

lammps 在 AIX6.1 系统上的安装

中国科学技术大学 超级运算中心

张运动 zhangzyd@ustc.edu.cn

2012 年 9 月

Lammps 软件官网: <http://lammps.sandia.gov/>

网上对于 lammps 软件在 windows、Linux 系统上的安装已有很多详细的介绍，在此不再赘述，请参考进行安装与使用。而 lammps 官网以及软件包内都没有详细的关于此软件在基于 power6 处理器的 AIX 系统上的编译安装方法和介绍。因此，在此记录一下我的安装过程。

一、 软件测试安装环境:

操作系统: IBM AIX6.1

计算网络: Infiniband

编译器: IBM XL C/C++ Enterprise Edition、IBM XL Fortran Enterprise Edition

MPI 并行计算环境: IBM Parallel Environment(PE)

数值函数库: MASS、BLAS、ESSL、PESSL 等

作业管理系统: TWS LoadLeveler

Lammps 软件版本: lammps-9Dec11

二、 软件安装:

1. 从 lammps 软件官网下载源码包文件 lammps.tar，上传到服务器上

个人帐号目录下，并解压得到 lammps-9Dec11 目录软件。

2. 进入 lammps-9Dec11/src/MAKE 目录，这里有各种系统环境下的 Makefile.* 文件可供参考，也有 Makefile.power5 的文件，但没有 Makefile.power6。在此可以拷贝 .power5 的文件保存成 .power6 以做参考和修改。

```
$ cp Makefile.power5 Makefile.power6
$ vi Makefile.power6
```

修改后的文件如下：

```
# power6 = IBM Power6 machine, mpCC, FFTW
SHELL = /bin/sh
.SUFFIXES: .cpp .u

# -----
# compiler/linker settings
# specify flags and libraries needed for your compiler
CC = mpCC_r -q64
CCFLAGS = -O3 -qnoipa -qstrict
DEPFLAGS = -M -c
LINK = $(CC)
LINKFLAGS = $(CCFLAGS)
LIB = -lm
ARCHIVE = ar -X64
ARFLAGS = -rc
SIZE = size -X64

# -----
# LAMMPS-specific settings
# specify settings for LAMMPS features you will use
# if you change any -D setting, do full re-compile after "make clean"
# LAMMPS ifdef settings, OPTIONAL
# see possible settings in doc/Section_start.html#2_2 (step 4)
LMP_INC = -DLAMMPS_GZIP -D_ISOC99_SOURCE -D_STDC_FORMAT_MACROS

# MPI library, REQUIRED
# see discussion in doc/Section_start.html#2_2 (step 5)
# can point to dummy MPI library in src/STUBS as in Makefile.serial
# INC = path for mpi.h, MPI compiler settings
# PATH = path for MPI library
```

```

# LIB = name of MPI library
MPI_INC =      -I/usr/lpp/ppe.poe/include
MPI_PATH =    -L/usr/lpp/ppe.poe/lib
MPI_LIB =

# FFT library, OPTIONAL
# see discussion in doc/Section_start.html#2_2 (step 6)
# 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 =
FFT_PATH =
FFT_LIB =

# -----
# build rules and dependencies
# no need to edit this section
include Makefile.package.settings
include Makefile.package

EXTRA_INC = $(LMP_INC) $(MPI_INC) $(FFT_INC)
EXTRA_PATH = $(MPI_PATH) $(FFT_PATH)
EXTRA_LIB = $(MPI_LIB) $(FFT_LIB)
# Link target
$(EXE): $(OBJ)
        $(LINK) $(LINKFLAGS) $(OBJ) -o $(EXE)
        $(SIZE) $(EXE)
# Library target
lib:  $(OBJ)
        $(CC) $(CCFLAGS) $(EXTRA_INC) -c $<
%.o:%.cpp
        $(CC) $(CCFLAGS) $(EXTRA_INC) -c $<
%.d:%.cpp
        $(CC) $(CCFLAGS) $(EXTRA_INC) $(DEPFLAGS) $< -MF $@
# Individual dependencies
DEPENDS = $(OBJ:.o=.d)
sinclude $(DEPENDS)

```

FFTW 函数库的设置请保留为空，这样软件编译安装时会使用 lammps-9Dec11 安装文件里自带的 fftw 函数库，具体请看官网介绍。

3. 修改完成后，进入 lammps-9Dec11/src 目录，在此执行如下命令开

始安装:

```
$ gmake power6
```

执行结束后, 会在当前目录下生成目录 `Obj_power6` 以及可执行文件 `Imp_power6`, 安装过程中, 若遇到出错, 请根据错误提示信息分析改正。

```
$ ls -l Imp_power6
```

```
-rwxr-xr-x    1 pirate   nic           5742290 Sep 17 14:30 Imp_power6
```

在个人账号的根目录下创建 `bin` 目录, 并将 `Imp_power6` 拷贝到 `bin` 目录下, 然后设置相应环境变量, 以后就可以直接调用 `Imp_power6` 命令了。

4. 程序测试:

Lammps 安装文件目录下, 有各种计算模型的参考算例, 随便找一个进行测试。在此以 `/lammps-9Dec11/examples/nemd/` 目录下的文件为例进行测试。

创建通过作业管理系统 `LoadLeveler` 相关命令提交作业时需要的脚本文件:

```
$ vi lammps-test.cmd
```

脚本如下:

```
# @ job_type = parallel
# @ environment = COPY_ALL
# @ output = step1.log
# @ error = step1.error
# @ node = 2
# @ tasks_per_node = 8
# @ wall_clock_limit = 600000
# @ notification = never
# @ class = large
# @ queue
```

```
ulimit -d unlimited  
/usr/bin/poe Imp_power6 <in.nemd
```

提交作业：

```
$ llsubmit lammps-test.cmd
```

待作业运行完成后，会在当前目录下生成文件 `log.lammps`，查看输出结果是否正常即可。

三、 参考信息：

Lammps 软件官网: <http://lammps.sandia.gov/>