

Gromacs

GROMACS je paket za izvođenje simulacija dinamike molekula, npr. simulacija Newtonovih jednažbi gibanja sistema s velikim brojem čestica (od nekoliko tisuća, pa do više milijuna). Primarno je dizajniran za biokemijske molekule kao što su proteini, lipidi i nukleinske kiseline koje imaju velik broj kompliciranih vezanih interakcija, ali s obzirom da je GROMACS iznimno brz pri računanju nevezanih interakcija, mnogi ga koriste i za istraživanje ne bioloških sistema tipa polimera.

GROMACS podržava sve tipične algoritme očekivane kod implementacije dinamike molekula (više detalja u priručniku), ali pruža iznimno visoke performanse u usporedbi s drugim paketima. Paralelizam se postiže koristeći kombinirajući OpenMPI i OpenMP.

Korištenje

Na klasteru su instalirane varijante programskog paketa Gromacs u višedretvenoj i MPI izvedbi za CPU (klasični procesori) i GPU (grafički procesori).

Dostupne verzije su:

Verzija	Implementacija	Modul	Napomena
5.1.4	single precision multithread	gromacs/5.1.4	Koristiti isključivo uz *mpisingle
5.1.4	double precision multithread	gromacs/5.1.4-double	Koristiti isključivo uz *mpisingle
5.1.4	single precision MPI	gromacs/5.1.4-mvapich22	
5.1.4	double precision MPI	gromacs/5.1.4-mvapich22-double	
2018.4	single precision multithread	gromacs/2018.4	Koristiti isključivo uz *mpisingle
2018.4	double precision multithread	gromacs/2018.4-double	Koristiti isključivo uz *mpisingle
2018.4	single precision MPI	gromacs/2018.4-mvapich22	
2018.4	double precision MPI	gromacs/2018.4-mvapich22-double	
2018.4	single precision multithread + GPU	gromacs/2018.4-gpu	Koristiti isključivo uz gpusingle
2018.4	single precision MPI + GPU	gromacs/2018.4-mvapich2-gpu	
2018.6	single precision multithread + Plumed	gromacs/2018.6	Koristiti isključivo uz *mpisingle
2018.6	double precision multithread + Plumed	gromacs/2018.6-double	Koristiti isključivo uz *mpisingle
2018.6	single precision MPI + Plumed	gromacs/2018.6-mvapich22	
2018.6	double precision MPI + Plumed	gromacs/2018.6-mvapich22-double	
2018.6	single precision multithread + GPU + Plumed	gromacs/2018.6-gpu	Koristiti isključivo uz gpusingle
2018.6	single precision MPI + GPU + Plumed	gromacs/2018.6-mvapich2-gpu	
2020.6	single precision MPI + OpenMP+ Plumed	gromacs/2020.6	
2020.6	double precision MPI +OpenMP + Plumed	gromacs/2020.6-double	
2020.6	single precision multithread + GPU + Plumed	gromacs/2020.6-gpu	Koristiti isključivo uz gpusingle
2020.6	single precision MPI + GPU + Plumed	gromacs/2020.6-mvapich22-gpu	
2021.4	mixed precision MPI + OpenMP + Plumed	gromacs/2021.4-mvapich22	
2021.4	double precision MPI + OpenMP + Plumed	gromacs/2021.4-mvapich22-double	
2021.4	mixed precision multithread + GPU + Plumed	gromacs/2021.4-gpu	Koristiti isključivo uz gpusingle
2021.4	mixed precision MPI + GPU + Plumed	gromacs/2021.4-mvapich22-gpu	
2021.4	mixed precision MPI + Plumed (2.8.0, svi moduli)	gromacs/2021.4-mvapich2-fullplumed	
2021.4	mixed precision MPI + GPU + Plumed (2.8.0, svi moduli)	gromacs/2021.4-mvapich2-gpu-fullplumed	
2022	mixed precision MPI + OpenMP	gromacs/2022	
2022	mixed precision multithread + GPU	gromacs/2022-gpu	Koristiti isključivo uz gpusingle
2022	mixed precision MPI + GPU	gromacs/2022-mvapich22	
2023	mixed precision MPI + OpenMP	gromacs/2023	

2023	mixed precision MPI + GPU	gromacs/2023-gpu	
------	---------------------------	------------------	--

CPU verzije

Primjer korištenja višedretvene verzije:

```
#$ -pe *mpisingle 8

module load gromacs/5.1.4
gmxdmrun -nt $NSLOTS -nice 0 -v -c conf30.gro -s topol30.tpr -px pullx30.xvg -pf pullf30.xvg -g md30.log -e ener30.edr -x traj30.xtc -cpi state.cpt -append
```



Važno

Gromacs verzija 5.1.4 zahtijeva parametar "-nice 0", kod novijih verzija taj parametar nije potreban.



Važno

Ukoliko neki od novijih CPU Gromacs module-a:

- **gromacs/2020.6**
- **gromacs/2021.4-mvapich22**
- **gromacs/2022**

koristite u ***mpisingle** paralelnom okruženju, broj jezgri zadajete korištenjem zastavice **-ntomp**:

```
#$ -pe *mpisingle 8

module load gromacs/2021.4-mvapich22
gmxdmrun -ntomp $NSLOTS -v -c conf30.gro -s topol30.tpr -px pullx30.xvg -pf pullf30.xvg -g md30.log -e ener30.edr -x traj30.xtc -cpi state.cpt -append
```

Primjer korištenja MPI verzije:

```
#$ -pe *mpifull 56

module load gromacs/2018.4
mpirun_rsh -np $NSLOTS -hostfile $TMPDIR/machines -export-all gmxdmrun -ntomp 1 -v -c conf30.gro -s topol30.tpr -px pullx30.xvg -pf pullf30.xvg -g md30.log -e ener30.edr -x traj30.xtc -cpi state.cpt -append
```

GPU verzije

Primjer korištenja višedretvene verzije:

```
#$ -pe gpusingle 4

module load gromacs/2018.4-gpu
cuda-wrapper.sh gmxdmrun -nt $NSLOTS -v -c conf30.gro -s topol30.tpr -px pullx30.xvg -pf pullf30.xvg -g md30.log -e ener30.edr -x traj30.xtc -cpi state.cpt -append
```



Važno

Aplikacija u višedretvenoj izvedbi se mora pozivati s **cuda-wrapper.sh**!

Primjer korištenja MPI verzije:

```
#$ -pe *gpu 8
```

```
module load gromacs/2018.4-mvapich22-gpu  
mvapich-wrapper.sh gmx mdrun -ntomp 1 -v -c conf30.gro -s topol30.tpr -px pullx30.xvg -pf pullf30.xvg -g md30.  
log -e ener30.edr -x traj30.xtc -cpi state.cpt -append
```



Važno

Aplikacija u MPI izvedbi se mora pozivati s **mvapich-wrapper.sh**!

Korištenje više procesorskih jezgri

Ukoliko je potrebno, moguće je zatražiti više procesorskih jezgri, korištenjem atributa `cores`.

BITNO:

- navedeni broj se odnosi na broj procesorskih jezgri po zahtijevanom grafičkom procesoru



Važno

Aplikacija koja koristi više procesorskih jezgri se mora pozivati s **cuda-wrapper-nopin.sh**, odnosno **mvapich-wrapper-nopin.sh**!

Primjeri korištenja višedretvene verzije:

```
#$ -N gromacs-cpugpu  
#$ -pe gpusingle 2  
#$ -l cores=9  
#$ -cwd
```

```
module load gromacs/2018.4-gpu
```

```
cuda-wrapper-nopin.sh gmx mdrun -ntmpi $NSLOTS -ntomp 9 -v -s topol32.tpr -x traj.xtc -cpi state.cpt -append -c  
conf32.gro
```

```
#$ -N gromacs-cpugpu  
#$ -pe gpusingle 3  
#$ -l cores=6  
#$ -cwd
```

```
module load gromacs/2018.4-gpu
```

```
cuda-wrapper-nopin.sh gmx mdrun -ntmpi $NSLOTS -ntomp 6 -v -s topol32.tpr -x traj.xtc -cpi state.cpt -append -c  
conf32.gro
```

Primjer korištenja MPI verzije:

```
#$ -N gromacs-cpugpu  
#$ -pe gpu 3  
#$ -l cores=6  
#$ -cwd
```

```
module load gromacs/2018.4-mvapich22-gpu
```

```
mvapich-wrapper-nopin.sh gmx mdrun -ntomp 6 -v -s topol32.tpr -x traj.xtc -cpi state.cpt -append -c conf32.gro
```