

Gromacs w/ cp2k

GROMACS u ovoj izvedbi koristi prethodno kompajliran `libcp2k.a` CP2K library te iste FFT, BLAS i LAPACK *library*-je koje je CP2K koristio prilikom kompajliranja. Integracija GROMACS-a i CP2K-a omogućuje [dodatnu funkcionalnost](#) GROMACS-a.

GROMACS u svojoj dokumentaciji navodi da je zapis broja s dvostrukom preciznosti (*double-precision floating-point format*) preporučen za QM/MM simulacije. Nadalje, uzevši u obzir da CP2K FFT *library* koristi *double-precision* format, GROMACS je dostupan isključivo kao *double-precision* verzija. To također ograničava dostupnost GROMACS-a samo na CPU verziju, obzirom da je uvjet GPU (CUDA) verzije *single-precision*, odnosno *mixed-precision build* GROMACS-a.

Verzija	Implementacija	Modul
GROMACS v2022 w/ CP2K v9.1.0	double precision mpi	gromacs-cp2k/2022-9.1.0

Primjeri korištenja

Za pokretanje primjera niže, potrebno je preuzeti datoteku [topol.tpr](#) te ju postaviti u isti direktorij sa SGE skriptom.

Korištenje paralelne okoline `mpi`:

run-mpi.sge

```
#!/bin/bash

#$ -N gmx_cp2k
#$ -cwd
#$ -pe *mpi 20

# Učitavanje modula:
module load gromacs-cp2k/2022-9.1.0

# Pokretanje posla:
mpirun -np ${NSLOTS} --machinefile ${TMPDIR}/machines gmx_cp2k mdrun -ntomp 1 -pin on -v -s topol.tpr
```

Korištenje paralelne okoline `mpisingle`:

run-mpisingle.sge

```
#!/bin/bash

#$ -N gmx_cp2k
#$ -cwd
#$ -pe *mpisingle 8

# Učitavanje modula:
module load gromacs-cp2k/2022-9.1.0

# Pokretanje posla:
gmx_cp2k mdrun -ntomp ${NSLOTS} -pin on -v -s topol.tpr
```