



上海科技大学  
ShanghaiTech University

# 物质学院集群及常用软件介绍

魏 旗、刘晓迁

2021年10月28日



立志成才 报国裕民



➤ Lammps编译及使用





load environment vars



prepare makefile



make

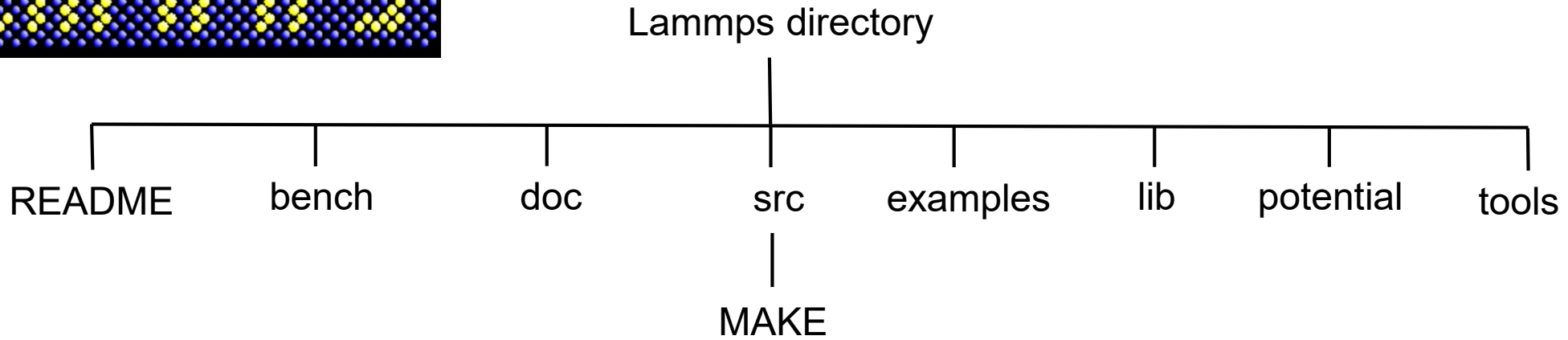
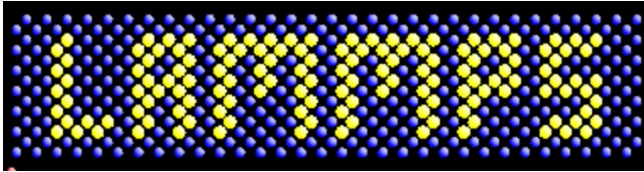
```
module load compiler/intel/composer_xe_2015.2.164
module load mpi/intelmpi/5.0.2.044
echo $MKLROOT
echo $_MPI_ROOT
```

copy makefile from template

```
make / make xxx
```

See **README** file for the detail of the make options





Open source: <https://www.lammps.org/>

Download:

```
wget https://download.lammps.org/tars/lammps-stable.tar.gz
```





## b. build with cmake

用cmake编译lammmps好处是方便,不需要太多自定义操作,逻辑通顺,编译简单. [see detail](#)

```
cd lammps # change to the LAMMPS distribution directory
mkdir build; cd build # create and use a build directory
cmake ../cmake # configuration reading CMake scripts from ../cmake
cmake --build . # compilation (or type "make")
# 此时build目录下面会出现一个可执行文件lmp,这个可执行文件就是我们通常意义上的软件.
```





## c. build with make

lammmps包含很多有意思的分子动力学软件包,比如我自己常用的元动力学包plumed,DPMD包deepmd都可以在这一个环节自定义安装.

如果只需要常用package的话,推荐如下做法.如果需要自定义安装包的话可以尝试 `make packagename` 的方式来启用.

```
cd src
make yes-all
make no-lib
make mpi -j 20
# 由于安装过程较为漫长,建议使用nohup命令挂起
nohup make mpi > make.log 2>&1 &
```





Test example:

/lammmps/examples/meam

in.meam data.meam SiC.meam

```
# Test of MEAM potential for SiC system
units          metal # 单位
boundary       p p p # 周期性边界条件
atom_style     atomic # 这种原子类型不需要电荷
read_data      data.meam # data文件,可以通过lammmps的api接口转化
pair_style     meam # 势函数类型
pair_coeff     * * library.meam Si C SiC.meam Si C # library.meam和SiC.meam两个文件就是此次计算使用的势函数
neighbor       0.3 bin
neigh_modify   delay 10
fix            1 all nve #
thermo         10 # 屏幕输出步长
timestep       0.001 # run的时候每一步的步长(需要注意单位)
#dump          1 all atom 50 dump.meam
#dump          2 all image 10 image.*.jpg element element &
# axes         yes 0.8 0.02 view 60 -30
#dump_modify  2 pad 3 element Si C
#dump          3 all movie 10 movie.mpg element element &
# axes         yes 0.8 0.02 view 60 -30
#dump_modify  3 pad 3 element Si C # 通过dump命令输出想要的数据
run            100 # 步长为0.001的情况下,跑100步
```

in.meam

See [https://docs.lammmps.org/Commands\\_all.html](https://docs.lammmps.org/Commands_all.html) for more commands usage





PBS script (sub.pbs)

```
#PBS -N lammmps
#PBS -l nodes=1:ppn=28
#PBS -S /bin/bash
#PBS -j oe
#PBS -q queue_name #change to your queue

cd $PBS_O_WORKDIR
NPROCS=`wc -l < $PBS_NODEFILE`

module load compiler/intel/composer_xe_2015.2.164
module load mpi/intelmpi/5.0.2.044

export lammmps=/public/home/yourname/lammmps/src/Imp_mpi
mpirun -np $NPROCS $lammmps -in in.meam
```

submit job:

```
qsub sub.pbs
```

