

Petsc-3.6.3 软件移植

1 简述

Petsc (Parallel Extensible Toolkits for Scientific Computing) , 中文全称为并行可扩展科学计算工具箱, 主要用于在分布式存储环境高效求解偏微分方程组及相关问题。**PETSc** 用 C 语言开发, 支持 Fortran 77/90、C 和 C++编写的串行和并行代码。PETSc 是系列软件和库的集合, 三个基本组件 SLES、SNES 和 TS 本身基于 **BLAS**、**LAPACK**、**MPI** 等库实现。

2 移植步骤

(1) 下载软件包

(2) 执行 configure 命令

```
./configure --with-cc=mpicc --with-fc=mpif90 --with-cxx=mpiCC --known-mpi-shared-libraries=0 --with-single-library=1 --with-shared-libraries=0 --with-blas-lapack-lib=-lxMath_manycore --with-batch=1 --with-64-bit-indices --with-mpi=1 --with-debugging=0 FFLAGS=-OPT:IEEE-arith=1 CFLAGS=-OPT:IEEE-arith=1
```

关键点：指定编译器、指定 blas 和 lapack 库（不能用 lxMath_multicore 库，用该库能编译成功，但运行时会出现段错误）、关闭 debug 选项

(3) 运行 confest-arch-linux2-c-opt

./configure 结束后会生成可执行文件 confest-arch-linux2-c-opt 以及 arch-linux2-c-opt 目录，该目录含有指导 make 编译的规则、变量等信息，最终生成的 petsc 的库也在该路径。

用 bsub 命令提交到神威上运行，用一个进程即可

```
bsub -I -q q_sw_expr -n 1 ./confest-arch-linux2-c-opt
```

(4) 运行 reconfigure-arch-linux2-c-opt.py

运行 confest-arch-linux2-c-opt 结束后会生成 reconfigure-arch-linux2-c-opt.py，需要在登录节点运行该文件，因为神威上不能运行 Python

```
./ reconfigure-arch-linux2-c-opt.py
```

(5) 执行 make

执行 reconfigure-arch-linux2-c-opt.py 后，按屏幕提示输入 make 命令

```
make PETSC_DIR=/home/export/online1/zhangw/pets/test-sw/petsc-3.6.3
PETSC_ARCH=arch-linux2-c-opt test
make PETSC_DIR=/home/export/online1/zhangw/pets/test-sw/petsc-3.6.3
PETSC_ARCH=arch-linux2-c-opt all
```

3 测试

在 petsc-3.6.3/src/ts/examples/tutorials 目录下有测试例子，在 makefile 中加入路径：

```
PETSC_DIR=/home/export/base/swyf/zhangw/online1/pets/test-sw/petsc-3.6.3
PETSC_ARCH=arch-linux2-c-opt
```

然后执行 make ex2 就可以生成可执行文件 ex2，最后使用如下提交命令，即可在神威上运行

```
bsub -I -b -q q_sw_expr -share_size 4096 -host_stack 2048 -n 4 -cgsp 64 ./ex2 -ts_max_steps
10 -ts_monitor -snes_monitor -ksp_monitor
```