

1.新服务器 环境以及软件安装

new Server environment and software installation

1.1 ubuntu 20.04 U盘 安装介质

[Ubuntu 官网](#)

[rufus U盘制作软件](#)

1.2 启动电脑按 Del 进入 Bios, 修改为U盘启动

1.3 默认用户名密码 dai dai123

需要联系sam 设置静态ip地址。

1.3.1 设置静态ip地址以及DNS等

1.4 修改ubuntu源

1.4.1 从GUI界面修改

可以在设置-Ubuntu软件中修改为cuhk 或者ustc等其他源，默认의香港源网速很慢

1.4.2 从CLI界面修改

```
sudo sed -i 's/hk.archive.ubuntu.com/mirrors.ustc.edu.cn/g' /etc/apt/sources.list
```

1.5 开启ssh 以及设置ssh开机启动

```
sudo apt install openssh-server  
sudo systemctl enable ssh
```

2.添加新用户

2.1 利用adduser 添加新用户 usermod 添加管理员权限

```
sudo adduser newusername  
sudo usermod -aG sudo newusername
```

上面的newusername 改成你想命名的用户名

2.2 修改hostname 用户名 以及密码

```
sudo hostnamectl set-hostname newname
```

3.安装必要的环境以及软件

3.1 安装预编译lammps以及使用

```
sudo add-apt-repository ppa:gladky-anton/lammps  
sudo add-apt-repository ppa:openkim/latest  
sudo apt-get update  
sudo apt-get install lammps-stable
```

依次使用上面的命令。(使用apt安装的软件可以使用apt remove 卸载。)

[lammps documentation](#)

使用方法:

```
lmp_stable -in in.file  
mpirun -np number_of_threads lmp_stable -in in.file
```

默认使用的是openmpi的mpirun，如果有bug，或者是使用 mpirun -np 1 会把所有任务分配到少数cpu核心上。可以安装mpich的多线程， sudo apt install mpich 。再修改软链接将mpirun链接到mpich上即可,sudo ln -s file new_link 。

3.1.2 安装编译版lammps

自编译版本lammps可以自选安装某些包，如果上述预编译不满足需求，按以下步骤。
下载压缩包或者直接使用git克隆lammps在github上的repository。

```
sudo apt install git
git clone -b stable https://github.com/lammps/lammps.git
cd lammps
mkdir build
cmake [option]../cmake
cmake --build .
make install
```

cmake option 从官网查看具体的编译选项。

安装快速傅里叶包fftw

```
sudo apt install libfftw3-dev
```

3.2 安装显卡驱动以及cuda

cuda download guide

按照官网的安装后，需要修改环境变量，将cuda目录加到path里。

```
sudo vim /etc/profile
```

将

```
export PATH=/usr/local/cuda-11.4/bin${PATH:+:${PATH}}
export LD_LIBRARY_PATH=/usr/local/cuda-11.4/lib64\${LD_LIBRARY_PATH:+:${LD_LIBRARY_PATH}}
```

这两行添加到文件末尾。保存退出后

```
source /etc/profile
```

完成上述操作，使用 `nvcc -V` 查看cuda版本号。

3.3 安装gmx以及添加环境变量

GROMACS 官方只提供源码，需要使用cmake自行编译。apt包管理的gromacs版本过旧且无法使用gpu加速。因此按照以下命令逐行输入：

安装cmake 3.x

```
sudo apt install cmake
```

在[gromacs官网](https://www.gromacs.org/)下载gromacs（如gromacs2021.3）

```
wget https://ftp.gromacs.org/gromacs/gromacs-2021.3.tar.gz
```

安装gromacs

```
tar xzf gromacs-2021.3.tar.gz

cd gromacs-2021

mkdir build

cd build

cmake .. -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON -DGMX_GPU=CUDA -DCUDA_TOOLKIT_ROOT_DIR=/usr/local/cuda-11.4 \
-DMAKE_INSTALL_PREFIX=/usr/local/gmx2021

make

make check

sudo make install
```

修改环境变量

在/etc/profile末尾添加: `source /usr/local/gmx2021/bin/GMXRC`

在命令行执行 `source /etc/profile`

每个用户都要自己执行一次 `source /etc/profile` 才可以正确配置gromacs的环境变量

卸载 在gromacs-2021/build/ 目录 `make uninstall`

4 连接服务器

4.1 使用公私钥对登录服务器

```
ssh-keygen
```

一路enter下来，会生成独一无二的密码对。其中id_rsa.pub是公钥文件，id_rsa是私钥文件。可以将公钥发给服务器管理员，或者自己手动添加到 ~/.ssh/authorized_keys 文件末尾。

```
sudo cat id_rsa.pub >>authorized_keys
```

基于公私钥登录的服务器更安全。

4.2 使用虚拟显示器

重启后如不连接显示器，默认是无法使用anydesk等远程桌面软件。
建立虚拟显示器可以解决此问题。

```
sudo apt install xserver-xorg-video-dummy
sudo vim /usr/share/X11/xorg.conf.d/xorg.conf
```

把下面内容粘贴进去

```
Section "Device"
    Identifier "DummyDevice"
    Driver "dummy"
    VideoRam 256000
EndSection

Section "Screen"
    Identifier "DummyScreen"
    Device "DummyDevice"
    Monitor "DummyMonitor"
    DefaultDepth 24
    SubSection "Display"
        Depth 24
        Modes "1920x1080_60.0"
    EndSubSection
EndSection

Section "Monitor"
    Identifier "DummyMonitor"
    HorizSync 30-70
    VertRefresh 50-75
    Modeline "1920x1080" 148.50 1920 2448 2492 2640 1080 1084 1089 1125 +Hsync +Vsync
EndSection
```

重启机器 `sudo reboot`