

LAMMPS 29Sep21 with GPU support

ウェブページ

<https://www.lammps.org>

バージョン

29Sep21

ビルド環境

- Intel Parallel Studio XE 2018 update 4
- gcc 7.3.1 (devtoolset-7)
- CUDA 11.1 Update 1
- cmake 3.16.3

ビルドに必要なファイル

- lammps-stable_29Sep2021.tar.gz
- (一部ファイルは以下スクリプト中で取得)

ビルド手順

```
#!/bin/sh

VERSION=29Sep21
NAME=lammps-stable_29Sep2021
INSTALL_PREFIX=/local/apl/lx/lammps${VERSION}-CUDA

BASEDIR=/home/users/${USER}/Software/LAMMPS/${VERSION}
LAMMPS_TARBALL=${BASEDIR}/${NAME}.tar.gz

WORKDIR=/work/users/${USER}
LAMMPS_WORKDIR=${WORKDIR}/${NAME}

GPU_ARCH=sm_60
VMD_MOLFILE_INC=/local/apl/lx/vmd193/lib/plugins/include

PARALLEL=12

#-----
umask 0022
export LANG=C

module purge
module load scl/devtoolset-7
module load intel_parallelstudio/2018update4
module load cuda/11.1
module load cmake/3.16.3

export CC=mpiicc
export CXX=mpiicpc
export FC=mpiifort
export MPICC=mpiicc
export MPICXX=mpiicpc
export MPIFC=mpiifort
export PYTHON_EXECUTABLE=/usr/bin/python3

cd ${WORKDIR}
if [ -d ${NAME} ]; then
  mv ${NAME} lammps_erase &
  rm -rf lammps_erase &
fi
```

```

tar xzf ${LAMMPS_TARBALL}

cd ${NAME}
mkdir build && cd build

# Disabled PKGs:
# ADIOS, MDI, VTK: noavail
# MSCG: gsl too old
# MESSAGE: ZeroMQ support not enabled
# QUIP: failed to build
# ML-HDNNP: failed to build
# KIM: CDDL is incompatible with GPL
# KOKKOS: disabled (due to CUDA-aware MPI requirement)

cmake ../cmake \
-DLAMMPS_MACHINE=rccs-cuda \
-DENABLE_TESTING=on \
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \
-DCMAKE_C_COMPILER=mpiicc \
-DCMAKE_CXX_COMPILER=mpiicpc \
-DCMAKE_Fortran_COMPILER=mpiifort \
-DCMAKE_MPI_C_COMPILER=mpiicc \
-DCMAKE_MPI_CXX_COMPILER=mpiicpc \
-DCMAKE_MPI_Fortran_COMPILER=mpiifort \
-DCMAKE_CXX_FLAGS_DEBUG="-Wall -Wextra -g" \
-DCMAKE_CXX_FLAGS_RELWITHDEBINFO="-Wall -Wextra -g -O2 -DNDEBUG" \
-DCMAKE_CXX_FLAGS_RELEASE="-O3 -DNDEBUG" \
-DCMAKE_Fortran_FLAGS_DEBUG="-Wall -Wextra -g" \
-DCMAKE_Fortran_FLAGS_RELWITHDEBINFO="-Wall -Wextra -g -O2 -DNDEBUG" \
-DCMAKE_Fortran_FLAGS_RELEASE="-O3 -DNDEBUG" \
-DCMAKE_C_FLAGS_DEBUG="-Wall -Wextra -g" \
-DCMAKE_C_FLAGS_RELWITHDEBINFO="-Wall -Wextra -g -O2 -DNDEBUG" \
-DCMAKE_C_FLAGS_RELEASE="-O3 -DNDEBUG" \
-DBUILD_SHARED_LIBS=on \
-DBUILD_TOOLS=on \
-DBUILD_MPI=on \
-DBUILD_OMP=on \
-DFFT=MKL \
-DFFT_SINGLE=on \
-DFFT_MKL_THREADS=on \
-DWITH_JPEG=yes \
-DWITH_PNG=yes \
-DWITH_FFmpeg=yes \
-DFFMPEG_EXECUTABLE=/local/apl/lx/ffmpeg-4.4/bin/ffmpeg \
-DWITH_GZIP=yes \
-DPKG_ASPHERE=on \
-DPKG_ATC=on \
-DPKG_AWPMO=on \
-DPKG_BOCS=on \
-DPKG_BODY=on \
-DPKG_BROWNIAN=on \
-DPKG_CG-DNA=on \
-DPKG_CG-SDK=on \
-DPKG_CLASS2=on \
-DPKG_COLLOID=on \
-DPKG_COLVARS=on \
-DPKG_COMPRESS=on \
-DPKG_CORESHELL=on \
-DPKG_DIELECTRIC=on \
-DPKG_DIFFRACTION=on \
-DPKG_DIPOLE=on \
-DPKG_DPD-BASIC=on \
-DPKG_DPD-MESO=on \
-DPKG_DPD-REACT=on \

```

-DPKG_DPD-SMOOTH=on \
-DPKG_DRUDE=on \
-DPKG_EFF=on \
-DPKG_EXTRA-COMPUTE=on \
-DPKG_EXTRA-DUMP=on \
-DPKG_EXTRA-FIX=on \
-DPKG_EXTRA-MOLECULE=on \
-DPKG_EXTRA-PAIR=on \
-DPKG_FEP=on \
-DPKG_GPU=on \
-DGPU_API=cuda \
-DGPU_ARCH=sm_60 \
-DPKG_GRANULAR=on \
-DPKG_H5MD=on \
-DPKG_INTEL=on \
-DPKG_INTERLAYER=on \
-DPKG_KIM=off \
-DDOWNLOAD_KIM=no \
-DPKG_KOKKOS=off \
-DPKG_KSPACE=on \
-DPKG_LATBOLTZ=on \
-DPKG_LATTE=on \
-DDOWNLOAD_LATTE=on \
-DPKG_MACHDYN=on \
-DDOWNLOAD_EIGEN3=on \
-DPKG_MANIFOLD=on \
-DPKG_MANYBODY=on \
-DPKG_MC=on \
-DPKG_MDI=off \
-DPKG_MEAM=on \
-DPKG_MESONT=on \
-DPKG_MESSAGE=on \
-DPKG_MGPT=on \
-DPKG_MISC=on \
-DPKG_ML-HDNNP=off \
-DDOWNLOAD_N2P2=no \
-DPKG_ML-IAP=on \
-DPKG_ML-PACE=on \
-DPKG_ML-QUIP=off \
-DDOWNLOAD_QUIP=no \
-DPKG_ML-RANN=on \
-DPKG_ML-SNAP=on \
-DPKG_MOFFF=on \
-DPKG_MOLECULE=on \
-DPKG_MOLFILE=on \
-DMOLFILE_INCLUDE_DIR=\${VMD_MOLFILE_INC} \
-DPKG_MPIIO=on \
-DPKG_MSCG=off \
-DPKG_NETCDF=on \
-DPKG_OPENMP=on \
-DPKG_OPT=on \
-DPKG_ORIENT=on \
-DPKG_PERI=on \
-DPKG_PHONON=on \
-DPKG_PLUGIN=on \
-DPKG_PLUMED=on \
-DDOWNLOAD_PLUMED=on \
-DPKG_POEMS=on \
-DPKG_PTM=on \
-DPKG_PYTHON=on \
-DPKG_QEQ=on \
-DPKG_QMMM=on \
-DPKG_QTB=on \
-DPKG_REACTION=on \
-DPKG_REAXFF=on \

```

-DPKG_REPLICA=on \
-DPKG_RIGID=on \
-DPKG_SCAFACOS=on \
-DDOWNLOAD_SCAFACOS=yes \
-DPKG_SHOCK=on \
-DPKG_SMTBQ=on \
-DPKG_SPH=on \
-DPKG_SPIN=on \
-DPKG_SRD=on \
-DPKG_TALLY=on \
-DPKG_UEF=on \
-DPKG_VORONOI=on \
-DDOWNLOAD_VORO=yes \
-DPKG_VTK=off \
-DPKG_YAFF=on \
-DBLAS_LIBRARIES="-mkl" \
-DCMAKE_BUILD_TYPE=Release

```

```

#make -j ${PARALLEL}
make VERBOSE=1 -j ${PARALLEL}

```

```

make test # will put error...
make install

```

```

cp -a ../examples ${INSTALL_PREFIX}

```

```

cd ${INSTALL_PREFIX}
for f in etc/profile.d/*; do
  ln -s $f .
done

```

```

cd lib64
if [ -f liblammps_rccs-cuda.so ]; then
  ln -s liblammps_rccs-cuda.so liblammps.so
fi
if [ -f liblammps_rccs-cuda.so.0 ]; then
  ln -s liblammps_rccs-cuda.so.0 liblammps.so.0
fi

```

パッケージ

- 有効なパッケージ

```

ASPHERE ATC AWPMD BOCS BODY BROWNIAN CG-DNA CG-SDK CLASS2 COLLOID COLVARS
COMPRESS CORESHELL DIELECTRIC DIFFRACTION DIPOLE DPD-BASIC DPD-MESO
DPD-REACT DPD-SMOOTH DRUDE EFF EXTRA-COMPUTE EXTRA-DUMP EXTRA-FIX
EXTRA-MOLECULE EXTRA-PAIR FEP GPU GRANULAR H5MD INTEL INTERLAYER KSPACE
LATBOLTZ LATTE MACHDYN MANIFOLD MANYBODY MC MEAM MESONT MESSAGE MGPT MISC
ML-IAP ML-PACE ML-RANN ML-SNAP MOFFF MOLECULE MOLFILE MPIIO NETCDF OPENMP
OPT ORIENT PERI PHONON PLUGIN PLUMED POEMS PTM PYTHON QEQ QMMM QTB REACTION
REAXFF REPLICA RIGID SCAFACOS SHOCK SMTBQ SPH SPIN SRD TALLY UEF VORONOI
YAFF

```

- 無効なパッケージ

- ADIOS, MDI, VTK: skipped
- MSCG: システムの gsl のバージョンでは対応できないため
- MESSAGE: (ZeroMQ のサポートのみ無効)
- QUIP: 自動ビルド失敗
- ML-HDNNP: 自動ビルド失敗
- KIM: ライセンスの問題; CDDL は GPL と混ぜられないため
 - ビルド自体は可能。ただし、ライブラリ(libkim-api)を手動でインストール先にコピーする必要があるそう
- KOKKOS: GPU を利用するには CUDA-aware な MPI が必要なため省略

テスト

ログについては /local/apl/lx/lammps29Sep21-CUDA/Testing 以下にあります。

結果他詳細については CPU 版と共通ですので、そちらをご覧ください。