

GENESIS 2.0.3

ウェブページ

<https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cbrt/>

バージョン

2.0.3

ビルド環境

- gcc 11.2.1 (gcc-toolset/11)
- MKL 2022.2.1
- HPC-X 2.11 (Open MPI 4.1.4)
 - (実際のビルドでは HPC-X 2.13.1 を使っています。しかし、並列数を増やしたときに問題が発生したため、HPC-X 2.11 に切り替えて対処しています。)
 - (以下の手順でも便宜上 HPC-X 2.11 を使ったとして手順を記述します。)

ビルドに必要なファイル

- genesis-2.0.3.tar.bz2
- tests-2.0.3.tar.bz2

ビルド手順

```
#!/bin/sh

VERSION=2.0.3
BASEDIR=/home/users/${USER}/Software/GENESIS/${VERSION}
SRC_TARBALL=${BASEDIR}/genesis-${VERSION}.tar.bz2
TESTS_TARBALL=${BASEDIR}/tests-${VERSION}.tar.bz2

INSTALLDIR=/apl/genesis/2.0.3

WORKDIR=/gwork/users/${USER}
BUILDDIR=${WORKDIR}/genesis-${VERSION}
TESTSDIR=${WORKDIR}/tests-${VERSION}

PARALLEL_TESTS=8

# -----
umask 0022

module -s purge
module -s load gcc-toolset/11
module -s load mkl/2022.2.1
module -s load openmpi/4.1.4-hpcx/gcc11

export LANG=C
export LC_ALL=C
export OMP_NUM_THREADS=1
#ulimit -s unlimited

cd ${WORKDIR}
if [ -d genesis-${VERSION} ]; then
  mv genesis-${VERSION} genesis-erase
  rm -rf genesis-erase &
fi

if [ -d tests-${VERSION} ]; then
  mv tests-${VERSION} tests-erase
  rm -rf tests-erase &
fi
```

```

tar jxf ${SRC_TARBALL}
tar jxf ${TESTS_TARBALL}

cd ${BUILDDIR}
FC=mpif90 CC=mpicc \
LAPACK_LIBS=" -L${MKLRROOT}/lib/intel64 -Wl,--no-as-needed -lmkl_gf_lp64 -lmkl_gnu_thread -lmkl_core -lgomp -lpthread -lm -ldl" \
./configure --prefix=${INSTALLDIR}

# parallel make does not work
make && make install

ATDYN=${INSTALLDIR}/bin/atdyn
SPDYN=${INSTALLDIR}/bin/spdyn

cd ${TESTSDIR}/regression_test

for f in test.py test_remd.py test_rpath.py test_vib.py test_gamd.py \
    test_analysis/test_analysis.py \
    test_spana/test_spana.py; do
    sed -i -e "s/env python/env python3/" $f
done
sed -i -e "s/env python/env python2/" test_nonstrict.py

# atdyn tests
./test.py      "mpirun -np ${PARALLEL_TESTS} $ATDYN"
./test_remd.py "mpirun -np ${PARALLEL_TESTS} $ATDYN"
./test_rpath.py "mpirun -np ${PARALLEL_TESTS} $ATDYN"
./test_vib.py  "mpirun -np ${PARALLEL_TESTS} $ATDYN"
./test_gamd.py "mpirun -np ${PARALLEL_TESTS} $ATDYN"
./test_nonstrict.py "mpirun -np ${PARALLEL_TESTS} $ATDYN" # ?

# spdyn tests
./test.py      "mpirun -np ${PARALLEL_TESTS} $SPDYN"
./test_remd.py "mpirun -np ${PARALLEL_TESTS} $SPDYN"
./test_rpath.py "mpirun -np ${PARALLEL_TESTS} $SPDYN"
./test_gamd.py "mpirun -np ${PARALLEL_TESTS} $SPDYN"
./test_nonstrict.py "mpirun -np ${PARALLEL_TESTS} $SPDYN" # ?

cd test_analysis
./test_analysis.py ${INSTALLDIR}/bin
cd ../

cd test_spana
./test_spana.py ${INSTALLDIR}/bin
cd ..

```

メモ

- Intel oneAPI Compiler Classic で -xHost 付きでビルドすると以下のようなエラーで abort
 - oneAPI Compiler Classic 2022.2.1, 2022.0.2 の両方で確認。-xHost を外せばこのエラーは発生しない。
 - ulimit -s unlimited をつけて実行したところメモリを食いつぶしてしまったのか、ノードが応答しなくなり、再起動を余儀なくされた。

```

ifort: error #10105: /lustre/home/users/xxx/intel/oneapi/compiler/2022.2.1/linux/bin/intel64/../../bin/intel64/fortcom: core dumped
ifort: warning #10102: unknown signal(-448501680)
ifort: error #10106: Fatal error in /lustre/home/users/xxx/intel/oneapi/compiler/2022.2.1/linux/bin/intel64/../../bin/intel64/fortcom, terminated by
unknown
compilation aborted for at_energy_table_cubic.f90 (code 1)

```

```

ifort: error #10105: /lustre/home/users/xxx/intel/oneapi/compiler/2022.0.2/linux/bin/intel64/../../bin/intel64/fortcom: core dumped
ifort: warning #10102: unknown signal(-902248368)
ifort: error #10106: Fatal error in /lustre/home/users/xxx/intel/oneapi/compiler/2022.0.2/linux/bin/intel64/../../bin/intel64/fortcom, terminated by
unknown
compilation aborted for sp_energy_pme_noopt_1dalltoall.f90 (code 1)

```

-
- 上記エラーを回避した場合でも、インテルコンパイラを使うといくつかのテストでエラーがあったため今回は回避。速度的にもインテルに明確な優位は確認できず。
 - 要求される LAPACK には MKL を利用。ただし、libgomp を使うように設定。libiomp を使う場合は少し速度が落ちるように見えた。(気のせいかもしれないが)
 - (mkl_link_tool -libs -c gnu_f -p yes -o gomp の出力を利用)