

LAMMPS 22Jul2025 Update 1 - Intel

ウェブページ

<https://www.lammps.org>

バージョン

22Jul2025 Update 1

ビルド環境

- GCC 10.3.1 (gcc-toolset-10)
- oneAPI Compiler 2025.2.0
- Intel MPI 2021.16
- GSL 2.8
- MKL 2025.2.0

ビルドに必要なファイル

- lammps-stable_22Jul2025_update1.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=2025-Jul22-u1
NAME=lammps-stable_22Jul2025_update1
INSTALL_PREFIX=/apl/lammps/${VERSION}-intel

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

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

FFMPEG_BIN=/apl/ffmpeg/6.1/bin/ffmpeg
VMD_MOLFILE_INC=/home/users/${USER}/Software/VMD/1.9.4/vmd-1.9.4a57/plugins/include
GSL_ROOT=/apl/gsl/2.8

PARALLEL=12

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

module -s purge

. ~/intel/oneapi/compiler/latest/env/vars.sh # 2025.2.0

module -s load gcc-toolset/10
module -s load compiler-rt/2025.2.0
module -s load intelmpi/2021.16
module -s load gsl/2.8
module -s load mkl/2025.2.0

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 ${NAME}
sed -i -e "s/xHost/march=core-avx2/" \
    -e "s/-fp-model precise//" cmake/CMakeLists.txt
sed -i -e '26i#include "force.h"' unittest/force-styles/test_fix_timestep.cpp
sed -i -e '29i#include "kspace.h"' unittest/force-styles/test_pair_style.cpp
sed -i -e "59i\  -DPython_EXECUTABLE=${PYTHONEXE}" cmake/Modules/Packages/MDI.cmake
mkdir build && cd build

# Disabled PKGs:
# ADIOS, VTK: noavail
# QUIP: The IntelLLVM Fortran compiler is not (yet) supported for building QUIP
# KIM: to remove dependence on libkim-api.so.2
# KOKKOS: to avoid performance degradation of intel package
# SCAFACOS: comiption problem regarding gfortran?

cmake ../cmake \
-DLAMMPS_MACHINE=rccs \
-DENABLE_TESTING=on \
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \
-DCMAKE_C_COMPILER=mpiicx \
-DCMAKE_CXX_COMPILER=mpiicpx \
-DCMAKE_Fortran_COMPILER=mpiifx \
-DCMAKE_C_FLAGS_RELEASE="-O3 -DNDEBUG -march=core-avx2" \
-DCMAKE_CXX_FLAGS_RELEASE="-O3 -DNDEBUG -march=core-avx2" \
-DCMAKE_Fortran_FLAGS_RELEASE="-O3 -DNDEBUG -march=core-avx2" \
-DPython_EXECUTABLE=${PYTHONEXE} \
-DPython_INCLUDE_DIR=${PYTHONINC} \
-DGSL_ROOT_DIR=${GSL_ROOT} \
-DBUILD_SHARED_LIBS=on \
-DBUILD_TOOLS=on \
-DBUILD_MPI=on \
-DBUILD_OMP=on \
-DBUILD_LAMMPS_GUI=on \
-DBUILD_WHAM=on \
-DFFT=MKL \
-DFFT_SINGLE=on \
-DFFT_MKL_THREADS=on \
-DWITH_JPEG=on \
-DWITH_PNG=on \
-DWITH_GZIP=on \
-DWITH_FFMPEG=on \
-DFFMPEG_EXECUTABLE=${FFMPEG_BIN} \
-DPKG_ADIOS=off \
-DPKG_AMOEBA=on \
-DPKG_APIP=on \
-DPKG_ASPHERE=on \
-DPKG_ATC=on \
-DPKG_AWPMO=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_EFF=on \
-DPKG_ELECTRODE=on \
-DPKG_EXTRA-COMMAND=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=off \
-DPKG_GRANULAR=on \
-DPKG_H5MD=on \
-DPKG_INTEL=on \
-DPKG_INTERLAYER=on \
-DPKG_KIM=off \
-DDOWNLOAD_KIM=off \
-DPKG_KOKKOS=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 \
-DDOWNLOAD_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-POD=on \
-DPKG_ML-QUIP=off \
-DDOWNLOAD_QUIP=off \
-DPKG_ML-RANN=on \
-DPKG_ML-SNAP=on \
-DPKG_ML-UF3=on \
-DPKG_MOFFF=on \
-DPKG_MOLECULE=on \
-DPKG_MOLFILE=on \
-DMOLFILE_INCLUDE_DIR=\${VMD_MOLFILE_INC} \
-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_RHEO=on \
-DPKG_RIGID=on \
-DPKG_SCAFACOS=off \
-DDOWNLOAD_SCAFACOS=off \
-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 \
-DBLAS_LIBRARIES="-qmkI" \
-DCMAKE_BUILD_TYPE=Release

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

export OMP_NUM_THREADS=2

make test
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.so ]; then
  ln -s liblammps_rccs.so liblammps.so
fi
if [ -f liblammps_rccs.so.0 ]; then
  ln -s liblammps_rccs.so.0 liblammps.so.0
fi
```

有効なパッケージ

AMOEBa API 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-COMMAND EXTRA-COMPUTE
EXTRA-DUMP EXTRA-FIX EXTRA-MOLECULE EXTRA-PAIR FEP GRANULAR H5MD INTEL
INTERLAYER KSPACE LATBOLTZ LEPTON MACHDYN MANIFOLD MANYBODY MC MDI MEAM MESONT
MGPT MISC ML-PACE ML-POD ML-RANN ML-SNAP ML-UF3 MOFFF MOLECULE MOLFILE NETCDF
OPENMP OPT ORIENT PERI PHONON PLUGIN PLUMED POEMS PTM PYTHON QEQ QMMM QTB
REACTION REAXFF REPLICA RHEO RIGID SHOCK SMTBQ SPH SPIN SRD TALLY UEF VORONOI
YAFF

テスト結果

ログのコピーは [/apl/lammps/2025-Jul22-u1-intel/Testing](#) 以下にあります。

メモ

- 22Jul2025(intel) と同じ手順でビルドしています。テスト結果にも特段の違いは見られません。

