**Lammps在曙光6000上的安装**

——国家超级计算深圳中心

**一，安装FFTW**

1，下载fftw-2.1.5.tar.gz       （[www.fftw.org](http://www.fftw.org/)，[FFTW](http://www.fftw.org/)是用来计算一维或者多维的离散傅里叶变换，输入可以为实数序列也可以为复数序列的C语言的子函数库，FFTW是免费软件，是作为fft函数库的各种应用的上佳选择。）

2，tar -zvxf fftw-2.1.5.tar.gz

cd fftw-2.1.5

3，./configure --prefix=/home-gg/users/nscc39\_FHJ/fftw --enable-double

(不推荐./configure --enable-float --enable-type-prefix --prefix=/usr/local/fftw --with-gcc --disable-fortran的方式，否则易导致lammps安装时出现cannot open source file "fftw.h"的错误)( --enable-double表示要安装双精版的FFTW)

4，make

make install

（这里无需设置环境变量）

**二，安装OpenMPI**

这里采用系统安装的Openmpi，故安装从略，但需在.bashrc中配置环境变量，如下：

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

source /home-gg/compiler/intel/composer\_xe\_2011\_sp1.7.256/bin/ifortvars.sh intel64

source /home-gg/compiler/mpi/openmpi-1.4.4-intel.sh

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

source .bashrc生效

**三，安装lammps**

1,tar xvzf lammps.tar.gz

2, cd lammps\*\*

3, cd src

4, vi MAKE/Makefile.openmpi #这里很多makefile，根据机器合理选择

修改内容如下：

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

CC = /home-gg/compiler/mpi/openmpi-1.4.4-intel/bin/mpic++

LINK = /home-gg/compiler/mpi/openmpi-1.4.4-intel/bin/mpic++

MPI\_INC = -I/home-gg/compiler/mpi/openmpi-1.4.4-intel/include/

MPI\_PATH = -L/home-gg/compiler/mpi/openmpi-1.4.4-intel/lib/

MPI\_LIB = -lmpi -lmpi\_cxx

FFT\_INC = -I/home-gg/users/nscc39\_FHJ/fftw/include -DFFT\_FFTW3

FFT\_PATH =-L/home-gg/users/nscc39\_FHJ/fftw/lib

FFT\_LIB = -lfftw3 -lfftw3\_mpi

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

保存。

5，src目录下make openmpi生成执行文件lmp\_openmpi

6, 提交作业：

\*直接提交命令：mpirun –np 4 ./lmp\_openmpi <in.chain ( in.chain为输入文件)

\*LSF提交，书写脚本test.lsf：

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

#!/bin/sh

APP\_NAME=intelg\_mid

NP=12

NP\_PER\_NODE=4

RUN="./lmp\_openmpi < in.chain"

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

bsub test.lsf （提交）

bjobs （查看）

至此，完毕！

孙德林额外需求：

###############################################################################

上述过程完成后，src目录下：

make yes-standard

make no-gpu

make no-poems

make no-meam

make no-reax

最后再编译：

make openmpi 重新生成lmp\_openmpi

###############################################################################

**其他命令：**

make package 查看和package相关的make选项

make yes-XXX 默认安装有很多安装包是没有安装的，可以通过该命令来安装，如make

yes-standard安装常用标准包

make no-XXX默认安装中有很多安装包是没有必要，可以通过该命令来卸载，如make

no-gpu卸载gpu包

make clean

make clean-all 重新安装前清除中间目标文件

make -i 安装时忽略错误，一般不推荐（i~ignore）