

## LAMMPS 2Aug23 with GPU support

### ウェブページ

<https://www.lammps.org>

### バージョン

2Aug23

### ビルド環境

- GCC 12.1.1 (gcc-toolset-12)
- Intel MPI 2021.10.0
- CUDA 12.1 update 1

### ビルドに必要なファイル

- lammps-stable\_2Aug2023.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=2Aug23
NAME=lammps-stable_2Aug2023
INSTALL_PREFIX=/apl/lammps/2023-Aug2-CUDA

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

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

VMD_MOLFILE_INC=/home/users/${USER}/Software/VMD/1.9.4/vmd-1.9.4a57/plugins/include

GPU_ARCH=sm_80
PARALLEL=12

#-----
umask 0022
export LANG=C
ulimit -s unlimited

module -s purge
module -s load gcc-toolset/12
module -s load intelmpi/2021.10.0
module -s load cuda/12.1u1

PYTHONEXE=/usr/bin/python3.6m
PYTHONINC=/usr/include/python3.6m

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:
# FFMPEG, ADIOS, MDI, VTK: noavail
# AMOEBA: GPU and FFT single version not available
# ML-HDNNP: failed to build
# ML-IAP: failed to build
# KIM: CDDL is imcompatible with GPL
# MPIIO: not maintained?
# INTEL: not necessary for gcc build

cmake ../cmake \
-DLAMMPS_MACHINE=rccs-cuda \
-DENABLE_TESTING=on \
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \
-DCMAKE_C_COMPILER=gcc \
-DCMAKE_CXX_COMPILER=g++ \
-DCMAKE_Fortran_COMPILER=gfortran \
-DCMAKE_MPI_C_COMPILER=mpicc \
-DCMAKE_MPI_CXX_COMPILER=mpicxx \
-DCMAKE_MPI_Fortran_COMPILER=mpif90 \
-DCMAKE_C_FLAGS_RELEASE="-O3 -DNDEBUG" \
-DCMAKE_CXX_FLAGS_RELEASE="-O3 -DNDEBUG" \
-DCMAKE_Fortran_FLAGS_RELEASE="-O3 -DNDEBUG" \
-DPython_EXECUTABLE=${PYTHONEXE} \
-DPython_INCLUDE_DIR=${PYTHONINC} \
-DLAMMPS_EXCEPTIONS=on \
-DBUILD_SHARED_LIBS=on \
-DBUILD_TOOLS=on \
-DBUILD_MPI=on \
-DBUILD_OMP=on \
-DBUILD_LAMMPS_GUI=off \
-DFFT=FFTW3 \
-DFFT_SINGLE=on \
-DFFT_FFTW_THREADS=on \
-DWITH_JPEG=on \
-DWITH_PNG=on \
-DWITH_GZIP=on \
-DPKG_ADIOS=off \
-DPKG_AMOEBA=off \
-DPKG_ASPHERE=on \
-DPKG_ATC=on \
-DPKG_AWPMMD=on \
-DPKG_BOCS=on \
-DPKG_BODY=on \
-DPKG_BPM=on \
-DPKG_BROWNIAN=on \
-DPKG_CG-DNA=on \
-DPKG_CG-SPICA=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_ELECTRODE=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=\${GPU\_ARCH} \  
-DPKG\_GRANULAR=on \  
-DPKG\_H5MD=on \  
-DPKG\_INTEL=off \  
-DPKG\_INTERLAYER=on \  
-DPKG\_KIM=off \  
-DDOWNLOAD\_KIM=off \  
-DPKG\_KOKKOS=off \  
-DKokkos\_ARCH\_ZEN3=off \  
-DKokkos\_ENABLE\_OPENMP=off \  
-DPKG\_KSPACE=on \  
-DPKG\_LATBOLTZ=on \  
-DPKG\_LEPTON=on \  
-DPKG\_MACHDYN=on \  
-DDOWNLOAD\_EIGEN3=on \  
-DPKG\_MANIFOLD=on \  
-DPKG\_MANYBODY=on \  
-DPKG\_MC=on \  
-DPKG\_MDI=on \  
-DPKG\_MEAM=on \  
-DPKG\_MESONT=on \  
-DPKG\_MGPT=on \  
-DPKG\_MISC=on \  
-DPKG\_ML-HDNNP=off \  
-DDOWNLOAD\_N2P2=off \  
-DPKG\_ML-IAP=off \  
-DPKG\_ML-PACE=on \  
-DPKG\_ML-QUIP=on \  
-DDOWNLOAD\_QUIP=on \  
-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=off \  
-DPKG\_MSCG=on \  
-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=on \  
-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=on \
-DPKG_VTK=off \
-DPKG_YAFF=on \
-DBLA_VENDOR=OpenBLAS \
-DCMAKE_BUILD_TYPE=Release

make VERBOSE=1 -j ${PARALLEL}

export OMP_NUM_THREADS=2

#make test # need to do it separately...
make install

cp -a ../examples ${INSTALL_PREFIX}

cd ${INSTALL_PREFIX}
for f in etc/profile.d/*; do
  if [ -f $f ]; then
    ln -s $f .
  fi
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

ASPHERE ATC AWPMD BOCS BODY BPM BROWNIAN CG-DNA CG-SPICA CLASS2 COLLOID COLVARS COMPRESS CORESHELL DIELECTRIC DIFFRACTION  
 DIPOLE DPD-BASIC DPD-MESO DPD-REACT DPD-SMOOTH DRUDE EFF ELECTRODE EXTRA-COMPUTE EXTRA-DUMP EXTRA-FIX EXTRA-MOLECULE  
 EXTRA-PAIR FEP GPU GRANULAR H5MD INTERLAYER KSPACE LATBOLTZ LEPTON MACHDYN MANIFOLD MANYBODY MC MDI MEAM MESONT MGPT MISC  
 ML-PACE ML-QUIP ML-RANN ML-SNAP MOFFF MOLECULE MOLFILE MSCG 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

## テスト

以下のジョブスクリプトで別途実行しています。

```

#!/bin/sh
#PBS -l select=1:ncpus=16:mpiprocs=8:ompthreads=1:ngpus=2
#PBS -l walltime=24:00:00

VERSION=2Aug23
NAME=lammps-stable_2Aug2023
INSTALL_PREFIX=/apl/lammps/2023-Aug2-CUDA

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

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

VMD_MOLFILE_INC=/home/users/${USER}/Software/VMD/1.9.4/vmd-1.9.4a57/plugins/include

GPU_ARCH=sm_80
PARALLEL=12

```

```
#-----  
umask 0022  
export LANG=C  
ulimit -s unlimited  
  
module -s purge  
module -s load gcc-toolset/12  
module -s load intelmpi/2021.10.0  
module -s load cuda/12.1u1  
  
PYTHONEXE=/usr/bin/python3.6m  
PYTHONINC=/usr/include/python3.6m  
  
cd ${WORKDIR}  
cd ${NAME}  
cd build  
make test # need to do it separately...
```

テストログのコピーは /apl/lammps/2023-Aug2-CUDA/Testing/ に置いています。

37 - SimpleCommands (SEGFAULT)

実際に使う際にはほぼ影響の無いエラーだと思われます。

## メモ

- CPU 版の内容もご確認ください。