

LAMMPS 16Mar18 (stable release) for LX with GPU support (gcc)

ウェブページ

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

バージョン

16Mar18

ビルド環境

- ▶ GCC 5.3.1
- ▶ Intel MKL 2018 Update 2
- ▶ Intel MPI 2017.3.196
- ▶ libjpeg-turbo 1.2.90
- ▶ CUDA 8.0.61

ビルドに必要なファイル

- ▶ lammps-stable.tar.gz (16Mar18)
- ▶ (一部ファイルは以下スクリプト中で取得)

ビルド手順

(2018/7/4: 更新)

```
#!/bin/sh

VERSION=16Mar18
INSTALL_PREFIX=/local/apl/lx/lammps${VERSION}-gnu-CUDA8

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

#WORKDIR=/work/users/${USER}
WORKDIR=/home/users/${USER}/ramdisk
WORKDIR_LAMMPS=${WORKDIR}/lammps-${VERSION}
WORKDIR_LAMMPS_ESC=`echo ${WORKDIR_LAMMPS} | sed -e 's/\//\\\\/g`

PARALLEL=12

module purge
module load mkl/2018.0.2
module load mpi/intelmpi/2018.2.199
module load scl/devtoolset-5
module load cuda/8.0

#-- libs

MKLROOT_ESC=`echo /local/apl/lx/intel2018update2/compilers_and_libraries_2018.2.199/linux/mkl | sed -e 's/\//\\\\/g`
LATTE_GIT= # latte
LATTEDIR=${WORKDIR_LAMMPS}/lib/latte/LATTE
LATTEDIR_ESC=${WORKDIR_LAMMPS_ESC}/lib/latte/LATTE"
METIS_VER=5.1.0
METIS=http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/fetch/sw/metis/metis-\${METIS\_VER}.tar.gz
BML=https://github.com/lani/bml.git
PROGRESS=https://github.com/lani/qmd-progress.git
VMD_PLUGIN_INC=`echo /local/apl/lx/vmd193/lib/plugins/include | sed -e 's/\//\\\\/g` # molfile
VORO_VER=0.4.6 # voronoi
VORO=http://math.lbl.gov/voro+/download/dir/voro+-\${VORO\_VER}.tar.gz

#-----
umask 0022

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

tar xzf ${LAMMPS_TARBALL}
cd lammps-${VERSION}

# setup makefiles, libraries, and external resources
## main
sed -e "/g++_openmpi =/s/.*# rccs = Intel MPI, MKL FFT + g++/" \
  -e "/OMPI_CXX/d" \
  -e "s/^CCFLAGS./CCFLAGS = -g -O3 -fopenmp/" \
  -e "s/^LINKFLAGS./LINKFLAGS = -g -O -fopenmp/" \
  -e "s/^DLAMMPS_GZIP/DLAMMPS_GZIP -DLAMMPS_JPEG/" \
  -e "s/^FFT_INC./FFT_INC = -DFFT_FFTW3 -L${MKLROOT_ESC}/../compiler/lib/intel64 -m64 -" \
  I${MKLROOT_RSC}/include/" \
```

```

-e "s/^FFT_PATH.*FFT_PATH = -L${MKLROOT_ESC}\lib\intel64 -WI,--no-as-needed/" \
-e "s/^FFT_LIB.*FFT_LIB = -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -liomp5 -lpthread -lm -ldl/" \
-e "s/^JPG_LIB.*JPG_LIB = -ljpeg/" \
src/MAKE/OPTIONS/Makefile.g++_openmpi > src/MAKE/MINE/Makefile.rccs

## atc
( cd lib/atc && \
  sed -e s/lammps.linalg/lammps.empty/ Makefile.mpic++ > Makefile.rccs && \
  make -f Makefile.rccs -j ${PARALLEL} && \
  cd ../ )

## awpmd
( cd lib/awpmd && \
  sed -e s/linalg/empty/ Makefile.mpi > Makefile.rccs && \
  make -f Makefile.rccs -j ${PARALLEL} && \
  cd ../ )

## colvars
( cd lib/colvars && \
  make -f Makefile.mpi -j ${PARALLEL} && \
  cd ../ )

## gpu
( cd lib/gpu && \
  sed -e "/^CUDA_ARCH/s/arch=sm.*/arch=sm_60/" \
    -e "/^CUDA_LIB/s/$/ -L\\$(CUDA_HOME)\lib64\stubs/" \
    Makefile.linux > Makefile.rccs && \
  make -f Makefile.rccs -j ${PARALLEL} && \
  sed -i -e "/^gpu_SYSPATH/s/$/ -L\\$(CUDA_HOME)\lib64\stubs/" \
    Makefile.lammps && \
  cd ../ )

## h5md
( cd lib/h5md && \
  make -f Makefile.mpi -j ${PARALLEL} && \
  cd ../ )

## latte (make jobserver not available?)
## METIS, BML, and (qmd-)PROGRESS are also built
( cd lib/latte && \
  git clone ${LATTE_GIT} && \
  cd LATTE && \
  wget ${METIS} && \
  tar xzf metis-${METIS_VER}.tar.gz && \
  cd metis-${METIS_VER} && \
  make config prefix=../install && \
  make install && \
  cd ../ && \
  git clone ${BML} && \
  cd bml && \
  EXTRA_CFLAGS="-fPIC" EXTRA_FFLAGS="-fPIC" sh example_build.sh && \
  cd build/ && \
  make && \
  make install && \
  cd ../ && \
  git clone ${PROGRESS} && \
  cd qmd-progress && \
  EXTRA_FCFLAGS="-fPIC" EXTRA_LINK_FLAGS="-fPIC" CMAKE_PREFIX_PATH=${LATTEDIR}/metis-5.1.0/install PROGRESS_GRAPHLIB=yes PKG_CONFIG_PATH=${LATTEDIR}/bml/install/lib64/pkgconfig ./build.sh
configure && \
  cd build/ && \
  make && \
  cd src/ && \
  gcc -DGLOBAL_DEBUG=PROGRESS_LOG_DEBUG \
    -DMETIS_INDEX_KIND=4 \
    -DMETIS_REAL_KIND=0d0 \
    -O3 -DNDEBUG -fPIC \
    -I${LATTEDIR}/bml/install/include \
    -fopenmp \
    -o CMakeFiles/progress.dir/prg_memory_consumption.c.o \
    -c ${LATTEDIR}/qmd-progress/src/prg_memory_consumption.c && \
  cd ../ && \
  make install && \
  cd ../ && \
  sed -i -e "s/fopenmp/fopenmp -fPIC/" \
    -e "s/^LIB =.*LIB = -L${MKLROOT_ESC}\lib\intel64 -WI,--no-as-needed -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -liomp5 -lpthread -lm -ldl/" \
    -e "s/^METIS =.*METIS = ON/" \
    -e "s/^PROGRESS =.*PROGRESS = ON/" \
    -e "s/.(HOME)/${LATTEDIR_ESC}/" \
    -e "s/metis//" \
    -e "s/install/lib/install/lib64/" \
  makefile.CHOICES && \

```

```

make && \
cd ../ && \
ln -s LATTE/src includelink && \
ln -s LATTE/liblink && \
ln -s LATTE/src/latte_c_bind.o filelink.o && \
echo "latte_SYSINC = -I../lib/latte/LATTE/src -I../lib/latte/LATTE/bml/install/include -I../lib/latte/LATTE/qmd-progress/install/include" > Makefile.lammps && \
echo "latte_SYSLIB = -fopenmp ../lib/latte/filelink.o -llatte -L../lib/latte/LATTE/qmd-progress/install/lib64 -lprogress -L../lib/latte/LATTE/bml/install/lib64 -lbml_fortran -lbml -L../lib/latte/LATTE/metis-5.1.0/install/lib -lmetis" >> Makefile.lammps && \
echo -n "latte_SYSPATH = -fopenmp" >> Makefile.lammps && \
cd ../ )
## meam
( cd lib/meam && \
sed -e s/mpifort/mpif90/ Makefile.mpi > Makefile.rccs && \
make -f Makefile.rccs -j ${PARALLEL} && \
cd ../ )
## molfile
#### plugin location: /local/apl/ix/vmd193/lib/plugins/LINUXAMD64/molfile
( cd lib/molfile && \
sed -i -e "s/molfile_SYSINC.*/molfile_SYSINC=-I$VMD_PLUGIN_INC/" Makefile.lammps && \
cd ../ )
## poems
( cd lib/poems && \
make -f Makefile.g++ -j ${PARALLEL} && \
cd ../ )
## reax
( cd lib/reax && \
make -f Makefile.gfortran -j ${PARALLEL} && \
cd ../ )
## voronoi
( cd lib/voronoi && \
wget ${VORO} && \
tar xzf voro+-${VORO_VER}.tar.gz && \
cd voro+-${VORO_VER} && \
sed -i -e "s/^CFLAGS=.*CFLAGS=-Wall -ansi -pedantic -fPIC/" config.mk && \
make -j ${PARALLEL} && \
cd ../ && \
ln -s voro+-${VORO_VER}/src includelink && \
ln -s voro+-${VORO_VER}/src liblink && \
cd ../ )
#---
# now make lammps
cd src
make yes-all no-ext
make no-KOKKOS \
yes-GPU \
no-LATTE \
yes-VORONOI \
yes-USER-H5MD \
yes-USER-MOLFILE \
yes-USER-NETCDF
make -j ${PARALLEL} rccs
make -j ${PARALLEL} rccs mode=shlib
cd ../
# mkdir and install files
mkdir -p ${INSTALL_PREFIX}/src
cp src/imp_rccs src/liblammps_rccs.so src/*.h ${INSTALL_PREFIX}/src
ln -s ${INSTALL_PREFIX}/src/liblammps_rccs.so ${INSTALL_PREFIX}/src/liblammps.so
cp -r LICENSE \
README \
bench/ \
doc/ \
examples/ \
potentials/ \
python/ \
tools/ \
${INSTALL_PREFIX}
cp lib/h5md/LICENSE ${INSTALL_PREFIX}/LICENSE-h5md
cp lib/voronoi/voro+-${VORO_VER}/LICENSE ${INSTALL_PREFIX}/LICENSE-voro++
## latte extra
mkdir -p ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE
cp -r lib/latte/LATTE/{LICENSE_GPL-2.0,latte.in,MATRIX_Manual,Restarts,TBparam,animate,examples,tests,tools}
${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE
mkdir -p ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE/bml

```

```
cp -r lib/latte/LATTE/bml/{LICENSE.md,install,examples} ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE/bml
mkdir -p ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE/metis-${METIS_VER}
cp -r lib/latte/LATTE/metis-${METIS_VER}/{LICENSE.txt,install} ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE/metis-
${METIS_VER}
mkdir -p ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE/qmd-progress
cp -r lib/latte/LATTE/qmd-progress/{LICENSE.md,install,examples} ${INSTALL_PREFIX}/lib/latte/LATTE/qmd-
progress
```

パッケージリスト

ASPHERE, BODY, CLASS2, COLLOID, COMPRESS, CORESHELL, DIPOLE, GPU, GRANULAR
KSPACE, LATTE, MANYBODY, MC, MEAM, MISC, MOLECULE, MPIIO, OPT, PERI, POEMS
PYTHON, QEQ, REAX, REPLICA, RIGID, SHOCK, SNAP, SRD, VORONOI
USER-ATC, USER-AWPMO, USER-CGDNA, USER-CGSDK, USER-COLVARS,
USER-DIFFRACTION, USER-DPD, USER-DRUDE, USER-EFF, USER-FEP,
USER-H5MD, USER-INTEL, USER-LB, USER-MANIFOLD, USER-MEAMC,
USER-MESO, USER-MGPT, USER-MISC, USER-MOLFILE, USER-NETCDF,
USER-OMP, USER-PHONON, USER-QTB, USER-REAXC, USER-SMTBQ,
USER-SPH, USER-TALLY, USER-UEF

テスト

- ▶ テストの結果は細かい数値の差異を除けばGPU無しバージョンと同じでしたので詳細は割愛させていただきます。内容については[こちら](#)をご参照ください。
- ▶ GPUを使った計算テストは別途 bench/ にある in.rhodo で行いました。(samples/ 以下においてあるものと同じです)

注意

- ▶ ファイルは /local/apl/lx/lammps16Mar18-gnu-CUDA8/ 以下にあります (/local/apl/lx/lammps16Mar18-gnu-CUDA も可)
- ▶ 実行バイナリ(imp_rccs)とライブラリは src/ 以下にあります。(bin/ というシンボリックリンクからもアクセスできます)
- ▶ サンプルは samples/ ディレクトリに置いてあります。
- ▶ pythonのファイルについてもpython/以下にコピーしました
- ▶ lammpsの src/ 内にあったヘッダファイルはまとめて src/ 以下にコピーしてあります。
- ▶ vmd molfile plugin の実体は /local/apl/lx/vmd193/lib/plugins/LINUXAMD64/molfile ディレクトリにあります

更新履歴

- ▶ 2018/7/4: LAMMPSとLATTEのライセンスは GPLv2以降 だったので問題ありませんでした。
- ▶ 2018/7/3: LATTEの内部で利用するMETISのライセンス(Apache License 2.0)とLAMMPSのGPLv2が共存不能であるため、ひとまずLATTEを公開パッケージから外しました(上の手順で該当箇所のコメント 指示子を外せばコンパイルは可能です)。METIS無しでのLATTE導入はおそらく可能ですが、今のところ保留しています。