

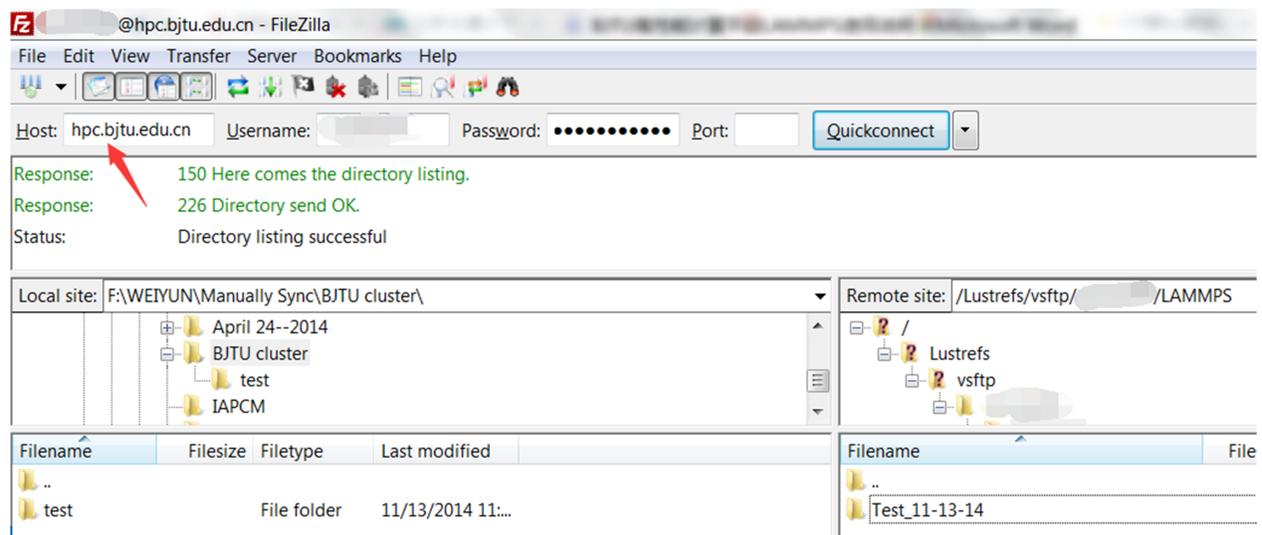
北京交通大学 高性能计算平台

LAMMPS 使用说明

1、上传必需文件

使用 ftp 软件：FileZilla <https://filezilla-project.org/>

注意 Host 不能使用 sftp，手动改为 ftp，地址：hpc.bjtu.edu.cn



成功登陆后，可见/Lustrefs/vsftp/下以用户名为名称的文件夹，即为工作主目录路径。

这个路径适合储存较大量的输出数据。

2、提交任务

浏览器访问地址: <https://hpc.bjtu.edu.cn>

用户名、密码, 登陆后界面如下:

The screenshot shows the 'Common Submit' form in the HPC interface. The form is divided into several sections:

- Select Submit Type:** A sidebar menu with options: Common Submit, PBS Template, and Qsub Command.
- Basic parameters:**
 - Job Name:** A text input field containing 'your_job_name'.
 - Queue:** A dropdown menu set to 'lammps'.
 - Job Type:** Radio buttons for 'Script File Path' and 'Command'. 'Command' is selected.
 - Command:** A text area containing the command: `mpirun -np N /software/lammps/lammps-5Sep14/src/Imp_intel < full_input_file_name`. A red arrow points to the 'N' in the command.
 - Program Parameters:** An empty text input field.
 - Work Directory:** An empty text input field with a 'File path' button next to it. A red arrow points to this button.

- 1) **Job name:** 显示在 List 中的名称
- 2) **Queue:** 必选 lammps
- 3) **Job Type:** 选取 Command 模式, 命令如下:

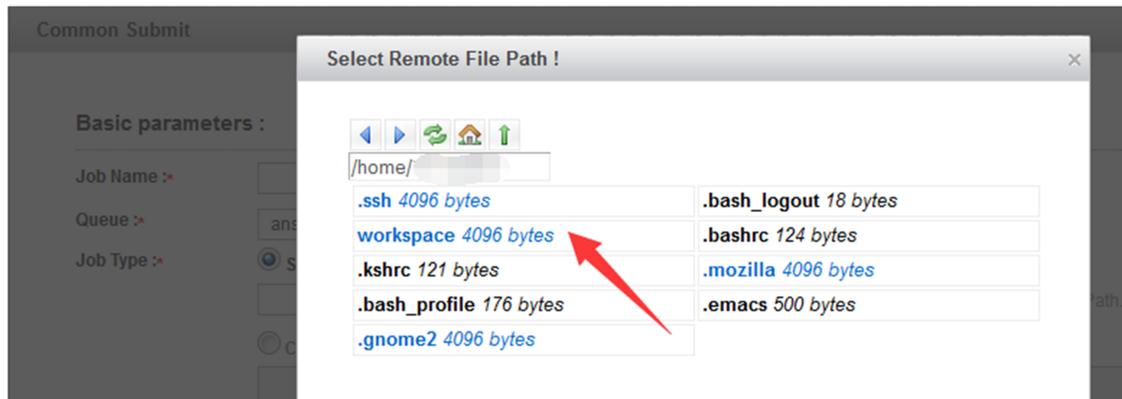
```
mpirun -np N /software/lammps/lammps-5Sep14/src/Imp_intel < inputfile
```

更改 **N** 指定线程数。若 **N** 为 64, 则后续应有操作要保证集群供给 64 个物理核用于计算, 详见第五步。

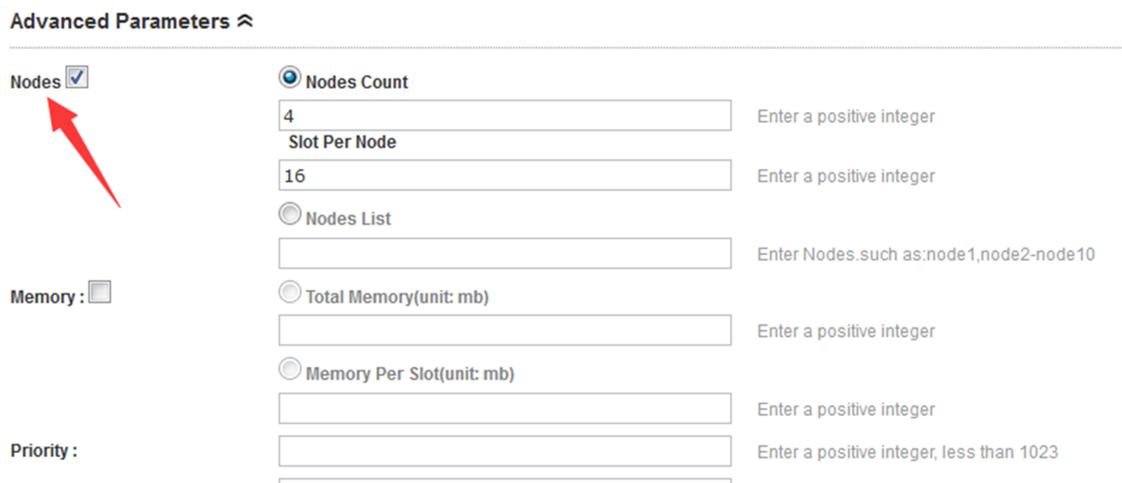
注意 **LAMMPS** 的版本目前为 **5Sep14**, 适用于 13 年下半年以前的输入脚本有可能会
会出现命令不兼容的问题, 请依据最新 Manual 修改命令。

(诸如 compute 和 dump)

- 4) 点击 **File path**, 弹出如下对话框, 选择 **workspace**, 会链接至上面 ftp 上传文件的主目录, 即绝对路径为 /Lustrefs/vsftp/用户名/, 然后指定具体工作文件夹。



5) 点选 **Advanced Parameters**，展开选项，控制 **node** 即可。如图所示，可选取 4 个节点，每个节点（最多）16 个核，那么一共是 64 个 MPI 线程并行计算。等于上面命令行里指定的 N。

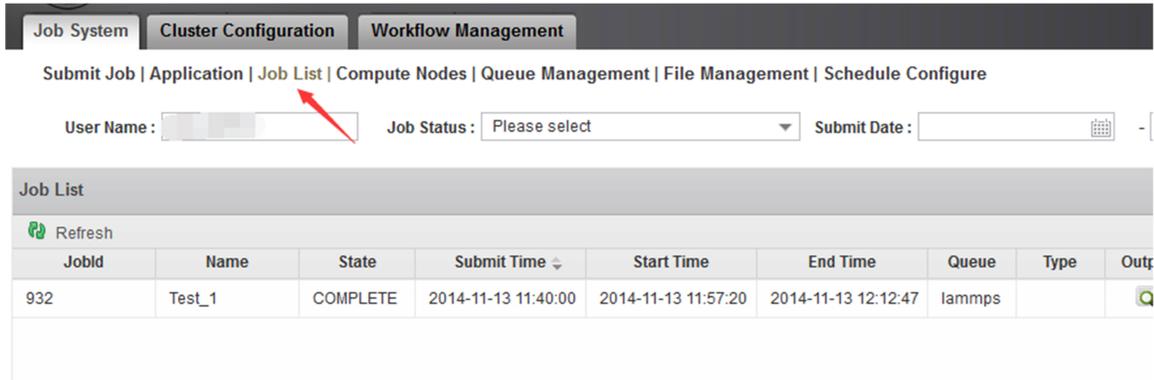


Tips: LAMMPS 对于特定体系，有着最佳效率的线程数分配，体系被分割太多份反而会提高通信代价，所以也**不是线程越多计算越快**，线程指定太多也可能增加排队时间，所以请依据体系原子数自行决定并行规模。

3、查看任务状态

于浏览器界面点击 Job List。

任务完成或是失败，默认系统都会自动向注册的邮箱发信，注意查收。



Job System | Cluster Configuration | Workflow Management

Submit Job | Application | Job List | Compute Nodes | Queue Management | File Management | Schedule Configure

User Name : Job Status : Please select Submit Date :

Job List

Refresh

JobId	Name	State	Submit Time	Start Time	End Time	Queue	Type	Outp
932	Test_1	COMPLETE	2014-11-13 11:40:00	2014-11-13 11:57:20	2014-11-13 12:12:47	lammps		

2014 年 11 月 14 日