

GROMACS



- - Opis
 - Verzije
 - Službena dokumentacija
 - Primjeri
 - Napomene
 - CPU
 - MPI
 - OpenMP
 - MPI + OpenMP
 - GPU
 - Single GPU
 - Multi GPU

Opis

GROMACS je računalno-kemijska aplikacija za molekulsku dinamiku (MD), a prvenstveno se koristi za simulacije makromolekula.

GROMACS se prvenstveno temelji na klasičnoj mehanici, što znači da koristi jednačbe gibanja klasične mehanike za izračunavanje kretanja molekule i njihovih segmenata.

MD simulacije mogu pružiti informacije o ponašanju i svojstvima molekula, poput njihovih konformacija, energija i interakcija s drugim molekulama.

GROMACS je aplikacija otvorenog koda, a podržava **hibridnu paralelizaciju, MPI + OpenMP**, kao i upotrebu grafičkih procesora koji značajno ubrzavaju MD izračune.

Verzije

CPU					
Verzija	Uključuje PLUMED	Modul	Suek	MPI implementacija (Suek)	Padobran
2022.5	v2.8.2	scientific/gromacs/2022.5-gnu	✓	Cray MPICH	✗
2023.1	v2.9.0	scientific/gromacs/2023.1-gnu	✓	Cray MPICH	✗

CPU

MPI

Aplikaciju možete dijeliti na razini MPI procesa. U primjeru niže, aplikacija će pokrenuti 32 MPI procesa.

PBS skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=32:mem=400mb
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/gromacs/2022.5-gnu

mpiexec gmxdrun -pin on -v -deffnm md
```

OpenMP

Ako aplikaciju želite dijeliti isključivo u OpenMP threadove, morate zatražiti jedan računalni čvor, budući da u ovom slučaju aplikacija radi s **dijeljenom** memorijom. U primjeru niže, aplikacija će se pokrenuti s 32 OpenMP threada.

Bash skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=1:ncpus=32:mem=12gb

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/gromacs/2022.5-gnu

gmxdrun -pin on -v -deffnm md
```

MPI + OpenMP

Budući da aplikacija podržava hibridnu paralelizaciju, MPI procese možete podijeliti na OpenMP threadove. U primjeru niže, aplikacija će stvoriti 8 MPI procesa, podijeljenih u 4 OpenMP threada.

✓ GROMACS preporučuje između 2 i 8 threadova po MPI procesu.

PBS skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=8:ncpus=4:mem=2gb
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/gromacs/2022.5-gnu

mpiexec -d ${OMP_NUM_THREADS} --cpu-bind depth gmxdrun -pin on -v -deffnm md
```

2023.4	-	scientific/gromacs/2023.4/openmpi-5.0.1/gcc-11.2.1	✓	Open MPI	✗	<div>GPU</div> <div>Aplikacija podržava rad s grafičkim procesorom, odnosno rad s više grafičkih procesora.</div> <div>Single GPU</div> <div>MPI + OpenMP</div> <div>U primjeru niže, aplikacija će koristiti jedan grafički procesor te osam procesorskih jezgara.</div>
2024.2	v2.10.0	scientific/gromacs/2024.2	✗	Open MPI	✓	<div>PBS skripta</div> <div>MPI + OpenMP</div> <div>#PBS -q gpu</div> <div>#PBS -l select=1:ngpus=1:ncpus=8:mem=12gb</div> <div>cd \${PBS_O_WORKDIR}</div> <div>Paralelizacija</div> <div>module load scientific/gromacs/2022.5-cuda</div> <div>gmx mdrun -pin on -v -deffnm md</div>
Verzija	Uključuje PLUMED	Modul	Supek	MPI implementacija (Supek)	Padobran	
2022.5	-	scientific/gromacs/2022.5-cuda	✓	Cray MPICH	✗	<div>Multi GPU</div> <div>MPI + OpenMP</div> <div>Prilikom pozivanja aplikacije s mpiexec, svaki MPI proces dodijeli se jednom grafičkom procesoru (putem varijable <code>CUDA_VISIBLE_DEVICES</code>), a svaka OpenMP nit (putem varijable <code>OMP_NUM_THREADS</code>) jednoj procesorskoj jezgri. U primjeru niže, aplikacija će koristiti dva grafička procesora te po četiri procesorske jezgre za svaki grafički procesor.</div>
2023.1	-	scientific/gromacs/2023.1-cuda	✓	Cray MPICH	✗	<div>PBS skripta</div> <div>#PBS -q gpu</div> <div>#PBS -l select=2:ngpus=1:ncpus=4:mem=6gb</div> <div>#PBS -l place=pack</div> <div>cd \${PBS_O_WORKDIR}</div> <div>module load scientific/gromacs/2022.5-cuda</div> <div>mpiexec -d \${OMP_NUM_THREADS} --cpu-bind depth gmx mdrun -pin on -v -deffnm md</div>

Službena dokumentacija

- <https://manual.gromacs.org/current/index.html>

Primjeri

Napomene



Podrazumijevano PBS ponašanje je „slobodno“ razmještanje *chunkova* po slobodnim čvorovima.

Cray MPICH

Zbog aktualnog **cray-pals** buga, trenutno je ograničen broj poslova koji se mogu širiti van čvora kad koriste **Cray MPICH**. Ako Vaš posao prijeđe taj limit te proširi svoje MPI procese na druge čvorove, prekinut će se. Kako bi sigurno izbjegli bug, potrebno je sve MPI procese smjestiti na isti čvor. Najjednostavniji način je korištenjem opcije **#PBS -l place=pack**.

MPI pokretač za Cray MPICH verzije:

```
mpiexec [-d $OMP_NUM_THREADS --cpu-bind depth] pw.x
```

Open MPI

U slučaju korištenja Open MPI-ja, moguće je izostaviti gore spomenutu *pack* opciju.

MPI pokretač za Open MPI verzije:

```
mpirun --hostfile $PBS_NODEFILE gmx
```



GPU iskorištenje se u slučaju korištenja više grafičkih procesora kreće se do maksimalno 50% (kod korištenja 2 GPU-a) u većem broju testiranih primjera.

Iz tog razloga, razmotrite korištenje jednog grafičkog procesora i više procesorskih jezgri. **GPU iskorištenje se u slučaju korištenja 1 GPU + 8 CPU kreće i do 85%.**



Kad u zaglavlju PBS skripte definirate vrijednost varijable **ncpus**, u okolinu se automatski doprema ista vrijednost **OMP_NUM_THREADS** varijable.