

“启明”

lammps

手册

编写时间：2023 年 10月

一、 介绍	3
1.1. 简介	3
1.2. 启明的lammeps	3
二、 使用软件	3
2.1. 测试输入文件样例	3
2.2. 加载该软件	3
三、 作业样例	4
3.1. 提交脚本	4
3.2. 提交并查看作业	4
3.3. 作业结果	4
四、 注意事项	5
4.1. 关于测试样例	5
4.2. 联系方式	5

一、介绍

1.1. 简介

LAMMPS是一个经典的分子动力学代码，可以模拟液体中的粒子，固体和汽体的系综。也可以采用不同的力场和边界条件来模拟全原子，聚合物，生物，金属，粒状和粗料化体系。LAMMPS可以计算的体系小至几个粒子，大到上百万甚至是上亿个粒子。LAMMPS作为一款并行粒子模拟器，可以在原子，介观和连续介质尺度上开展高效模拟。在计算能力和效率方面，LAMMPS可以支持十亿级原子规模的计算，可同时调用上万个核进行计算。

更多内容，请参考官方网站：<https://www.lammps.org/>

1.2. 启明的lammps

启明集群上面已经安装配置好了2022.6版本的lammps软件. 软件所在位置：
`/share/apps/lammps`

二、使用软件

2.1. 测试输入文件样例

输入样例文件为`in.lj`，该文件位于：`/share/apps/lammps/testjob`，用户可自行下载该文件到自己目录，进行测试。

2.2. 加载该软件

启明module已经做好配置，目前有以下处理器版本：

(1) 处理器型号：Intel Xeon Gold 可用队列：38、ot38、2t50c

对应软件编译版本：`lammps/il-2022.6`

(2) 处理器型号：Intel Xeon E5 可用队列：v3-64、v3-128

对应软件编译版本：`lammps/e5-2022.6`

(3) 处理器型号：Intel Xeon E7 可用队列：v3-6t

对应软件编译版本：`lammps/e7-2022.6`

该文档提交cpu-e5版本测试：

直接执行：`module load lammps/e5-2022.6`，即可使用该软件。

```
[ccse-yangyc@b04u17l ~]$ module load lammps/e5-2022.6
Loading compiler version 2022.1.0
Loading tbb version 2021.7.0
Loading compiler-rt version 2022.2.0
Loading oclfpga version 2022.2.0
  Load "debugger" to debug DPC++ applications with the gdb-oneapi debugger.
  Load "dpl" for additional DPC++ APIs: https://github.com/oneapi-src/oneDPL
Loading mpi version 2021.6.0

Loading lammps/e5-2022.6
  Loading requirement: python/anaconda3/2022.10 cmake/3.25.2 tbb/latest compiler-rt/latest oclfpga/latest compiler/2022.1.0 mpi/2021.6.0
[ccse-yangyc@b04u17l ~]$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
 1) python/anaconda3/2022.10   3) tbb/latest                 5) oclfpga/latest            7) mpi/2021.6.0
 2) cmake/3.25.2              4) compiler-rt/latest        6) compiler/2022.1.0        8) lammps/e5-2022.6
[ccse-yangyc@b04u17l ~]$
```

三、 作业样例

3.1. 提交脚本

提交脚本文件为lammps-e5-2022.lsf, 该文件位于:

/share/apps/lammps/testjob, 用户可自行下载该文件到自己目录, 进行测试。

脚本内容:

```
#!/bin/bash
#BSUB -J lammps-test
#BSUB -q v3-64
#BSUB -n 24
#BSUB -e %J.err
#BSUB -o %J.out
#BSUB -R "span[ptile=24]"
```

```
module load lammps/e5-2022.6
```

```
date > time.out
```

```
mpirun -np $LSB_DJOB_NUMPROC lmp_mpi < in.lj > $LSB_JOBID.log 2>&1
```

```
date >> time.out
```

3.2. 提交并查看作业

```
[ccse-yangyc@a04u28l testjobs]$ bsub < lammps-e5-2022.lsf
Job <79725> is submitted to queue <v3-64>.
[ccse-yangyc@a04u28l testjobs]$ bjobs
JOBID  USER  STAT  QUEUE  FROM_HOST  EXEC_HOST  JOB_NAME  SUBMIT_TIME
79725  ccse-ya  PEND  v3-64  a04u28l    a04u28l    *mmps-test  Oct 20 18:34
```

3.3. 作业结果

结果文件为79725.log

```

Time step      : 0.005
Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 2.689 | 2.699 | 2.714 Mbytes
  Step      Temp      E_pair      E_mol      TotEng      Press
    0      1.44      -6.7733681      0      -4.6134356      -5.0197073
   100     0.7574531     -5.7585055      0     -4.6223613      0.20726105
Loop time of 0.274382 on 24 procs for 100 steps with 32000 atoms

Performance: 157444.651 tau/day, 364.455 timesteps/s
99.4% CPU use with 24 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:
Section | min time | avg time | max time | %varavg | %total
-----|-----|-----|-----|-----|-----
Pair    | 0.21084  | 0.22267  | 0.23336  | 1.1      | 81.15
Neigh   | 0.019053 | 0.019944 | 0.020586 | 0.3      | 7.27
Comm    | 0.015218 | 0.026484 | 0.039338 | 3.5      | 9.65
Output  | 6.3127e-05 | 0.00013437 | 0.00023994 | 0.0      | 0.05
Modify  | 0.0042154 | 0.0044406 | 0.0046745 | 0.2      | 1.62
Other   |           | 0.000712 |           |           | 0.26

Nlocal:      1333.33 ave      1369 max      1287 min
Histogram: 1 2 2 1 2 4 4 3 4 1
Nghost:      3223.54 ave      3277 max      3182 min
Histogram: 2 0 3 9 4 2 0 0 2 2
Neighs:      50118 ave      52254 max      48331 min
Histogram: 1 3 1 5 6 1 2 4 0 1

Total # of neighbors = 1202833
Ave neighs/atom = 37.588531
Neighbor list builds = 5
Dangerous builds not checked
Total wall time: 0:00:00

```

四、 注意事项

4.1. 关于测试样例

- 本文档测试样例，只是验证改软件能正常运行。
- 欢迎使用该软件的用户，提供更加好的样例，以便提高该软件的使用效率。

4.2. 联系方式

- 本文档由科学与工程计算中心编写，联系邮箱：hpc@sustech.edu.cn，联系人：谢作扬，电话：0755-88015831