

## LAMMPS 29Oct20

### ウェブページ

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

### バージョン

29Oct20

### ビルド環境

- Intel Parallel Studio XE 2018 update 4
- cmake 3.16.3

### ビルドに必要なファイル

- lammps-29Oct20.tar.gz (lammps-stable.tar.gz を rename)
- (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=29Oct20
NAME=lammps-${VERSION}
INSTALL_PREFIX=/local/apl/lx/lammps${VERSION}

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

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

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

PARALLEL=12

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

module purge
module load intel_parallelstudio/2018update4
module load cmake/3.16.3

export CC=mpiicc
export CXX=mpiicpc
export FC=mpiifort
export MPICC=mpiicc
export MPICXX=mpiicpc
export MPIFC=mpiifort

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

tar zxf ${LAMMPS_TARBALL}

cd ${NAME}
mkdir build && cd build
```

```
# Disabled PKGs:
# ADIOS, QUIP, QMMM, VTK: noavail
# MSCG: gsl too old
# KOKKOS: not sure what this is
# MESSAGE: ZeroMQ support not enabled

cmake ../cmake \
-DLAMMPS_MACHINE=rccs \
-DENABLE_TESTING=on \
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \
-DCMAKE_C_COMPILER=mpiicc \
-DCMAKE_CXX_COMPILER=mpiicpc \
-DCMAKE_Fortran_COMPILER=mpiifort \
-DCMAKE_MPI_C_COMPILER=mpiicc \
-DCMAKE_MPI_CXX_COMPILER=mpiicpc \
-DCMAKE_MPI_Fortran_COMPILER=mpiifort \
-DBUILD_SHARED_LIBS=on \
-DBUILD_TOOLS=on \
-DBUILD_MPI=on \
-DBUILD_OMP=on \
-DFFT=MKL \
-DFFT_SINGLE=on \
-DDOWNLOAD_LATTE=on \
-DDOWNLOAD_SCAFACOS=on \
-DDOWNLOAD_VORO=on \
-DDOWNLOAD_PLUMED=on \
-DDOWNLOAD_EIGEN3=on \
-DMOLFILE_INCLUDE_DIRS=${VMD_MOLFILE_INC} \
-DWITH_JPEG=yes \
-DWITH_PNG=yes \
-DWITH_GZIP=yes \
-DPKG_OPT=on \
-DPKG_USER-OMP=on \
-DPKG_USER-INTEL=on \
-DPKG_GPU=off \
-DPKG_KOKKOS=off \
-DPKG_ASHERE=on \
-DPKG_BODY=on \
-DPKG_CLASS2=on \
-DPKG_COLLOID=on \
-DPKG_COMPRESS=on \
-DPKG_CORESHELL=on \
-DPKG_DIPOLE=on \
-DPKG_GRANULAR=on \
-DPKG_KSPACE=on \
-DPKG_LATTE=on \
-DPKG_MANYBODY=on \
-DPKG_MC=on \
-DPKG_MESSAGE=on \
-DPKG_MISC=on \
-DPKG_MLIAP=on \
-DPKG_MOLECULE=on \
-DPKG_MPIO=on \
-DPKG_PERI=on \
-DPKG_POEMS=on \
-DPKG_PYTHON=on \
-DPKG_QEQ=on \
-DPKG_REPLICA=on \
-DPKG_RIGID=on \
-DPKG_SHOCK=on \
-DPKG_SNAP=on \
-DPKG_SPIN=on \
-DPKG_SRD=on \
-DPKG_USER-ATC=on \
-DPKG_USER-AWPMO=on \
```

```

-DPKG_USER-BOCS=on \
-DPKG_USER-CGDNA=on \
-DPKG_USER-CGSDK=on \
-DPKG_USER-COLVARS=on \
-DPKG_USER-DIFFRACTION=on \
-DPKG_USER-DPD=on \
-DPKG_USER-DRUDE=on \
-DPKG_USER-EFF=on \
-DPKG_USER-FEP=on \
-DPKG_USER-H5MD=on \
-DPKG_USER-LB=on \
-DPKG_USER-MANIFOLD=on \
-DPKG_USER-MEAMC=on \
-DPKG_USER-MESODPD=on \
-DPKG_USER-MESONT=on \
-DPKG_USER-MGPT=on \
-DPKG_USER-MISC=on \
-DPKG_USER-MOFFF=on \
-DPKG_USER-MOLFILE=on \
-DPKG_USER-NETCDF=on \
-DPKG_USER-PHONON=on \
-DPKG_USER-PLUMED=on \
-DPKG_USER-PTM=on \
-DPKG_USER-QTB=on \
-DPKG_USER-REACTION=on \
-DPKG_USER-REAXC=on \
-DPKG_USER-SCAFACOS=on \
-DPKG_USER-SDPD=on \
-DPKG_USER-SMD=on \
-DPKG_USER-SMTBQ=on \
-DPKG_USER-SPH=on \
-DPKG_USER-TALLY=on \
-DPKG_USER-UEF=on \
-DPKG_USER-YAFF=on \
-DPKG_VORONOI=on \
-DBLAS_LIBRARIES="-mk" \
-DCMAKE_BUILD_TYPE=Release

make -j ${PARALLEL}

# to avoid error on COMPILER_SUPPORTSfast=2:INTERNAL= line
sed -i -e "s/line\.split.*line\.rsplit('=','1)'" \
  ../unittest/python/python-capabilities.py \
  ../unittest/python/python-pylammps.py

make test # will put error...
make install

cp -a ../examples ${INSTALL_PREFIX}

# no extra tests... current test suite is designed for developers, not for us
cd ${INSTALL_PREFIX}
for f in etc/profile.d/*; do
  ln -s $f .
done

```

## メモ

- 今回は shared library でのビルドとなっています。実行時には LD\_LIBRARY\_PATH の設定が必要です。
- サンプルやモジュールは LAMMPS\_POTENTIALS の環境変数設定のデフォルトを考慮するようにしました。
- QE 6.5 と組み合わせた QMMM の導入が可能だったかもしれませんが、今回は回避しています。

## テスト

- テスト(lammps-testing)は singularity 内で実行する仕組みとなってしまう、こちらの目的には適さないため実行せず

- 自力で作ることはおそらく可能ではあるものの、それなりの作業量になりそうなので今回は回避
- 不審な結果がでるようでしたら、examples 以下にテストとその結果のサンプルがありますので、それらを使ってご検証ください。
- ユニットテスト(make test)の結果は /local/apl/lx/Testing 以下に配置。87 個でエラー
  - ただし、ほとんどのエラーについては厳しすぎる数値精度の要求のために起こったものと想像される。インテルコンパイラのバージョンを変えても(17, 19, 19.1)特に状況変わらず。
  - reax/c のようにユニットテストで lattice を使うものについては lattice の出力結果が gcc と intel 系で異なるようで、それでエラーとなっている
    - reax/c については read\_data で構造データを読み込んだ場合には大きな数値エラーは発生しないように見える
  - 大きなエラーがあったテストは以下のもの。
    - 6 AtomStyle:AtomStyleTest.body\_nparticle: quarternion の値がヶヶ所だけおかしい。
    - 64 MolPairStyle:coul\_diel: "displace\_atoms all random" 後の力がおかしい。乱数の影響？
    - 211 ManybodyPairStyle:lcbop PairStyle.plain: 良くわからない
  - 以下のテストは上記 lattice の動作の違いによるものと推定。
    - 180 AtomicPairStyle:edip PairStyle.omp
    - 188 AtomicPairStyle:meam\_sw\_spline: PairStyle.Plain
    - 191 AtomicPairStyle:reax\_c PairStyle.plain, PairStyle.omp
    - 192 AtomicPairStyle:reax\_c\_lgvdw PairStyle.plain, PairStyle.omp
    - 193 AtomicPairStyle:reax\_c\_noeq PairStyle.plain, PairStyle.omp

```
lattice      diamond 3.77
region      box block 0 2 0 2 0 2
create_box  2 box
create_atoms 1 box
displace_atoms all random 0.1 0.1 0.1 623426
mass        1 12.0
mass        2 13.0
set type 1 type/fraction 2 0.5 998877
set type 1 charge 0.01
set type 2 charge -0.01
velocity all create 100 4534624 loop geom
```

gcc と intel で作成した lammps バイナリで構造を作ると、以下のような違いが出ていた。

```
--- dump.reaxc-gnu.rdx 2021-03-04 14:57:55.000000000 +0900
+++ dump.reaxc-intel.rdx 2021-03-04 14:57:29.000000000 +0900
@@ -19,7 +19,7 @@
10 1 0.538716 0.255633 0.224506
11 1 0.794884 0.959892 0.252133
12 1 0.734352 0.247648 0.976632
-13 2 0.628096 0.160143 0.0790692
+13 1 0.628096 0.160143 0.0790692
14 2 0.60761 0.39555 0.363303
15 1 0.850337 0.118908 0.384987
16 1 0.870172 0.326989 0.11101
@@ -30,7 +30,7 @@
21 2 0.157099 0.614141 0.118317
22 1 0.0980522 0.863381 0.390315
23 2 0.333814 0.606643 0.34671
-24 1 0.351575 0.866212 0.132087
+24 2 0.351575 0.866212 0.132087
25 1 0.505105 0.495226 0.958289
26 2 0.506033 0.746602 0.241533
27 1 0.777748 0.457362 0.238711
```