

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 jednadžbe 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						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 thredada.
Verzija	Uključuje PLUMED	Modul	Supek	MPI implementacija (Supek)	Padobran	
2022.5	v2.8.2	scientific /gromacs /2022.5-gnu	✓	Cray MPICH	✗	<p>PBS skripta</p> <pre>#PBS -q cpu #PBS -l select=1:ncpus=32:mem=12gb cd \${PBS_O_WORKDIR} module load scientific/gromacs/2022.5-gnu gmx mdrun -pin on -v -deffnm md</pre>
2023.1	v2.9.0	scientific /gromacs /2023.1-gnu	✓	Cray MPICH	✗	<p>PBS skripta</p> <pre>#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 gmx mdrun -pin on -v -deffnm md</pre>

2023.4	-	scientific/gromacs/2023.4/openmpi-5.0.1/gcc-11.2.1		Open MPI		<p>GPU</p> <p>Aplikacija podržava rad s grafičkim procesorom, odnosno rad s više grafičkih procesora.</p> <p>Single GPU MPI + OpenMP</p> <p>U primjeru niže, aplikacija će koristiti jedan grafički procesor te osam procesorskih jezgara.</p>
Verzija	Uključuje PLUMED	Modul	Supek	MPI implementacija (Supek)	Padobran	PBS skripta
2022.5	-	scientific/gromacs/2022.5-cuda		Cray MPICH		<pre>#PBS -q gpu #PBS -l select=1:ngpus=1:ncpus=8:mem=12gb cd \${PBS_O_WORKDIR} module load scientific/gromacs/2022.5-cuda gmx mdrun -pin on -v -deffnm md MPI + OpenMP</pre>
2023.1	-	scientific/gromacs/2023.1-cuda		Cray MPICH		Multi GPU

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** boga, 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 spomenuto *pack* opciju.

MPI pokretač za Open MPI verzije:

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

PBS skripta

```
#PBS -q gpu
#PBS -l select=2:ngpus=1:ncpus=4:mem=6gb
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/gromacs/2022.5-cuda

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

 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 zagлавju PBS skripte definirate vrijednost varijable `ncpus`, u okolinu se automatski doprema ista vrijednost `OMP_NUM_THREADS` varijable.