弹性高性能计算E-HPC

最佳实践

为了无法计算的价值 | 阿里云

最佳实践

GROMACS

GROMACS 简介

GROMACS（GROningen MAchine for Chemical Simulations）是一款通用软件包，用于对具有数百万颗粒子的系统进行基于牛顿运动方程的分子动力学模拟。GROMACS主要用于生物化学分子，如蛋白质，脂质等具有多种复杂键合相互作用的核酸。由于GROMACS在计算典型的主流模拟应用如非键合相互作用非常高效，许多研究人员将其用于非生物系统如聚合物的研究。

GROMACS支持从现代分子动力学实现中预期的所有常见算法，其代码由世界各地的开发人员维护。详情可参见官网www.gromacs.org 。

准备工作

运行以下示例需要在创建集群时选择安装GROMACS相关软件包。

☑	gromacs	5.0.7
☑	gromacs-openmpi	5.0.7
☑	gromacs-gpu	2016.3

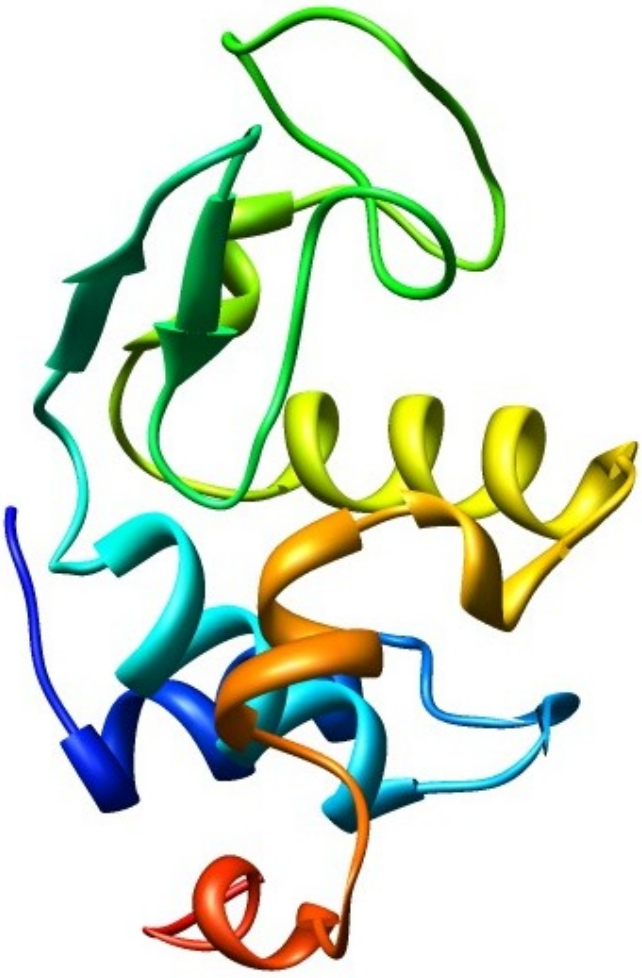
注：若需运行gromacs-gpu算例，在创建集群时**必须使用GPU系列机型**作为计算节点，否则集群创建或gromacs-gpu无法按照以下指引运行。

同时还需选择所依赖的相关MPI库

运行算例

注意：运行算例前务必做好**提交作业**中准备工作部分的操作。

GROMACS 算例1：水中的溶菌酶（Lysozyme in Water）



本样例为用户设置一个蛋白质(lysozyme)加上离子在水盒子里的模拟过程。

官方教程链接：http://www.bevanlab.biochem.vt.edu/Pages/Personal/justin/gmx-tutorials/lysozyme/index.html

非官方中文翻译链接：http://jerkwin.github.io/GMX/GMXtut-1/

下载地址

http://public-ehs.oss-cn-hangzhou.aliyuncs.com/packages/Lysozyme.tar.gz

运行步骤

a. 串行版本$ ./serial_run.sh

b. 并行版本$ ./parallel_run.sh

GROMACS算例2：水分子运动

本算例为模拟大量水分子在给定空间、温度内的运动过程，以下运行实例为GPU加速版。

运行步骤

- 设置环境变量，运行module avail 查看是否安装GROMACS 软件。

```
$ export MODULEPATH=/opt/ehpcmodulefiles/   # module命令依赖的环境变量
$ module avail
------------------------------ /opt/ehpcmodulefiles -------------------------------------
gromacs-gpu/2016.3 openmpi/1.10.7
```

- 运行 module load 加载 GROMACS，OpenMPI。

```
$ module load openmpi
$ module load gromacs-gpu
$ which gmx_mpi
/opt/gromacs-gpu/2016.3/bin/gmx_mpi
```

- 下载water算例

假设当前目录在当前用户的$HOME下面

```
$ pwd
/home/<current_user_name>
$ wget http://public-ehs.oss-cn-hangzhou.aliyuncs.com/packages/water_GMX50_bare.tar.gz
$ tar xzvf water_GMX50_bare.tar.gz
```

提交PBS作业运行water算例。

- 高配置计算节点（>32 CPU核，双GPU卡）的PBS作业脚本

```
$ cat > gromacs_single_node.pbs
#!/bin/sh
#PBS -l ncpus=32,mem=4gb
#PBS -l walltime=00:20:00
#PBS -o gromacs_gpu_pbs.log
#PBS -j oe
cd /home/water-cut1.0_GMX50_bare/1536
/opt/gromacs-gpu/2016.3/bin/gmx_mpi grompp -f pme.mdp -c conf.gro -p topol.top -o topol_pme.tpr
/opt/openmpi/1.10.7/bin/mpirun -np 4 /opt/gromacs-gpu/2016.3/bin/gmx_mpi mdrun -ntomp 8 -resethway -
noconfout -nsteps 8000 -v -pin on -nb gpu -gpu_id 0011 -s topol_pme.tpr
```

- 较低配置节点的PBS作业脚本

```
$ cat > gromacs_single_node.pbs
#!/bin/sh
#PBS -l ncpus=4,mem=4gb
#PBS -l walltime=00:20:00
#PBS -o gromacs_gpu_pbs.log
```

```
#PBS -j oe
cd /home/water-cut1.0_GMX50_bare/1536
/opt/gromacs-gpu/2016.3/bin/gmx_mpi grompp -f pme.mdp -c conf.gro -p topol.top -o topol_pme.tpr
/opt/openmpi/1.10.7/bin/mpirun -np 1 /opt/gromacs-gpu/2016.3/bin/gmx_mpi mdrun -ntomp 4 -resethway -
noconfout -nsteps 8000 -v -pin on -nb gpu -s topol_pme.tpr
```

- 通过PBS作业脚本提交作业

```
$ qsub gromacs_single_node.pbs
1.iZ2zedptfv8e8dc9c2zt0tZ

$ qstat
Req'd Req'd Elap
Job ID Username Queue Jobname SessID NDS TSK Memory Time S Time
--------------- -------- -------- ---------- ------ --- --- ------ ----- - -----
1.iZ2zedptfv8e8 mingying workq gromacs_si 20775 1 4 4gb 00:20 R 00:03
```

LAMMPS

官网

http://lammps.sandia.gov/ 。

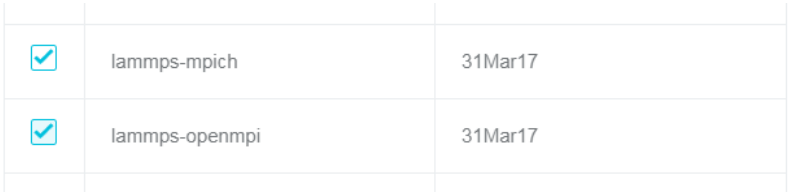
简介

LAMMPS（Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator）是一款经典分子动力学软件。LAMMPS包含的势可用于固体材料（金属、半导体）、软物质（生物大分子，聚合物）、粗粒化或介观尺度模型体系。

算例 1 “3d Lennard-Jones melt”

准备工作

运行以下示例需要在创建集群时选择安装LAMMPS相关软件包。



同时还需选择所依赖的相关MPI库

☐	mpich	3.0.4
☑	mpich	3.2
☑	openmpi	1.10.7
☐	openmpi	1.8.8

操作步骤

1.运行 module avail，查看是否已安装 LAMMPS 软件。

```
$ export MODULEPATH=/opt/ehpcmodulefiles/
$ module avail
------------------------------ /opt/ehpcmodulefiles -------------------------------------
lammps/31Mar17-mpich lammps/31Mar17-openmpi mpich/3.2.2 openmpi/1.10.7
```

2.运行 module load 加载LAMMPS。

```
$ module load lammps/31Mar17-mpich
$ module load mpich
$ which lmp
/opt/lammps/31Mar17-mpich/lmp
```

3.进入算例目录，有以下作业提交方式。

- 命令行直接提交。

```
$ srun --mpi=pmi2 -N 2 -n 4 lmp -in in.intel.lj
LAMMPS (31 Mar 2017)
Lattice spacing in x,y,z = 1.6796 1.6796 1.6796
Created orthogonal box = (0 0 0) to (134.368 67.1838 67.1838)
2 by 1 by 2 MPI processor grid
Created 512000 atoms
... ...
```

- 作业形式提交。

```
$ cat job.sh # 作业内容
#!/usr/bin/env bash
mpirun lmp -in ./in.intel.lj

$ sbatch -N 2 -n 4 ./job.sh # 提交作业
```

```
Submitted batch job 235

$ squeue # 查看作业
JOBID PARTITION NAME USER ST TIME NODES NODELIST(REASON)
235 comp job.sh user R 0:03 2 s[02-03]
```

- 分配资源后提交

```
$ salloc -N 2 mpirun -n 4 lmp -in in.intel.lj
salloc: Granted job allocation 236
salloc: Waiting for resource configuration
salloc: Nodes s[02-03] are ready for job
LAMMPS (31 Mar 2017)
```

- 提交PBS作业（GPU加速版）

```
$ cat > lammps_single_node.pbs
#!/bin/sh
#PBS -l ncpus=28,mem=12gb
#PBS -l walltime=00:10:00
#PBS -o lammps_pbs.log
#PBS -j oe
cd /opt/lammps/31Mar17-openmpi/src
/opt/openmpi/bin/mpirun -np 28 /opt/lammps/31Mar17-openmpi/bin/lmp_mpi -sf gpu -pk gpu 2 -in ./in.intel.lj -v
m 0.1

$ qsub lammps_single_node.pbs
```

OpenFOAM

OpenFOAM

官网

http://www.openfoam.com/

简介

OpenFOAM（英文 Open Source Field Operation and Manipulation 的缩写，意为开源的场运算和处理软件）是对连续介质力学问题进行数值计算的C++自由软件工具包，其代码遵守GNU通用公共许可证。它可进行数据预处理、后处理和自定义求解器，常用于计算流体力学(CFD)领域。

算例1 “Motorbike”

准备工作

运行以下示例需要在创建集群时h选择安装OpenFOAM相关软件包

☑	openfoam-openmpi	5.0

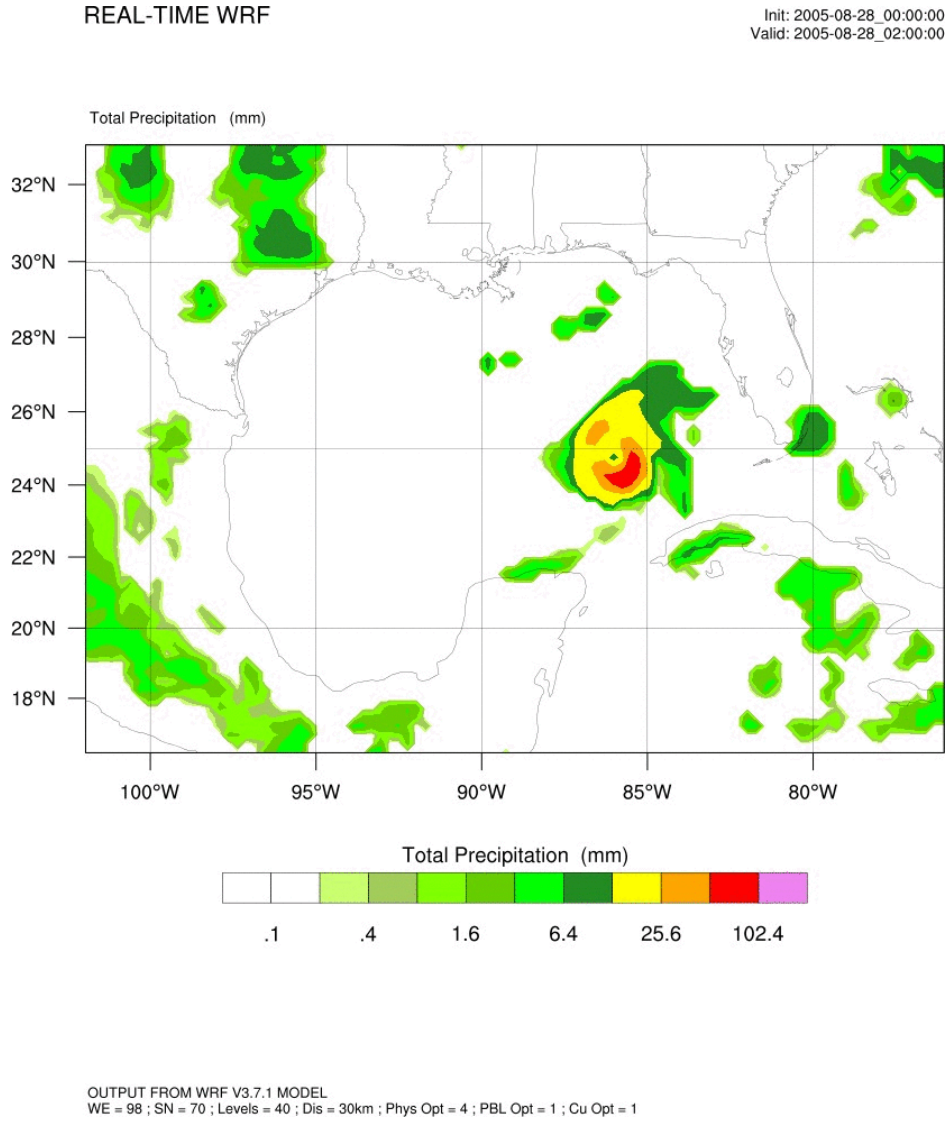
操作步骤

以下为OpenFOAM-5.0的示例

```
cd /opt/OpenFOAM/OpenFOAM-5.0
source etc/bashrc
cd tutorials/incompressible/simpleFoam/motorBike/
./Allrun
```

WRF

WRF



官网

http://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/

简介

WRF（Weather Research and Forecasting）是新一代中尺度预报模式，被广泛应用的开源气象模拟软件。

准备工作

运行以下示例需要在创建集群时选择安装WRF相关软件包。

算例1

下载链接：http://www2.mmm.ucar.edu/wrf/users/download/get_sources_wps_geog.html

运行步骤：

step 1. 运行module avail 查看是否安装WRF软件:

```
$ export MODULEPATH=/opt/ehpcmodulefiles/
$ module avail
------------------------------ /opt/ehpcmodulefiles -------------------------------------
wrf-mpich/3.8.1 wrf-openmpi/3.8.1 mpich/3.2.2 openmpi/1.10.7
```

step 2. module load 加载WRF:

```
$ module load wrf-mpich/3.8.1 mpich
$ echo $WPSHOME $WRFHOME
/opt/WRF_WPS-mpich-3.8.1/WPS /opt/WRF_WPS-mpich-3.8.1/WRFV3
```

Step 3. 将安装的WPS和WRF软件拷贝到工作目录，并将算例拷贝到相应目录位置。

```
$ cp –r $WPSHOME $WPSCOPYHOME
$ cp –r $WRFHOME $WRFCOPYHOME
```

Step 4. 进入WPSCOPYHOME软件目录，并执行：

```
$ srun --mpi=pmi2 –n 1 ./geogrid.exe
$ ./link_grib.csh 下载的气象数据
$ ln –sf ungrib/Variable_Tables/Vtable.GFS Vtable # 选择气象数据相应的Vtable，如GFS
$ srun --mpi=pmi2 –n 1 ./ungrib.exe
$ srun --mpi=pmi2 –n 1 ./metgrid.exe
```

Step 5. 进入WRFCOPYHOME软件的run目录，并执行：

```
$ ln –sf $WPSCOPYHOME/met_em* . #连接WPS的处理结果
$ srun --mpi=pmi2 –n 1 ./real.exe
$ srun --mpi=pmi2 –n 4 ./wrf.exe
```