

科学与工程计算中心 LAMMPS 使用指南

- 1、以下内容中 `hpc-user` 表示用户已开通的高性能帐号；`login01` 表示登陆节点；
- 2、文件及文件夹命名方式仅供参考；
- 3、在开始操作之前，建议使用者熟悉 Linux 操作的几个常用命令（例如：`vi` 或 `vim`、`cd`、`mkdir`、`ls`、`pwd` 等）。

- 1、在电脑上用 Xshell 客户端（或其他类似软件）登陆高性能账号。
- 2、在账号下创建放计算任务的文件夹（该名称可以用模型名称命名或者根据自己习惯命名）：

```
hpc-user@login01:~> mkdir lammps
```

- 3、创建后进入该文件夹：

```
hpc-user@login node:~> cd lammps
```

- 4、提交一个 lammps 任务需要输入文件 `input`、`结构文件 data`、`势函数文件`和`脚本文件`。前三者一般需要用户根据自己的算例自行由本地上传。用 FTP 工具（可选择 `xftp`）登录高性能帐号，将文件上传至该文件夹下。
- 5、如用户没有自己的算例或只是单纯想测试 lammps 性能，可采用软件目录提供的模板算例。在 `/share/apps/lammps/20181212/bench` 文件夹下把文件 `in.lj` 复制至当前文件夹（句末的点也需要输入，注意 `cp` 后、`.`前有空格，其他分区的路径将 `home-xx` 中的 `xx` 换成所在分区的名称即可）：

```
hpc-user@login01:~lammps> cp /share/apps/lammps/20181212/bench/in.lj .
```

- 6、将 `/share/apps/lammps/20181212/src` 文件夹下面的 `lmp_mpi`，拷贝到当前文件夹。
- 7、创建或拷贝提交作业的脚本文件 `lammps.lsf`

输入字母“i”，进入编辑模式。脚本内容如下，部分内容需要根据情况进行修改：

```
#!/bin/bash
#BSUB -q short
#BSUB -n 80
#BSUB -e %J.err
#BSUB -o %J.out
#BSUB -R "span[ptile=40]"
hostfile=`echo $LSB_DJOB_HOSTFILE`
```

```
NP=`cat $hostfile | wc -l`  
module load intel/2018.4  
module load mpi/intel/2018.4  
export OMP_NUM_THREADS=80  
mpirun -np $NP lmp_mpi -in in.lj > output
```

8、按下键盘上的 **esc** 键后，输入 **:wq** 保存 `lammps.lsf` 文件，并退出。

9、提用 `bsub` 命令提交作业脚本：

```
hpc-user@login01:~/lammps> bsub < lammps.lsf
```

10、如果提交正确，则会出现“`Job <12345> is submitted to queue .`”内容（其中 `Job` 后面的 `<数字>` 为 `JobID`，在计算出现问题时，请及时告知 `JobID`，保留计算的输出文件）。

11、查看任务是否计算完成，可以使用 `bjobs -l JobID` 命令（当出现：`Done successfully. The CPU time used is xxxx seconds` 说明计算结束）：

```
hpc-user@login node:~/lammps> bjobs -l 12345
```

```
@gs0110:~/lammps> bjobs -l 09  
Job <09>, User <[redacted]>, Project <default>, Application <Gapp>, Status  
<DONE>, Queue <intelG_mid>, Job Priority <50>, Comma  
nd <lammps-2019Aug07_GG.lsf>, Share group charged </s  
ofttestgg>  
Thu Jan 2 18:10:43 2020: Submitted from host <gs0110>, CWD <$/HOME/lammps>, Out  
put File </home-gg/users/[redacted]/lammps/output.%J>  
, Notify when job ends, 24 Processors Requested, Requ  
ested Resources < span[ptile=12] >;  
Thu Jan 2 18:10:50 2020: Started on 24 Hosts/Processors <12*gg1037> <12*gg1110  
>, Execution Home </home-gg/users/[redacted]>, Execut  
ion CWD </home-gg/users/[redacted]/lammps>;  
Thu Jan 2 18:11:26 2020: Done successfully. The CPU time used is 531.8 seconds
```

12、如果计算成功，在输出文件 `output` 的最后会出现如下部分：

```
Pair time (%) = 823.012 (13.5304)  
Bond time (%) = 8.88893 (0.146135)  
Neigh time (%) = 4433.29 (72.8836)  
Comm time (%) = 731.806 (12.031)  
Outpt time (%) = 0.392421 (0.00645143)  
Other time (%) = 85.3095 (1.4025)  
  
Nlocal: 625 ave 650 max 606 min  
Histogram: 1 0 2 1 2 0 0 1 0 1  
Nghost: 6631.5 ave 6687 max 6580 min  
Histogram: 1 1 0 2 0 1 1 0 1 1  
Neighs: 176464 ave 186260 max 172513 min  
Histogram: 3 2 0 0 1 1 0 0 0 1
```

Total # of neighbors = 1411708

Ave neighs/atom = 282.342

Ave special neighs/atom = 4.8

Neighbor list builds = 500000

Dangerous builds = 0

13、计算完成后，用 FTP 工具将文件下载后，进行分析。