

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；`login node` 表示不同分区登录节点；
- 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，一些用户在登录后还会有进一步消息显示用户类型、剩余核数和账户到期时间。
- 2、若不知道自己的高性能帐号在哪个分区，登陆帐号以后输入：`pwd`，可以看到如下图，`home-xx` 后面的 `xx` 就是高性能帐号所在的分区（图中为 `GG` 分区）：

```
@gcn01:~> pwd  
/home-gg/users/
```

- 3、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@login node:~> mkdir lammps
```

- 4、创建后进入该文件夹：

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

```
@gs0110:~> mkdir lammps  
@gs0110:~> cd lammps  
@gs0110:~/lammps>
```

- 5、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。
- 6、如用户没有自己的算例或只是单纯想测试 `lammps` 性能，可采用中心提供的模板算例。在 `/home-gg/soft/packagedir/lammps/lammps-2019Aug07/bin` 文件夹下把文件 `input`、`data.fcc+V` 和 `2004-eam-Zhou` 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@login node:~lammps> cp /home-gg/soft/packagedir/lammps/lammps-2019Aug07/bin/input .
hpc-user@login node:~lammps> cp /home-gg/soft/packagedir/lammps/lammps-2019Aug07/bin/data.fcc+V .
hpc-user@login node:~lammps> cp /home-gg/soft/packagedir/lammps/lammps-2019Aug07/bin/2004-eam-Zhou .
```

```
@gs0110:~/lammps> cp /home-gg/soft/packagedir/lammps/lammps-2019Aug07/bin/input .
@gs0110:~/lammps> cp /home-gg/soft/packagedir/lammps/lammps-2019Aug07/bin/data.fcc+V .
@gs0110:~/lammps> cp /home-gg/soft/packagedir/lammps/lammps-2019Aug07/bin/2004-eam-Zhou .
@gs0110:~/lammps> ls
2004-eam-Zhou data.fcc+V input
```

7、创建或拷贝提交作业的脚本文件 lammps-2019Aug07_GG.lsf（也可在 Windows 系统写好以后用 FTP 工具上传；现以 GG 分区直接从公共目录中拷贝 2019Aug07 版本为例），GG 分区 LAMMPS 软件脚本的路径在 `/home-gg/soft/jobscripts` 中。先查看脚本是否存在，图中 lammps-2019Aug07_GG.lsf 即为所需脚本：

```
nsc722_TEST@gcn02:~> ls /home-gg/soft/jobscripts
Gaussian09D01  gromacs-5.1.5_GG.lsf  lammps-2019Aug07_GG.lsf  qe-6.3_GG.lsf
MS             gromacs_2018_GG.lsf  minimap-2.lsf           siesta-4.0_GG.lsf
VASP5.4.1     lammps-2018Mar16_GG.lsf  nwchem-6.6_GG.lsf      vasp-5.4.1.lsf
nsc722_TEST@gcn02:~>
```

8、采用您最熟悉的方式将上述脚本拷贝至需要提交任务的文件夹中（若使用下述方法，注意句末的点也需要输入，**cp** 后、**.**前有空格）：

```
hpc-user@login node:~lammps> cp /home-gg/soft/jobscripts/lammps-2019Aug07_GG.lsf .
```

9、修改模板脚本：

```
hpc-user@login node:~lammps> vim lammps-2019Aug07_GG.lsf
```

10、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：

注意：

1、`APP_NAME=intelG_mid` 为提交作业计算的队列，不同的分区、不同的核数所使用的队列不相同，参见各分区提交作业脚本及队列说明；

2、`NP=24`，`NP_PER_NODE=12`：NP 为任务运行的总核数，NP_PER_NODE 为该分区中每个节点的核数。可以根据任务的需要进行修改 NP（详细可参见各分区提交作业脚本及队列说明；）；

`input, output`：为输入、输出文件，根据需计算的任务名称修改，该名称的输入文件需首先存在。

```
#!/bin/bash
APP_NAME=intelG_mid
NP=24
NP_PER_NODE=12
RUN="RAW"
```

```
source /home-gg/soft/envdir/lammps-2019Aug07.sh
mpirun -np $NP lmp_mpi -in input > output
```

11、按下键盘上的 **esc** 键后，输入 **:wq** 保存 lammps-2019Aug07_GG.lsf 文件，并退出。

12、将脚本文件转换为 UNIX 格式（如从 Windows 系统上传的话必须要转换，不然提交作业时会出现报错；若直接拷贝公共目录中的脚本，并在 Linux 环境中进行修改，则可以省略步骤 9、10。若提交作业的脚本名称不为 lammps-2019Aug07_GG.lsf，则需要修改为对应的脚本名称）：

```
hpc-user@login node:~/lammps> dos2unix lammps-2019Aug07_GG.lsf
```

13、赋予脚本文件可执行权限：

```
hpc-user@login node:~/lammps> chmod +x lammps-2019Aug07_GG.lsf
```

```
@gs0110:~/lammps> chmod +x lammps-2019Aug07_GG.lsf
@gs0110:~/lammps> ls
2004-eam-Zhou data.fcc+V input lammps-2019Aug07_GG.lsf
```

14、调用 **bsub** 命令提交作业脚本：

```
hpc-user@login node:~/lammps> bsub lammps-2019Aug07_GG.lsf
```

15、如果提交正确，则会出现“Job <2752757> 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）。

```
@gs0110:~/lammps> bsub lammps-2019Aug07_GG.lsf
Job <2752757> is submitted to queue <intelG_mid>.
```

16、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 xxx seconds 说明计算结束）：

```
hpc-user@login node:~/lammps> bjobs -l 2752757
```

```
@gs0110:~/lammps> bjobs -l 2752757

Job <2752757>, User <hpc-user>, Project <default>, Application <Gapp>, Status
<DONE>, Queue <intelG_mid>, Job Priority <50>, Command
<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/~/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/~/lammps>, Execut
ion CWD </home-gg/users/~/lammps>;
Thu Jan 2 18:11:26 2020: Done successfully. The CPU time used is 531.8 seconds
```

17、任务计算结束后，可以查看输出文件，检查任务是否计算成功（若输出文件名称不为 **output** 则需修改为相应名称）：

```
hpc-user@login node:~lammps> tail -30 output
```

18、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
```

19、计算完成后，用 FTP 工具将文件下载后，进行分析。