1 软件介绍

LAMMPS 即 Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator，可以翻译为大规模原子分子并行模拟器，主要用于分子动力学相关的一些计算和模拟工作，一般来讲，分子动力学所涉及到的领域，LAMMPS 代码也都涉及到了。

2 安装环境

lammps 版本：lammps-16Mar18

操作系统：Ubuntu 16.04

编译器：GCC

cuda: 9.0

mpi: openmpi-3.0-gnu

3 安装步骤

3.1 CUDA

到 https://developer.nvidia.com/cuda-downloads 下载对应操作系统的 cuda 安装包。下载后执行:

```
chmod +x cuda_9.0.176_384.81_linux.run  #使之具有可执行权限
sudo sh cuda_9.0.176_384.81_linux.run
```

然后按照相关的提示输入安装路径即可，本文选择默认路径。详细安装步骤可以参考 CUDA 9 安装手册。

环境变量:

```
cat /etc/profile.d/cuda-env.sh
export PATH=/usr/local/cuda-9.0/bin:$PATH
export LD_LIBRARY_PATH=/usr/local/cuda-9.0/lib64:$LD_LIBRARY_PATH
export C_INCLUDE_PATH=/usr/local/cuda-9.0/include:$C_INCLUDE_PATH
```

3.2 MPI

目前 lammps 在 gpu 环境下选择 openmpi-3.0-gnu 可以安装成功。下载链接：https://www.open-mpi.org/software/ompi/v3.0/

3.2.1 OpenMPI 简介

OpenMPI 是一个免费的、开源的 MPI 实现，兼容 MPI-1 和 MPI-2 标准。OpenMPI 由开源社区开发维护，并具有很高的性能。

OpenMPI 目前最新版本为 openmpi-3.0.0，官方网站：http://www.open-mpi.org/，可从官网免费下载 Openmpi 源码安装包。

CUDA-aware MPI：支持 CUDA-aware 意味着 MPI 库可以直接接收和发送 GPU 显存数据，以下版本及之后的版本都支持。

* MVAPICH2 1.8/1.9b
* OpenMPI 1.7
* CRAY MPI (MPT 5.6.2)
* IBM Platform MPI (8.3)
* SGI MPI (1.08)

3.2.2 安装 OpenMPI

以 OpenMPI 3.0.0 为例：

```
$ tar zxvf openmpi-3.0.0.tar.gz
$ cd openmpi-3.0.0
$ ./configure --prefix=/public/software/mpi/openmpi-3.0.0 --enable-mpirun-prefix-by-default  --without-psm CC=gcc CXX=g++ FC=gfortran F77=gfortran --with-cuda=/usr/local/cuda-9.0
$ make -j 8  #8 个进程并行编译
$ make install
```

设置环境变量脚本：

```
vim /public/software/profile.d/openmpi-3.0.0-env.sh
```

```
export MPI_HOME=/public/software/mpi/openmpi-3.0.0
export PATH=${MPI_HOME}/bin:${PATH}
export LD_LIBRARY_PATH=${MPI_HOME}/lib:${LD_LIBRARY_PATH}
export MANPATH=${MPI_HOME}/share/man:${MANPATH}
```

- **Tips**

1. OpenMPI 安装会自动检测编译节点本地可用的通信网络设备，如需支持 InfiniBand 网络，请确保编译 MPI 前该节点已安装 OFED 驱动。

2. 执行 OpenMPI 安装目录$MPI_HOME/bin 下的 ompi_info 命令，可查询当前 OpenMPI 配置信息。

3.2.3 编译 MPI 程序

OpenMPI 提供了 C/C++，Fortran 等语言的 MPI 编译器，如下表所示：

语言类型	MPI 编译器
C	mpicc
C++	mpicxx
Fortran77	mpif77
Fortran90	mpif90

MPI 编译器是对底层编译器的一层包装，通过-show 参数可以查看实际使用的编译器。比如：

```
$ mpicc -show
icc -I/public/software/mpi/openmpi-3.0.0/include -pthread -
L/public/software/mpi/openmpi-3.0.0-intel/lib -lmpi -ldl -lm -lnuma -Wl,--
export-dynamic -lrt -lnsl -lutil
```

编译程序示例：

```
$ source /public/software/profile.d/openmpi-3.0.0-env.sh
$ mpicc -o hello hello.c
$ mpif90 -o hello hello.f90
```

3.2.4 运行 MPI 程序

3.2.4.1 基本命令

OpenMPI 使用自带的 OpenRTE 进程管理器，启动命令为 mpirun/mpiexec/orterun，基本格式如下：

```
$ mpirun -np N -hostfile <filename> <program>
```

- -np N：运行 N 个进程
- -hostfile：指定计算节点，文件格式如下：

```
node1 slots=8
node2 slots=8
```

slots=8 代表可在该节点上执行 8 个进程，也可将 node1 和 node2 分别写 8 行。

3.2.4.2 选择通信网络

OpenMPI 支持多种通信协议，如以太网 TCP、IB 网络、内存共享等，可通过设置--mca btl 参数进行选择。如：

```
$ mpirun -np 12 -hostfile hosts --mca btl self,sm,openib ./program
```

将在节点内使用共享内存，节点间使用 IB 网络通信，这种方式通信效率较高。

- **mca 参数说明**

  - --mca btl self,tcp　　使用以太网 TCP/IP 协议通信
  - --mca btl self,sm　　单节点运行时使用共享内存，效率较高
  - --mca btl self,openib　　有 Infiniband 设备时，使用 IB 通信
  - --mca btl_tcp_if_include eth0　　以太网通信时使用 eth0 接口，默认同时使用所有接口(包括 IPoIB)
  - --mca orte_rsh-agent rsh　　指定节点间通信使用 rsh，默认为 ssh

- **Tips**

  - --mca btl 参数中必须含有 self，单进程自己与自己通信
  - 可同时指定多个 btl 参数，如--mca btl self,sm,openib，最先出现者优先级较高
  - IPoIB 设定：--mca btl self,tcp --mca btl_tcp_if_include ib0，当然更直接的方式是在 hostfile 里使用 IB 网卡的 IP 地址或对应的 hostname

3.3 Lammps 安装

下载 Lammps:

wget http://lammps.sandia.gov/tars/lammps-stable.tar.gz

解压下载文件:

```
tar -xzvf lammps-stable.tar.gz
cd lammps-16Mar18
```

编辑配置文件，在 Volta V100 环境下编译:

```
vi src/MAKE/OPTIONS/Makefile.kokkos_cuda_mpi    # edit for volta
---------------
#KOKKOS_ARCH =   Kepler35
KOKKOS_ARCH =   Volta70
--------------------
```

编译 Lammps:

```
$ cd src
$ make clean-all
```

$ make no-all

$ make no-lib

$ make yes-manybody yes-molecule yes-replica yes-kspace yes-asphere yes-rigid yes-misc yes-user-omp yes-user-reaxc

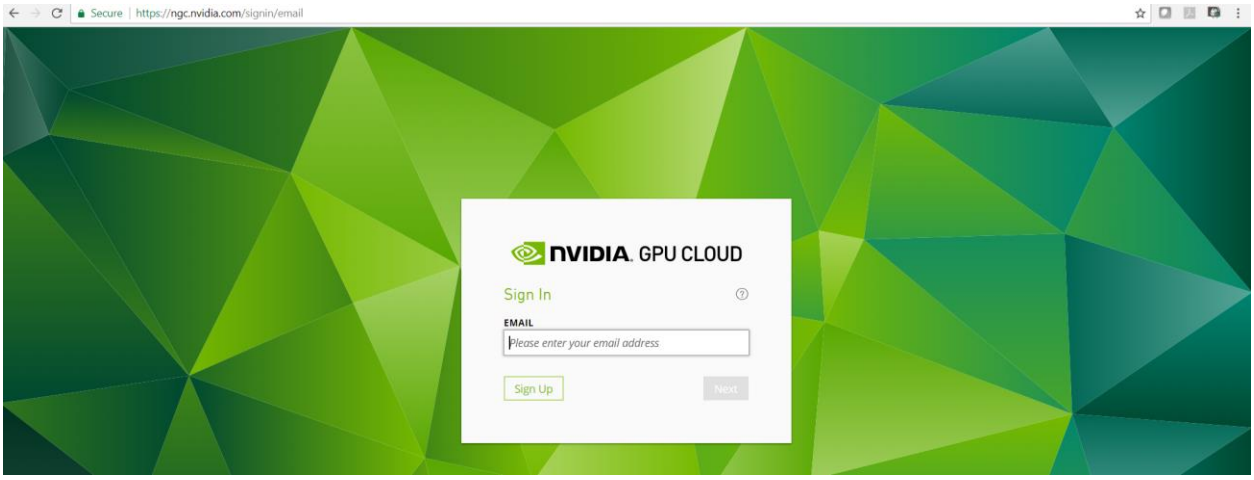
$ make yes-kokkos

$ make kokkos_cuda_mpi -j32

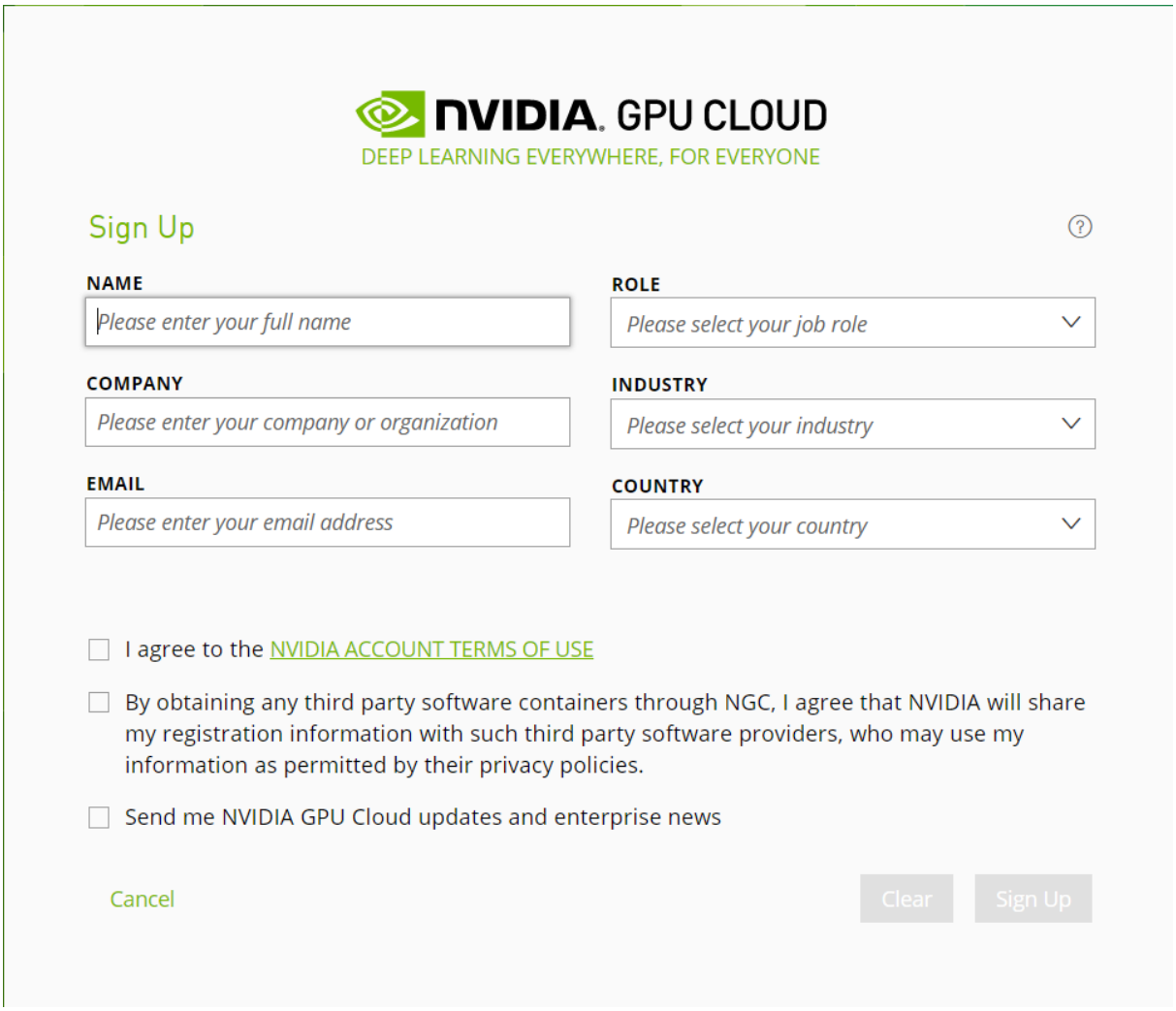
3.4 Lammps 基于 NGC Docker 安装

在 NVIDIA GPU Cloud（NGC）中，包含 Lammps 的 docker 镜像文件，可以直接下载，导入 Linux docker 环境就可以使用。

注册 NGC

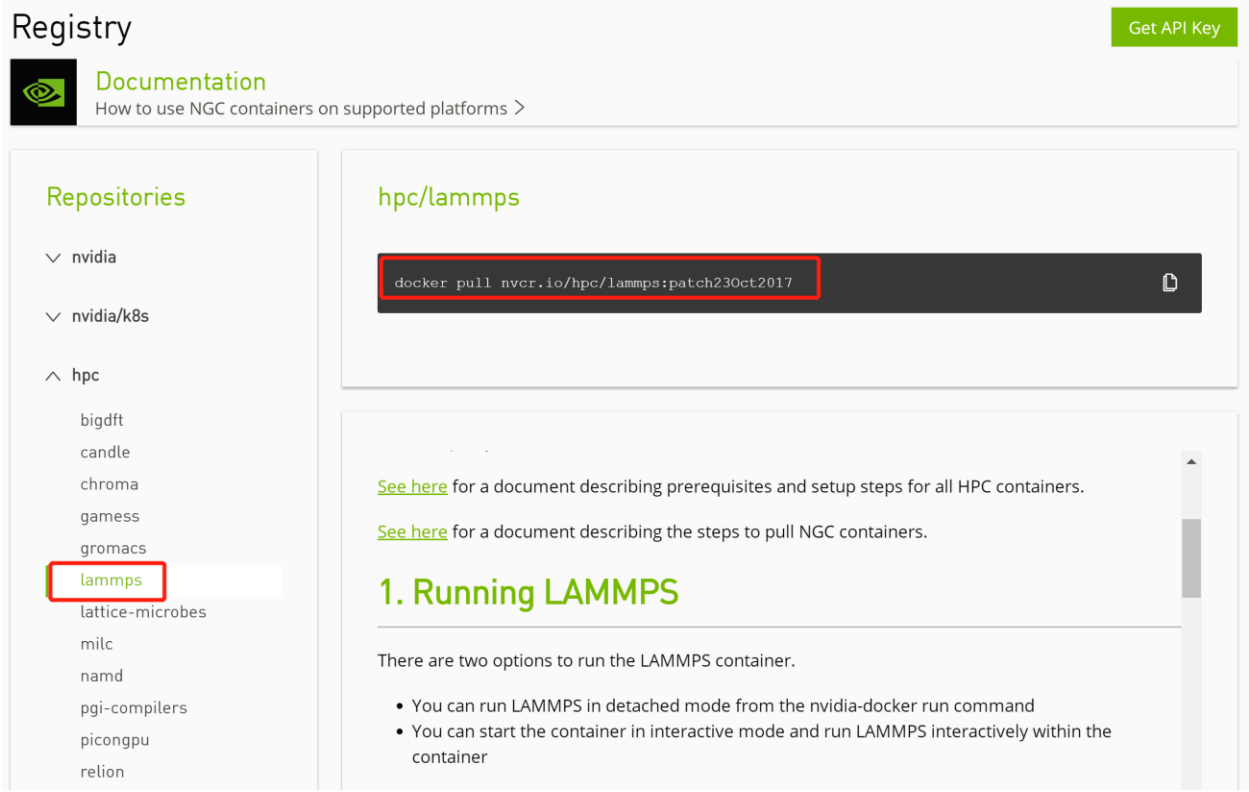


填写注册信息：



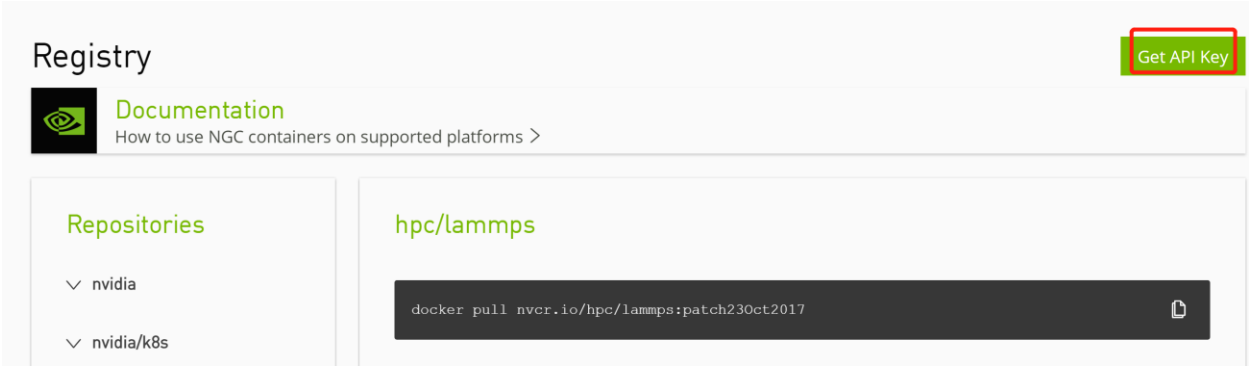
登录 NGC 系统

注册 NGC 后，登录 NGC 系统，就可以看到下图中所有的 HPC Apps 的 docker image 镜像。

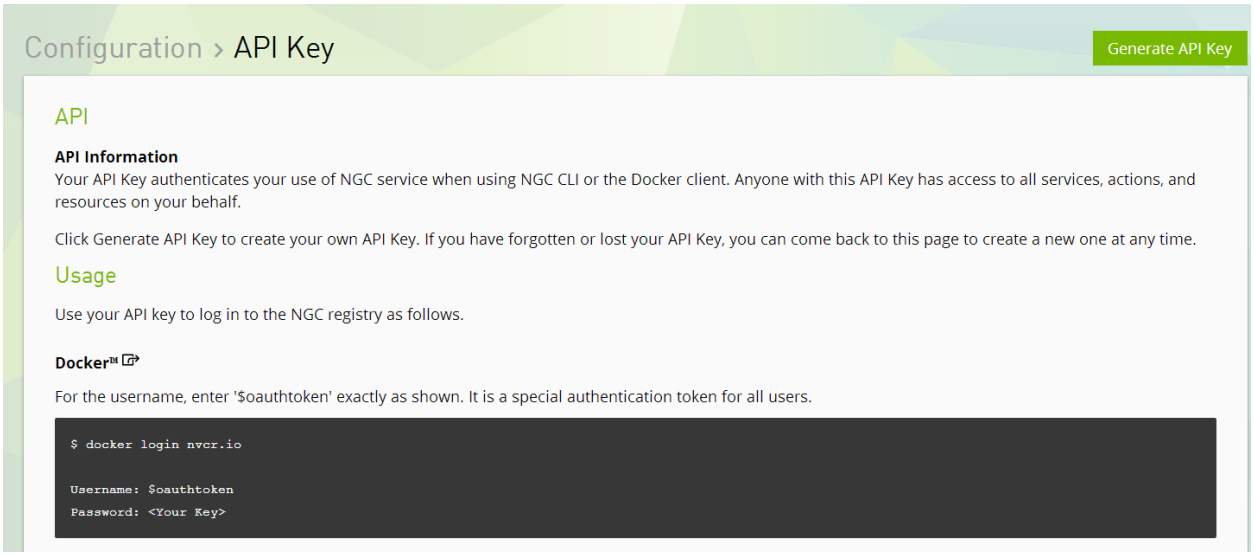


Docker image 下载

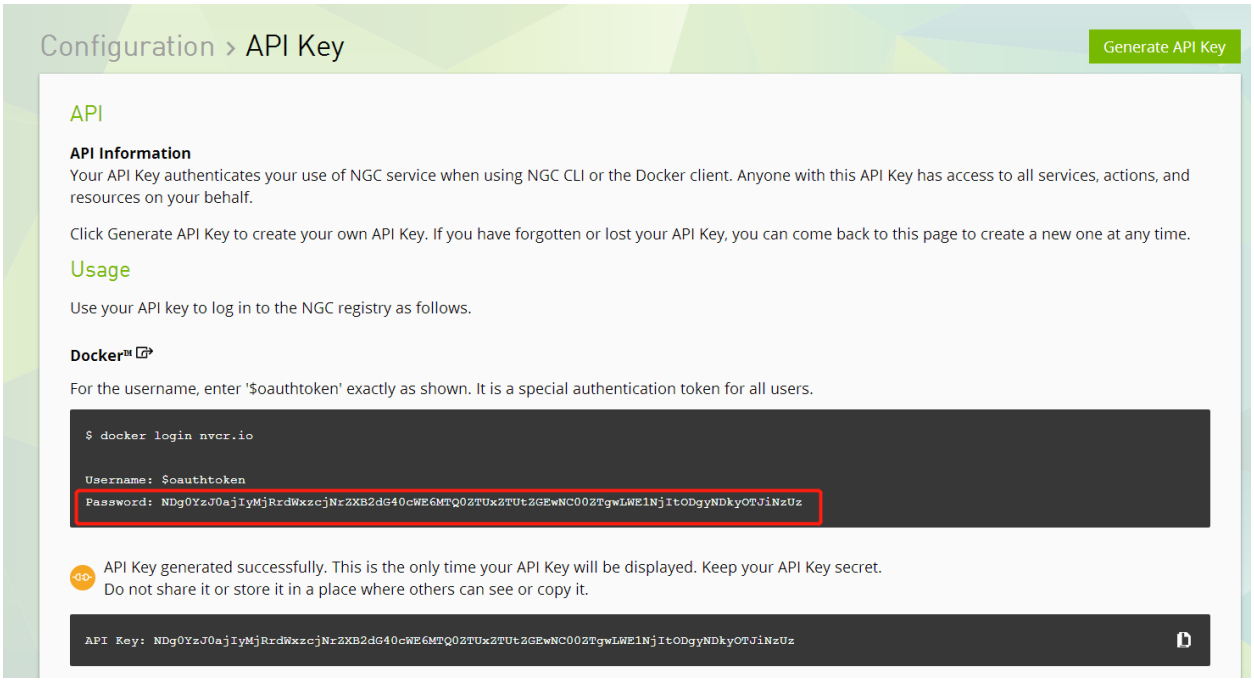
下载 image 镜像之前，先要获取 API key:



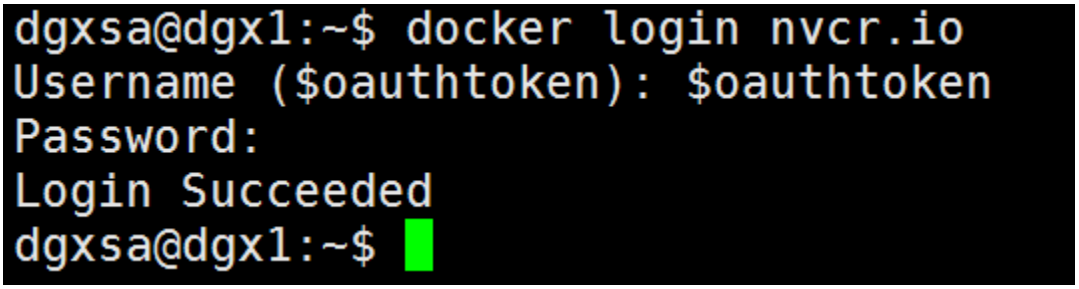
点击 Get API Key，即可获得:



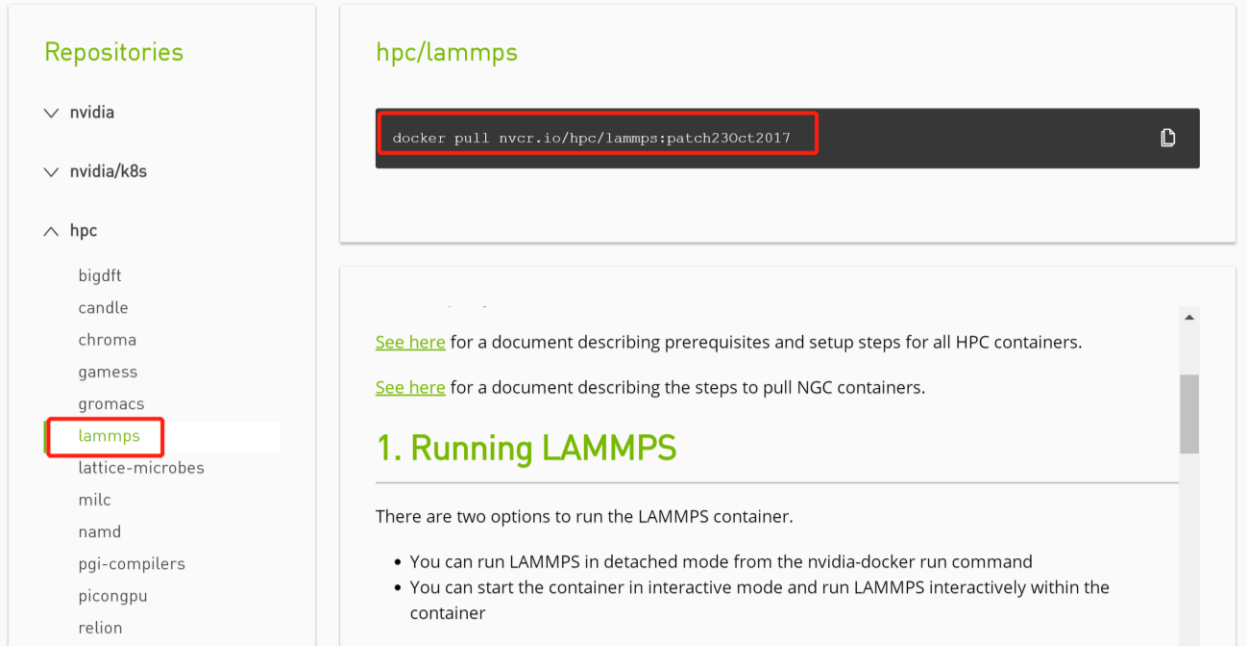
点击“Generate API Key”，并点击弹出对话框中的“Confirm”，系统会生成一个 API Key 作为 nvcr.io 的登录密码，并复制该 Password，用于登录：



在 Linux 客户端登录方式如下，作者是在 DGX-1 平台下，Ubuntu 16.04 的系统演示的，如下：



登录成功以后，就可以进行 Lammps 容器下载，如下：



将命令“docker pull nvcr.io/hpc/lammps:patch23Oct2017”复制到 Linux terminal：

```
dgxsa@dgx1:~$ docker login nvcr.io
Username ($oauthtoken): $oauthtoken
Password:
Login Succeeded
dgxsa@dgx1:~$ docker pull nvcr.io/hpc/gromacs:2016.4
```

启动 docker 并运行 Lammps

使用 nvidia-docker 命令查看 Lammps 容器镜像信息。

```
nvcr.io/nvidia/pytorch                18.07-py3                       601a2ac5a8a4        3 months ago        5.67GB
paddlepaddle/paddle                   0.14.0-gpu-cuda9.0-cudnn7       73383007fb3f        3 months ago        3.21GB
nvcr.io/nvidia/digits                 18.07                           d5a0acdbdbcf        3 months ago        7.16GB
nvcr.io/nvidia/tensorflow             18.07-py3                       8289b0a3b285        3 months ago        3.34GB
nvcr.io/nvidia/tensorflow             18.07-py2                       0786194b1dc2        3 months ago        3.34GB
nvcr.io/nvidia/tensorrt               18.07-py3                       5c33a10c8b7e        3 months ago        2.61GB
nvcr.io/nvidia/caffe                  18.07-py2                       69bac2995799        3 months ago        4.29GB
nvcr.io/openacc/cuda9.0/openmpi2.1.2  1.0                             cceea74653c1        3 months ago        8.73GB
nvcr.io/nvidia/cuda                   9.0-cudnn7.1-devel-ubuntu16.04  55a7183596e0        3 months ago        1.65GB
nvcr.io/nvidia/mxnet                  18.06-py2                       1ee190602e8e        4 months ago        3.89GB
nvcr.io/nvidia/tensorflow             18.06-py3                       0d13c9061269        4 months ago        3.4GB
nvidia/cuda                           9.0-cudnn7-devel-ubuntu16.04    222eeacc095c        4 months ago        2.61GB
nvcr.io/nvidia/cuda                   9.2-base-ubuntu16.04            30a02dc72ed6        4 months ago        132MB
nvcr.io/nvidia/pytorch                18.06-py3                       fda0dadff8f3        4 months ago        5.67GB
nvcr.io/nvidia/caffe                  18.06-py2                       7a48cd22fde1        4 months ago        3.14GB
nvcr.io/nvidia/tensorflow             <none>                          ba9aba037907        5 months ago        3.82GB
nvcr.io/nvidia/tensorflow             18.05-py3                       e878e4ef1885        5 months ago        3.84GB
nvidia-dgx-fw-0102-20180424           latest                          e21986a13542        5 months ago        348MB
nvcr.io/nvidia/tensorrt               18.03-py2                       2d6903917375        7 months ago        4.33GB
nvcr.io/nvidia/tensorflow             18.03-py3                       c0f4402aa77b        7 months ago        2.83GB
nvcr.io/nvidia/cuda                   9.0-cudnn7-devel-ubuntu16.04    56240d7febea        8 months ago        1.77GB
nvcr.io/nvidia/tensorrt               18.02-py2                       23f146705293        8 months ago        4.31GB
nvcr.io/nvidia/tensorflow             17.12                           19afd620fc8e        10 months ago       2.88GB
nvcr.io/hpc/relion                    2.1.b1                          992ec69c15b4        11 months ago       2.84GB
nvcr.io/hpc/lammps                    patch23Oct2017                  d8ae9ee6bf06        11 months ago       3.48GB
dgxsa@dgx2:~$
```

启动 docker 镜像:

```
dgxsa@dgx1:~$ nvidia-docker run --name MyLammps -v
/home/dgxsa/chengyi/share:/data -it nvcr.io/hpc/lammps: patch23Oct2017
/bin/bash
```

docker run Options

➔ -i -t or -it： 交互式，连接到一个"tty"

➔ --name： 给容器命名

➔ -v /home/dgxsa/chengyi/share:/data ： 将 host 主机的/home/dgxsa/chengyi/myshare 存储目录映射到容器的 data 目录。

```
dgxsa@dgx2:~$ nvidia-docker run --rm --name MyLammps -v /home/dgxsa/chengyi/share:/data -it nvcr.io/hpc/lammps:patch23
Oct2017 /bin/bash
root@7b2dfc28da4e:/workspace# ls
root@7b2dfc28da4e:/workspace# ll /opt/lammps-patch_23Oct2017/
total 112
drwxrwxr-x  1 root root  4096 Oct 23  2017 ./
drwxr-xr-x  1 root root  4096 Nov 11  2017 ../
drwxrwxr-x  2 root root  4096 Oct 23  2017 .github/
-rw-rw-r--  1 root root   311 Oct 23  2017 .gitignore
-rw-rw-r--  1 root root 17775 Oct 23  2017 LICENSE
-rw-rw-r--  1 root root  1690 Oct 23  2017 README
drwxrwxr-x  5 root root  4096 Oct 23  2017 bench/
drwxrwxr-x  5 root root  4096 Oct 23  2017 cmake/
drwxrwxr-x  4 root root  4096 Oct 23  2017 doc/
drwxrwxr-x 61 root root  4096 Oct 23  2017 examples/
drwxrwxr-x  1 root root  4096 Oct 23  2017 lib/
drwxrwxr-x  2 root root  4096 Oct 23  2017 potentials/
drwxrwxr-x  3 root root  4096 Oct 23  2017 python/
drwxrwxr-x  1 root root 40960 Nov 11  2017 src/
drwxrwxr-x 28 root root  4096 Oct 23  2017 tools/
root@7b2dfc28da4e:/workspace#
```

启动容器以后，就可以像在一台 Linux 服务器上操作了，里面已经配置好了所有运行环境，如果需要安装其他软件，可以使用命令:

$ sudo apt-get update

$ sudo apt-get install xxxx 进行安装。

如果想退出容器，可以使用命令：Ctrl+D

如果想删除容器，可以使用命令：nvidia-docker rm 7b2dfc28da4e； 7b2dfc28da4e 为 docker-ID

如果想退出容器登录界面，但保持容器后台运行，可以使用命令：Ctrl+P，然后 Ctrl+Q

4 标准算例

4.1 准备算例

使用的 Lammps 算例 in.lj 文件如下:

```
# 3d Lennard-Jones melt

# Enable Accel packages on command line

variable    x index 4
variable    y index 4
variable    z index 4
variable    iterations index 1000

variable    xx equal 20*$x
variable    yy equal 20*$y
variable    zz equal 20*$z

units       lj
atom_style  atomic

lattice          fcc 0.8442
region           box block 0 ${xx} 0 ${yy} 0 ${zz}
create_box  1 box
create_atoms     1 box
mass        1 1.0

velocity    all create 1.44 87287 loop geom

pair_style  lj/cut 2.5
pair_coeff  1 1 1.0 1.0 2.5

neighbor    0.3 bin
neigh_modify     delay 0 every 20 check no

fix         1 all nve

run         ${iterations}
```

4.2 手动运行算例

运行命令及结果如下:

```
root@acc60e90047d:/mnt/lammps# mpirun --allow-run-as-root -n 16 --map-by
core /mnt/lammps-22Aug18/src/lmp_kokkos_cuda_mpi -k on g 2 t 2 -sf kk -pk
kokkos binsize 2.8 comm device -v x 16 -v y 8 -v z 8 -v t 10 -in in.lj
```

参数解释:

-kokkos on/off ... : turn KOKKOS mode on or off (-k)， g 2 t 2 分别表示 2 块 GPU，每个进程包含 2 个线程。

-package style ... : invoke package command (-pk)

-suffix gpu/intel/opt/omp : style suffix to apply (-sf)

更多的参数可以运行 lmp_kokkos_cuda_mpi -h 查阅。

4.3 PBS 脚本范例

建立提交脚本 lammps.pbs

```
#PBS -N lammps_test
#PBS -l nodes=2:gpus=3:ppn=16  #2 个节点，每个节点 2 块 GPU，16 核 CPU
#PBS -l walltime=10:00:00
#PBS -S /bin/bash
#PBS -j oe

cd $PBS_O_WORKDIR
NP=`cat $PBS_NODEFILE|wc -l`
NN=`cat $PBS_NODEFILE|uniq –c|wc –l` #节点数
PPN=`cat $PBS_NODEFILE|uniq -c|sed -n '1,1p'|awk '{print $1}'`#每个节点的进程数，本例中 PPN=4

mpirun -n $NP --map-by core /mnt/lammps-22Aug18/src/lmp_kokkos_cuda_mpi -k on g 2 t 2 -sf kk -pk kokkos binsize 2.8 comm device -v x 16 -v y 8 -v z 8 -v t 10 -in in.lj
```

提交作业，并查看是否正确运行。

```
qsub  lammps.pbs
qstat
```

4.4 slurm 脚本范例

建立提交脚本 batch.lammps

```
#!/bin/bash
```

```
#SBATCH --job-name=lammps_test
#SBATCH --nodes=2 #总的节点数
#SBATCH --ntasks=32 #总的 CPU 核数
#SBATCH --partition=hsw_v100_32g #集群的队列名称
#SBATCH --gres=gpu:2
#SBATCH --time=01:00:00

cd $PBS_O_WORKDIR

LAMMPS=/mnt/lammps-22Aug18/src/lmp_kokkos_cuda_mpi
INPUT=in.lj

mpirun -n $NP --map-by core $LAMMPS -k on g 2 t 2 -sf kk -pk kokkos
binsize 2.8 comm device -v x 16 -v y 8 -v z 8 -v t 10 -in $INPUT >log.out
2>&1
```

关于 lammps 的 slurm 运行脚本中指定 GPU，需要在 slurm.conf 中配置，需要把下面的配置文件 slurm.conf 中关于 generic resource (gres)的配置注释去掉：

[chengyi@psgcluster test]$ cat /cm/images/compute-image/etc/slurm/slurm.conf|grep GresTypes

#GresTypes=gpu