sw/metis/metis-${METIS_VER}.tar.gz
BML=https://github.com/lanl/bml.git
PROGRESS=https://github.com/lanl/qmd-progress.git
VMD_PLUGIN_INC=`echo /local/apl/lx/vmd193/lib/plugins/include | sed -e 's/V/\\\\\V/g'` # molfile
VORO_VER=0.4.6          # voronoi
VORO=http://math.lbl.gov/voro++/download/dir/voro++-$VORO_VER.tar.gz

#-----
umask 0022

cd ${WORKDIR}
if [ -d lammps-${VERSION} ]; then
  mv lammps-${VERSION} lammps_erase
```

```

rm -rf lammps_erase &
fi

tar zxf ${LAMMPS_TARBALL}
cd lammps-${VERSION}

# setup makefiles, libraries, and external resources
## main
sed -e "/g++_openmpi =/s/.*/# rccs = Intel MPI, MKL FFT + g++ /" \
-e "/OMPI_CXX/d" \
-e "s/^CCFLAGS.*/CCFLAGS = -g -O3 -fopenmp/" \
-e "s/^LINKFLAGS.*/LINKFLAGS = -g -O -fopenmp/" \
-e "s/DLAMMPS_GZIP/DLAMMPS_GZIP -DLAMMPS_JPEG/" \
-e "s/^FFT_INC.*/FFT_INC = -DFFT_FFTW3 -L${MKLROOT_ESC}V..VcompilerVlibVintel64 -m64 -I${MKLROOT_RSC}Vinclude/" \
-e "s/^FFT_PATH.*/FFT_PATH = -L${MKLROOT_ESC}VlibVintel64 -WI,--no-as-needed/" \
-e "s/^FFT_LIB.*/FFT_LIB = -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -liomp5 -lpthread -lm -ldl/" \
-e "s/^JPG_LIB.*/JPG_LIB = -ljpeg/" \
src/MAKE/OPTIONS/Makefile.g++_openmpi > src/MAKE/MINE/Makefile.rccs

## atc
( cd lib/atc && \
sed -e s/lammps.linalg/lammps.empty/ Makefile.mpic++ > Makefile.rccs && \
make -f Makefile.rccs -j ${PARALLEL} && \
cd ..../ )
## awpmd
( cd lib/awpmd && \
sed -e s/linalg/empty/ Makefile.mpi > Makefile.rccs && \
make -f Makefile.rccs -j ${PARALLEL} && \
cd ..../ )
## colvars
( cd lib/colvars && \
make -f Makefile.mpi -j ${PARALLEL} && \
cd ..../ )
## h5md
( cd lib/h5md && \
make -f Makefile.mpi -j ${PARALLEL} && \
cd ..../ )
## latte (make jobserver not available?)
## METIS, BML, and (qmd-)PROGRESS are also built
( cd lib/latte && \
git clone ${LATTE_GIT} && \
cd LATTE && \
wget ${METIS} && \
tar zxf metis-${METIS_VER}.tar.gz && \
cd metis-${METIS_VER} && \
make config prefix=../../install && \
make install && \
cd ..&& \
git clone ${BML} && \
cd bml && \
EXTRA_CFLAGS="-fPIC" EXTRA_FFLAGS="-fPIC" sh example_build.sh && \
cd build/ && \
make && \
make install && \
cd ../../ && \
git clone ${PROGRESS} && \
cd qmd-progress && \
EXTRA_FCFLAGS="-fPIC" EXTRA_LINK_FLAGS="-fPIC" CMAKE_PREFIX_PATH=${LATTEDIR}/metis-5.1.0/install PROGRESS_GRAPHLIB=yes \
PKG_CONFIG_PATH=${LATTEDIR}/bml/install/lib64/pkgconfig ./build.sh configure && \
cd build/ && \
make && \
cd src/ && \
gcc -DGLOBAL_DEBUG=PROGRESS_LOG_DEBUG \
-DMETIS_INDEX_KIND=4 \
-DMETIS_REAL_KIND=0d0 \
-O3 -DNDEBUG -fPIC \

```

```

-I${LATTEDIR}/bml/install/include \
-fopenmp \
-o CMakeFiles/progress.dir/prg_memory_consumption.c.o \
-c ${LATTEDIR}/qmd-progress/src/prg_memory_consumption.c && \
cd .. && \
make install && \
cd ../../ && \
sed -i -e "s/fopenmp/fopenmp -fPIC/" \
-e "s/^LIB =.*/LIB = -L${MKLROOT_ESC}/lib/intel64 -WI,--no-as-needed -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -liomp5 -lpthread -lm -ldl/" \
-e "s/^METIS =.*/METIS = ON/" \
-e "s/^PROGRESS =.*/PROGRESS = ON/" \
-e "s/.(HOME)/${LATTEDIR_ESC}/" \
-e "s/metis///" \
-e "s/install/lib/install/lib64/" \
makefile.CHOICES && \
make && \
cd ../../ && \
ln -s LATTE/src includelink && \
ln -s LATTE/liblink && \
ln -s LATTE/src/latte_c_bind.o filelink.o && \
echo "latte_SYSINC = -I../../lib/latte/LATTE/src -I../../lib/latte/LATTE/bml/install/include -I../../lib/latte/LATTE/qmd-progress/install/include" >
Makefile.lammps && \
echo "latte_SYSLIB = -fopenmp ../../lib/latte/filelink.o -llatte -L../../lib/latte/LATTE/qmd-progress/install/lib64 -lprogress -
L../../lib/latte/LATTE/bml/install/lib64 -lblml_fortran -lblml -L../../lib/latte/LATTE/metis-5.1.0/install/lib -lmetis" >> Makefile.lammps && \
echo -n "latte_SYSPATH = -fopenmp" >> Makefile.lammps && \
cd ../../ ) \
## meam \
( cd lib/meam && \
sed -e s/mpifort/mpif90/ Makefile.mpi > Makefile.rccs && \
make -f Makefile.rccs -j ${PARALLEL} && \
cd ../../ ) \
## molfile \
#### plugin location: /local/apl/lx/vmd193/lib/plugins/LINUXAMD64/molfile \
( cd lib/molfile && \
sed -i -e "s/molfile_SYSINC.*/molfile_SYSINC =-I$VMD_PLUGIN_INC/" Makefile.lammps && \
cd ../../ ) \
## poems \
( cd lib/poems && \
make -f Makefile.g++ -j ${PARALLEL} && \
cd ../../ ) \
## reax \
( cd lib/reax && \
make -f Makefile.fortran -j ${PARALLEL} && \
cd ../../ ) \
## voronoi \
( cd lib/voronoi && \
wget ${VORO} && \
tar zxf voro++-${VORO_VER}.tar.gz && \
cd voro++-${VORO_VER} && \
sed -i -e "s/^CFLAGS=.*/CFLAGS=-Wall -ansi -pedantic -fPIC/" config.mk && \
make -j ${PARALLEL} && \
cd ../../ && \
ln -s voro++-${VORO_VER}/src includelink && \
ln -s voro++-${VORO_VER}/src liblink && \
cd ../../ ) \
---- \
# now make lammps \
cd src \
make yes-all no-ext \
make no-KOKKOS \
no-GPU \
no-LATTE \

```

```

yes-VORONOI \
yes-USER-H5MD \
yes-USER-MOLFILE \
yes-USER-NETCDF

make -j ${PARALLEL} rccs
make -j ${PARALLEL} rccs mode=shlib
cd ../

# mkdir and install files
mkdir -p ${INSTALL_PREFIX}/src
cp src/lmp_rccs src/liblammps_rccs.so src/*.h ${INSTALL_PREFIX}/src
ln -s ${INSTALL_PREFIX}/src/liblammps_rccs.so ${INSTALL_PREFIX}/src/liblammps.so
cp -r LICENSE \
    README \
    bench/ \
    doc/ \
    examples/ \
    potentials/ \
    python/ \
    tools/ \
${INSTALL_PREFIX}
cp lib/h5md/LICENSE ${INSTALL_PREFIX}/LICENSE-h5md
cp lib/voronoi/voro++-${VORO_VER}/LICENSE ${INSTALL_PREFIX}/LICENSE-voro++

## latte extra
mkdir -p ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE
cp -r lib/latte/LATTE/{LICENSE_GPL-2.0,latte.in,MATRIX,Manual,Restarts,TBparam,animate,examples,tests,tools} ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE

mkdir -p ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE/bml
cp -r lib/latte/LATTE/bml/{LICENSE.md,install,examples} ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE/bml

mkdir -p ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE/metis-${METIS_VER}
cp -r lib/latte/LATTE/metis-${METIS_VER}/{LICENSE.txt,install} ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE/metis-${METIS_VER}

mkdir -p ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE/qmd-progress
cp -r lib/latte/LATTE/qmd-progress/{LICENSE.md,install,examples} ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE/qmd-progress

```

パッケージリスト

ASPERHE, BODY, CLASS2, COLLOID, COMPRESS, CORESHELL, DIPOLE, GRANULAR
 KSPACE, LATTE, MANYBODY, MC, MEAM, MISC, MOLECULE, MPIIO, OPT, PERI, POEMS
 PYTHON, QE, REAX, REPLICA, RIGID, SHOCK, SNAP, SRD, VORONOI

USER-ATC, USER-AWPMD, USER-CGDN, USER-CGSDK, USER-COLVARS,
 USER-DIFFRACTION, USER-DPD, USER-DRUDE, USER-EFF, USER-FEP,
 USER-H5MD, USER-INTEL, USER-LB, USER-MANIFOLD, USER-MEAMC,
 USER-MESO, USER-MGPT, USER-MISC, USER-MOLFILE, USER-NETCDF,
 USER-OMP, USER-PHONON, USER-QTB, USER-REAXC, USER-SMTBQ,
 USER-SPH, USER-TALLY, USER-UEF

テスト

- シリアルのテスト(via run_tests.py)については通過(legacyテストは除く)
- 並列テストについては、[intel版](#)と同じ方法で実行

注意

- ファイルは /local/api/lx/lammps16Mar18-gnu/ 以下にあります
- 実行バイナリ(lmp_rccs)とライブラリは src/ 以下にあります。(bin/ というシンボリックリンクからもアクセスできます)
- サンプルは samples/ ディレクトリに置いてあります。
- pythonのファイルについてもpython/以下にコピーしました
- lammpsの src/ 内にあったヘッダファイルはまとめて src/ 以下にコピーしてあります。

並列テストに関するコメント(gcc版と同様のエラーが出るものについては太字で表記)

- balance/balance.var.dynamics:** 軽微な(?)数値エラー(**TotEng(3.99e-5), Press(0.00019)**他)

- **balance/balance.kspace:** 数値エラー(**TotEng(0.17), Press(0.62)**他)
- **balance/balance.clock.dynamic:** 軽微な(?)数値エラー(**TotEng(1.23e-5), Press(9.36e-5)**)
- **VICOSITY/nemd.2d:** 数値エラー(**TotEng(0.12), Press(0.35), v_viscl(5.16)**他)
- **USER/eff/ECP/Si2H6/Si2H6.ang:** 途中でフリーズ
- **USER/eff/CH4/ch4_ionized.dynamics:** 途中でフリーズ

その他テスト関連(未実行テスト、エラーが発生するテスト、個別テストに関して)

- mscg: パッケージ未導入
- USER/quip: パッケージ未導入
- kim: パッケージ未導入
- gcmc: パッケージ未導入
- tad/tad: 動作方法別。実際に実行しても動かず。(4バイト変数と8バイト変数のやりとりに関するエラー)
- neb, dpd/dpdrx-shardlow: 動作方法別。スキップ
- imd, USER/lb: 時間がかかりすぎるのでスキップ
- COUPLE, USER/misc/i-pi, USER/misc/grem: スキップ (COUPLE/multiple だけは正常動作確認。他は未検証)
- ASPHERE/tri: ERROR: Illegal neigh_modify command
- ASPHERE/line: ERROR: Illegal neigh_modify command
- ASPHERE/poly: ERROR on proc 0: Neighbor list overflow, boost neigh_modify one
- USER/eff/Li-dendritic: ファイル足りず? 動作させられず
- USER/atc: ファイル足りず
- USER/misc/pimd: 要ディレクトリ作成+検証方法が不明(?)

その他

- vmd molfile plugin の実体は /local/apl/lx/vmd193/lib/plugins/LINUXAMD64/molfile ディレクトリにあります

更新履歴

- 2018/7/4: LAMMPSとLATTEのライセンスは GPLv2以降 だったので問題ありませんでした。
- 2018/7/3: LATTEの内部で利用するMETISのライセンス(Apache License 2.0)とLAMMPSのGPLv2が共存不能であるため、ひとまずLATTEを公開パッケージから外しました(上の手順で該当箇所のコメント指示子を外せばコンパイルは可能ですが、METIS無しでのLATTE導入はおそらく可能ですが、今のところ保留しています)。