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 <u>https://filezilla-project.org/</u>

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

E@hpc.	bjtu.edu.cn - FileZilla		0.000	E-B-MAR	where the	Street West			
File Edit View	Transfer Server Bookm	arks Help							
Host: hpc.bjtu.edu.cn Username: Password: •••••• Port: Quickconnect V									
Response:	150 Here comes the dire	ctory listing.							
Response:	Response: 226 Directory send OK.								
Status:	Directory listing successf	ul							
Local site: F:\WEIY	UN\Manually Sync\BJTU c	luster		-	Remote site:	/Lustrefs/vsftp/	/LAMMPS		
	🖳 📕 April 242014			•	e- 🧏 /				
	BJTU cluster	🖨 😰 Lustrefs							
	🦳 📜 test	📄 🖓	vsftp						
				~	<u> </u>				
Filename	Filesize Filetype	Last modified			Filename	~	File		
. .					1.				
👢 test	File folder	11/13/2014 11:			👢 Test_11-1	3-14			

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: <u>https://hpc.bjtu.edu.cn</u>

用户名、密码,登陆后界面如下:

Job S	System	Cluster Config	guration	Workf	flow Management	
Sub	mit Job	Application J	ob List Co	mpute I	Nodes Queue Manager	nent File Management Schedule Configure
Se	elect Su	bmit Type		~	Common Submit	
G	Com	mon Submit	;	,		
	PBS	Template		>	Basic paran	neters :
	Qsut	o Command	;	>	Job Name :*	your_job_name Enter the Job Name.
					Queue :*	lammps v Select Queue.
					Job Type :*	Script File Path
						File path Please select a Script FilePath.
						mpirun -np N /software/lammps/lammps-5Sep14/src/imp_intel < full_input_file_name
					Program Para	meters :
					Work Director	Y: File path
						The paul

- 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/lmp_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。

Common Submit			
	×		
Basic parameters :	♦ ▶ 🕏 ☎ 1		
Job Name :*	.ssh 4096 bytes	.bash_logout 18 bytes	
Queue :* ans	workspace 4096 bytes	.bashrc 124 bytes	
Job Type :* 🔍 🔘 S	.kshrc 121 bytes	.mozilla 4096 bytes	
	.bash_profile 176 bytes	.emacs 500 bytes	Path.
00	.gnome2 4096 bytes		

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。

Advanced Parame	eters ≈	
Nodes 🗹	Nodes Count	
	4	Enter a positive integer
	Slot Per Node	
	16	Enter a positive integer
N	Nodes List	
		Enter Nodes.such as:node1,node2-node10
Memory : 🔲	Total Memory(unit: mb)	
		Enter a positive integer
	Memory Per Slot(unit: mb)	
		Enter a positive integer
Priority :		Enter a positive integer, less than 1023

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 Configu	uration Work	flow Management					
Submit Job	Application Jol	b List Compute	Nodes Queue Mana	igement File Manag	ement Schedule Co	nfigure		
User Nan	ne :	Job	Status: Please selec	t	▼ Submit Date :		[<u>.</u>
Job List								
🚱 Refresh								
Jobid	Name	State	Submit Time 🔤	Start Time	End Time	Queue	Туре	Out
932	Test_1	COMPLETE	2014-11-13 11:40:00	2014-11-13 11:57:20	2014-11-13 12:12:47	lammps		Q

2014年11月14日