

“启明”

`gromacs`

手  
册

编写时间：2023 年 9 月

## 1. 目录

一、 介绍 .....	3
1.1. 简介 .....	3
1.2. 启明的gromacs .....	3
二、 使用软件 .....	3
2.1. 算例背景介绍 .....	3
2.2. 输入文件样例 .....	3
2.3. 加载该软件 .....	3
三、 作业样例 .....	4
3.1. 提交脚本 .....	4
3.2. 提交并查看作业 .....	5
3.3. 作业结果 .....	5
四、 注意事项 .....	5
4.1. 关于测试样例 .....	5
4.2. 联系方式 .....	5

## 一、介绍

### 1.1. 简介

GROMACS是用于研究生物分子体系的分子动力学程序包。它可以用分子动力学、随机动力学或者路径积分方法模拟溶液或晶体中的任意分子，进行分子能量的最小化，分析构象等。它的模拟程序包包含GROMACS力场(蛋白质、核苷酸、糖等)，研究的范围可以包括玻璃和液晶、到聚合物、晶体和生物分子溶液。GROMACS是一个功能强大的分子动力学的模拟软件，其在模拟大量分子系统的牛顿运动方面具有极大的优势。

更多内容，请参考官方网站：[www.gromacs.org](http://www.gromacs.org)

### 1.2. 启明的gromacs

启明集群上面已经安装配置好了2020.4版本的gromacs软件。软件所在位置：  
/share/apps/gromacs

## 二、使用软件

### 2.1. 算例背景介绍

本文使用的是Gromacs官网上的ADH\_bench\_systems测试算例，该算例为一蛋白质水溶液体系，体系共包含134177个粒子，为中等规模的分子动力学模拟体系。

### 2.2. 输入文件样例

输入样例文件为topol.tpr，该文件位于：/share/apps/gromacs/jobtest，用户可自行下载该文件到自己目录，进行测试。

### 2.3. 加载该软件

启明module已经做好配置，目前有以下处理器版本：

处理器型号：Intel Xeon Gold 可用队列：38、ot38、2t50c 对应软件编译版本：  
gromacs/il-2020.4

处理器型号：Intel Xeon E7&E5 可用队列：v3-6t、v3-64、v3-128 对应软件编译版本：  
gromacs/e5-2020.4

GPU版本可用队列：2a100-40、4a100-40、2a100-80、2v100 对应软件编译版本：  
gromacs/2020.4\_gpu

该文档提交gpu版本测试:

直接执行: `module load gromacs/2020.4_gpu`, 即可使用该软件。

```
[ccse-yangyc@b04u17l ~]$ module load gromacs/2020.4_gpu
Loading compiler version 2022.1.0
Loading tbb version 2021.7.0
Loading compiler-rt version 2022.2.0
Loading oclfpga version 2022.2.0
  Load "debugger" to debug DPC++ applications with the gdb-oneapi debugger.
  Load "dpl" for additional DPC++ APIs: https://github.com/oneapi-src/oneDPL
Loading mpi version 2021.6.0

Loading gromacs/2020.4_gpu
  Loading requirement: tbb/latest compiler-rt/latest oclfpga/latest compiler/2022.1.0 mpi/2021.6.0 cuda/11.8 python/anaconda3/2022.10
[ccse-yangyc@b04u17l ~]$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
 1) tbb/latest          3) oclfpga/latest      5) mpi/2021.6.0       7) python/anaconda3/2022.10
 2) compiler-rt/latest 4) compiler/2022.1.0  6) cuda/11.8          8) gromacs/2020.4_gpu
[ccse-yangyc@b04u17l ~]$
```

## 三、 作业样例

### 3.1. 提交脚本

提交脚本文件为 `test.lsf`, 该文件位于:

`/share/apps/gromacs/jobtest/test_gpu/gromacs_gpu.lsf`, 用户可自行下载该文件到自己目录, 进行测试。

脚本内容:

```
#!/bin/bash
#BSUB -J gromacs_gpu
#BSUB -q 2v100
#BSUB -n 2
#BSUB -e %J.err
#BSUB -o %J.out
#BSUB -R "span[ptile=2]"
#BSUB -gpu "num=2"
hostfile=`echo $LSB_DJOB_HOSTFILE`
NP=`cat $hostfile | wc -l`
cd $LS_SUBCWD

module load gromacs/2020.4_gpu
date > time.out

mpirun -np $NP -machinefile $LSB_DJOB_HOSTFILE gmx_mpi mdrun -v -
ntomp 1 -s topol.tpr > run.log 2>&1

date >> time.out
```

### 3.2. 提交并查看作业

```
[ccse-yangyc@b04u17l ~]$ bjobs < gromacs_gpu.lsf
```

```
[ccse-yangyc@b04u17l test_gpu]$ bjobs
```

JOBID	USER	STAT	QUEUE	FROM_HOST	EXEC_HOST	JOB_NAME	SUBMIT_TIME
74449	ccse-ya	PEND	2v100	b04u17l		*macs-test	Sep 28 18:23

### 3.3. 作业结果

结果文件为md.log

```
[ccse-yangyc@b04u17l test_gpu]$ tail md.log
```

```
NOTE: 13 % of the run time was spent in domain decomposition,  
21 % of the run time was spent in pair search,  
you might want to increase nstlist (this has no effect on accuracy)
```

	Core t (s)	Wall t (s)	(%)
Time:	140.520	70.260	200.0
	(ns/day)	(hour/ns)	
Performance:	24.597	0.976	

Finished mdrun on rank 0 Thu Sep 28 18:21:40 2023

```
[ccse-yangyc@b04u17l test_gpu]$
```

## 四、 注意事项

### 4.1. 关于测试样例

- 本文档测试样例，只是验证改软件能正常运行。
- 欢迎使用该软件的用户，提供更加好的样例，以便提高该软件的使用效率。

### 4.2. 联系方式

- 本文档由科学与工程计算中心编写，联系邮箱：[hpc@sustech.edu.cn](mailto:hpc@sustech.edu.cn)，联系人：谢作扬，电话：0755-88015831