

搭建高性能计算环境（六）、应用软件的安装之lammps

- 1, 上传需要的软件包lammps-stable.tar.gz。
- 2, 解压缩并进入安装目录

```
tar xvf lammps-stable.tar.gz
cd lammps-30Oct14
```

- 3, 如果需要reax、poems等模块，可以进入lib额外添加(标准安装可跳过此步骤)。

```
cd lib/reax
修改Makefile.ifort文件第31行为:  F90FLAGS =      -O3 -xHost -ip -no-prec-div -fPIC
make -f Makefile.ifort
```

```
cd ../meam
修改Makefile.ifort文件第30行为:  F90FLAGS =      -O3 -xHost -ip -no-prec-div -fPIC
修改Makefile.lammps.ifort文件第4行:  meam_SYSLIB = -lifcore -lsvml -liompstubs5 -limf
修改Makefile.lammps.ifort文件第5行:  meam_SYSPATH = -L/opt/intel/mkl/lib/intel64/
make -f Makefile.ifort
```

```
cd ../poems
修改Makefile.ifort文件第71行为:  CCFLAGS =      -O3 -xHost -ip -no-prec-div -fPIC
make -f Makefile.icc
```

```
cd ../../src
make yes-reax
make yes-meam
make yes-poems
```

也可添加kspace、misc等模块

```
make yes-kspace
make yes-misc
```

- 4, 编译fftw2xc

```
cd /opt/intel/mkl/interfaces/fftw2xc
make libintel64
```

- 5, 修改src/MAKE/Makefile.mpi

```
# mpi = default MPI compiler, default MPI

SHELL = /bin/sh

# -----
# compiler/linker settings
# specify flags and libraries needed for your compiler

CC =      mpicxx
CCFLAGS =      -O3 -xHost -fno-alias -ip -no-prec-div -unroll0
SHFLAGS =      -fPIC
DEPFLAGS =      -M
```

公告

昵称: iDove
园龄: 1年9个月
粉丝: 5
关注: 1
[+加关注](#)

< 2016年9月 >						
日	一	二	三	四	五	六
28	29	30	31	1	2	3
4	5	6	7	8	9	10
11	12	13	14	15	16	17
18	19	20	21	22	23	24
25	26	27	28	29	30	1
2	3	4	5	6	7	8

搜索

常用链接

- [我的随笔](#)
- [我的评论](#)
- [我的参与](#)
- [最新评论](#)
- [我的标签](#)

我的标签

- [HPC\(6\)](#)
- [md\(3\)](#)
- [linux\(2\)](#)
- [lammps\(1\)](#)
- [mpi\(1\)](#)
- [MS\(1\)](#)
- [ssh\(1\)](#)
- [vasp\(1\)](#)
- [分子动力学\(1\)](#)
- [量化计算\(1\)](#)
- [更多](#)

随笔分类

- [Hadoop](#)
- [HPC\(9\)](#)
- [Linux\(5\)](#)

```
LINK = mpicxx
LINKFLAGS = -O -L/opt/intel/mkl/lib/intel64/
LIB = -lstdc++ -lmkl_core -lmkl_sequential -lmkl_intel_lp64
SIZE = size

ARCHIVE = ar
ARFLAGS = -rc
SHLIBFLAGS = -shared

# -----
# LAMMPS-specific settings, all OPTIONAL
# specify settings for LAMMPS features you will use
# if you change any -D setting, do full re-compile after "make clean"

# LAMMPS ifdef settings
# see possible settings in Section 2.2 (step 4) of manual

LMP_INC = -DLAMMPS_GZIP

# MPI library
# see discussion in Section 2.2 (step 5) of manual
# MPI wrapper compiler/linker can provide this info
# can point to dummy MPI library in src/STUBS as in Makefile.serial
# use -D MPICH and OMPI settings in INC to avoid C++ lib conflicts
# INC = path for mpi.h, MPI compiler settings
# PATH = path for MPI library
# LIB = name of MPI library

MPI_INC =
MPI_PATH =
MPI_LIB =

# FFT library
# see discussion in Section 2.2 (step 6) of manual
# can be left blank to use provided KISS FFT library
# INC = -DFFT setting, e.g. -DFFT_FFTW, FFT compiler settings
# PATH = path for FFT library
# LIB = name of FFT library

FFT_INC = -DFFT_MKL -I/opt/intel/mkl/include/fftw
FFT_PATH =
FFT_LIB = /opt/intel/mkl/lib/intel64/libfftw2xc_double_intel.a

# JPEG and/or PNG library
# see discussion in Section 2.2 (step 7) of manual
# only needed if -DLAMMPS_JPEG or -DLAMMPS_PNG listed with LMP_INC
# INC = path(s) for jpeglib.h and/or png.h
# PATH = path(s) for JPEG library and/or PNG library
# LIB = name(s) of JPEG library and/or PNG library

JPG_INC =
JPG_PATH =
JPG_LIB =

# -----
# build rules and dependencies
# do not edit this section

include Makefile.package.settings
include Makefile.package

EXTRA_INC = $(LMP_INC) $(PKG_INC) $(MPI_INC) $(FFT_INC) $(JPG_INC) $(PKG_SYSINC)
EXTRA_PATH = $(PKG_PATH) $(MPI_PATH) $(FFT_PATH) $(JPG_PATH) $(PKG_SYSPATH)
EXTRA_LIB = $(PKG_LIB) $(MPI_LIB) $(FFT_LIB) $(JPG_LIB) $(PKG_SYSLIB)

# Path to src files
```

随笔档案

2014年11月 (10)

最新评论

- 1. Re:搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP
非常感谢楼主的详细安装信息，按照楼主的方法成功的安装了MS，但是在编译VSAP时报错。报错信息如下： ./preprocess base.f90 -DHOST=\"LinuxIFC\" -DCACHE.....
--安风琴
- 2. Re:搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP
非常感谢楼主，我找了好久，没想到楼主这里写的这么详细！一定要顶上去！！
--huoxing487
- 3. Re:搭建高性能计算环境 (一)、Linux操作系统的安装和配置
博主，你真辛苦，这里的10篇笔记对我们做计算的人来说，是极大的帮助。
只是第一，二篇的图片不能显示。
--coffeeetan

阅读排行榜

- 1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(989)
- 2. 搭建高性能计算环境 (三)、安装intel编译器和mpi(909)
- 3. 搭建高性能计算环境 (九)、应用软件的安装之gaussian 09(596)
- 4. 搭建高性能计算环境 (八)、应用软件的安装之gromacs(565)
- 5. 搭建高性能计算环境 (五)、应用软件的安装之Amber12(528)

评论排行榜

- 1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(2)
- 2. 搭建高性能计算环境 (一)、Linux操作系统的安装和配置(1)

推荐排行榜

- 1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(1)
- 2. 搭建高性能计算环境 (十)、应用软件的安装之Wien2k(1)
- 3. 搭建高性能计算环境 (九)、应用软件的安装之gaussian 09(1)

```
vpath %.cpp ..
vpath %.h ..

# Link target

$(EXE): $(OBJ)
    $(LINK) $(LINKFLAGS) $(EXTRA_PATH) $(OBJ) $(EXTRA_LIB) $(LIB) -o $(EXE)
    $(SIZE) $(EXE)

# Library targets

lib:    $(OBJ)
    $(ARCHIVE) $(ARFLAGS) $(EXE) $(OBJ)

shlib:  $(OBJ)
    $(CC) $(CCFLAGS) $(SHFLAGS) $(SHLIBFLAGS) $(EXTRA_PATH) -o $(EXE) \
    $(OBJ) $(EXTRA_LIB) $(LIB)

# Compilation rules

%.o:%.cpp
    $(CC) $(CCFLAGS) $(SHFLAGS) $(EXTRA_INC) -c $<

%.d:%.cpp
    $(CC) $(CCFLAGS) $(EXTRA_INC) $(DEPFLAGS) $< > $@

%.o:%.cu
    $(CC) $(CCFLAGS) $(SHFLAGS) $(EXTRA_INC) -c $<

# Individual dependencies

DEPENDS = $(OBJ:.o=.d)
sinclude $(DEPENDS)
```

6, 编译

make mpi -j4

7, 设置环境变量, 需要重新登陆后生效。

在/etc/profile文件末尾添加如下行:

```
export PATH=/opt/lammps-30Oct14/src:$PATH
```

8, 测试

```
cd /opt/lammps-20Oct14/bench
mpirun -np 4 lmp_mpi <in.eam
```

正常运行结束, 说明安装成功。

lammps下载地址:

<http://lammps.sandia.gov/tars/lammps-stable.tar.gz>

分类: [HPC](#)

标签: [HPC](#), [md](#), [lammps](#)

好文要顶

关注我

收藏该文



iDove

关注 - 1

粉丝 - 5

0

0

[+加关注](#)[« 上一篇: 搭建高性能计算环境 \(五\)、应用软件的安装之Amber12](#)[» 下一篇: 搭建高性能计算环境 \(七\)、应用软件的安装之MS](#)

posted @ 2014-11-19 14:30 iDove 阅读(385) 评论(0) 编辑 收藏

[刷新评论](#) [刷新页面](#) [返回顶部](#)

注册用户登录后才能发表评论, 请 [登录](#) 或 [注册](#), [访问网站首页](#)。

【推荐】50万行VC++源码: 大型组态工控、电力仿真CAD与GIS源码库

【活动】硅谷IT教育平台Udacity邀请您来免费上课

【推荐】移动直播百强八成都在用融云即时通讯云

【推荐】报表开发有捷径: 快速设计轻松集成, 数据可视化和交互

【推荐】网易云信--一天开发一个微信, 独创1对1技术顾问让开发加速



最新IT新闻:

- 三星专利: 让智能手机同时运行Android和Windows Mobile系统
- 施普林格·自然集团回应: 韩春雨事件尚无最终结果
- 苹果香港网站页面意外出现新一代iPhone正式名称
- 2016微博用户研究: 新欢、旧爱、核心价值与迫切之疾
- 沃尔沃将向其它汽车制造商出售无人驾驶汽车技术

» 更多新闻...



90%的开发者选择极光推送
不仅是集成简单、24小时一对一技术支持

最新知识库文章:

- 程序猿媳妇儿注意事项
- 可是姑娘, 你为什么要编程呢?
- 知其所以然 (以算法学习为例)
- 如何给变量取个简短且无歧义的名字
- 编程的智慧

» 更多知识库文章...

Copyright ©2016 iDove