

中心 Gromacs 使用指南

- 1、以下内容中 `hpc-user` 表示用户已开通的高性能帐号；`login node` 表示不同分区登录节点；`compiling node` 表示不同分区登录节点；
- 2、在编译节点也可以提交任务；
- 3、文件及文件夹命名方式仅供参考；
- 4、在作业提交之前，建议使用者熟悉 Linux 操作的几个常用命令（例如：`vi` 或 `vim`、`cd`、`mkdir`、`ls`、`pwd` 等）和 Gromacs 建模。

一、作业提交

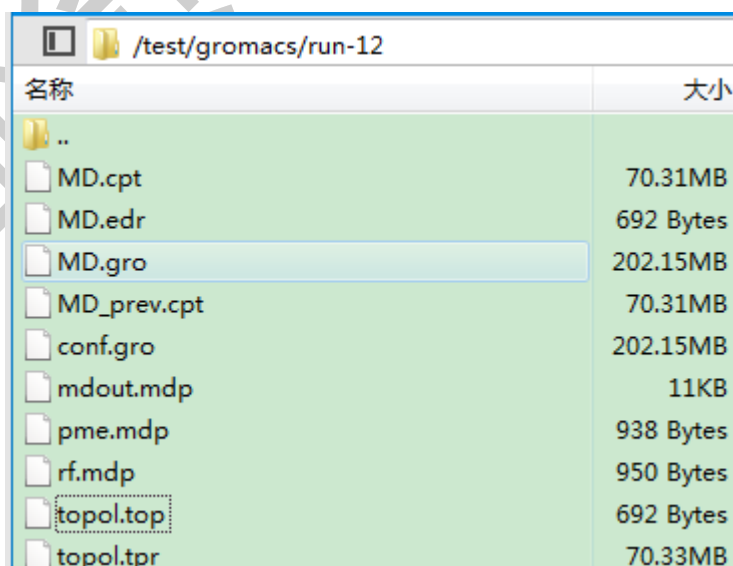
- 1、在电脑上用 Xshell 客户端（或其他类似软件）登陆高性能账号，若不知道自己的高性能帐号在哪个分区，登陆帐号以后输入：`pwd`，可以看到如下图，`home-`后面的就是高性能帐号所在的分区（图中为 YW 分区）：

```
[nsyw211_LZ@ycn24 ~]$ pwd
/home-yw/users/nsyw211_LZ
```

- 2、如需直接提交作业，在高性能账号下创建放计算任务的文件夹 `test/gromacs/run-12`（该名称可以根据自己习惯命名）：

```
hpc-user@login node:~> mkdir -p test/gromacs/run-12
```

- 3、用 FTP 工具登录高性能帐号，将计算所需的算例文件通过 XFTP（或类似工具）上传至账号目录下 `test/gromacs/run-12`：



名称	大小
..	
MD.cpt	70.31MB
MD.edr	692 Bytes
MD.gro	202.15MB
MD_prev.cpt	70.31MB
conf.gro	202.15MB
mdout.mdp	11KB
pme.mdp	938 Bytes
rf.mdp	950 Bytes
topol.top	692 Bytes
topol.tpr	70.33MB

- 4、切换至 Xshell 界面，进入算例文件夹中：

```
hpc-user@login node:~> cd test/gromacs/run-12
```

- 5、创建或拷贝提交作业脚本文件 `gromacs-515_YW.lsf`（也可在 Windows 系统写好以后用 FTP 工具上传；现以 YW 分区直接从公共目录中拷贝为例），Gromacs 软件脚本的路径在 `/home-yw/soft/jobscripts/` 中。先查看脚本是否存在，图中 `gromacs-515_YW.lsf` 即为 5.1.5 版本所需脚本（如需 2018.4，请拷贝对应的脚本）：

```
[nsyw145_QLL@ycn24 ~]$ ls /home-yw/soft/jobscripts/
Gaussian09D01  VASP5.4.1          gromacs-515_YW.lsf      namd-2.11_YW.lsf      qe-6.3_YW.lsf
MOLPRO        cp2k-6.1_YW.lsf    lammps-zvionar10_YW.lsf namd-2.12_YW.lsf      wrf-4.0_YW.lsf
MS            gromacs-2018.4_YW.lsf lammps-2019Aug07_YW.lsf nwchem-6.6_YW.lsf
[nsyw145_QLL@ycn24 ~]$
```

- 6、采用您最熟悉的方式将上述脚本拷贝至需要提交任务的文件夹中（注意 `cp` 后、`./` 前有空格）：

```
hpc-user@login node:~/test/gromacs/run-12> cp /home-yw/soft/jobscripts/gromacs-515_YW.lsf ./
```

```
[nsyw211_LZ@ycn24 run-12]$ cp /home-yw/soft/jobscripts/gromacs-515_YW.lsf ./
```

- 7、修改模板脚本：

```
hpc-user@login node:~/test/gromacs/run-12> vi gromacs-515_YW.lsf
```

- 8、输入字母“i”，进入编辑模式。脚本内容如下，部分内容需要根据情况进行修改：

- 1、`APP_NAME=intely_mid` 为提交作业计算的队列，不同的分区、不同的核数所使用的队列不相同，参见[各分区提交作业脚本及队列说明](#)；
- 2、`NP=12` 为计算该作业设置的核数，可以根据任务的需要进行修改。除 FN 分区外，其他分区每个节点 12 核（FN 分区 32 核），需要跨节点并行时，建议使用 12 的多倍值（新节点除外）；
- 3、`-nb cpu -nsteps 1000` 为指定 `cpu` 计算、计算步数；
- 4、`topol.tpr` 为输入文件名，要修改为需计算任务的名称。

```
#!/bin/bash
APP_NAME=intely_mid
NP=12
NP_PER_NODE=12
RUN="RAW"
CURDIR=$PWD
```

```
source /home-yw/soft/envdir/gromacs-5.1.5-intel2016-openmpi-1.4.4-intel-fftw-3.3.4.sh

echo -n "start time " > time
date >> time

mpirun -np $NP gmx_mpi mdrun -nb cpu -nsteps 1000 -deffnm MD -v -s topol.tpr
echo -n "end time " >> time ; date >> time
```

- 9、按下键盘上的 `esc` 键后，输入 `:wq` 保存脚本文件，并退出。
- 10、将脚本文件转换为 UNIX 格式（如从 Windows 系统上传的话必须要转换，不然提交作业时时报错；若直接拷贝公共目录中的脚本，并在 Linux 环境中进行修改，则可以省略步骤 10、11。若提交作业的脚本名称不为 `gromacs-515_YW.lsf`，则需要修改为对应的脚本名称）：

```
hpc-user@login node:~/test/gromacs/run-12> dos2unix gromacs-515_YW.lsf
```

- 11、赋予脚本文件可执行权限：

```
hpc-user@login node:~/test/gromacs/run-12> chmod +x gromacs-515_YW.lsf
```

- 12、用 `bsub` 命令提交作业脚本：

```
hpc-user@login node:~/test/gromacs/run-12> bsub gromacs-515_YW.lsf
```

```
[nsyw211_LZ@ycn24 run-12]$ bsub gromacs-515_YW.lsf
Job <3343191> is submitted to queue <intelY_mid>.
```

- 13、如果提交正确，则会出现如下内容（其中 `Job` 后面的数字为：`JobID`，每个任务的 `JobID` 不一样，可根据 `JobID` 查看该任务情况，出问题，请及时告知 `JobID`，保留计算的输出文件）：

```
Job <3343191> is submitted to queue <intelY_mid>.
```

- 14、查看任务是否计算完成，可以使用 `bjobs` 命令（当出现：`Done successfully. The CPU time used is xxxx seconds` 说明计算结束）：

```
hpc-user@login node:~/test/gromacs/run-12> bjobs -l 3343191
```

```
[nsyw211_LZ@ycn24 run-12]$ bjobs -l 3343191

Job <3343191>, User <nsyw211_LZ>, Project <default>, Application <ywapp>, Status <DONE>, Queue <intelY_mid>, Job Priority <50>, Command <gromacs-515_YW.lsf>
Sun Jan 19 17:27:49 2020: Submitted from host <ycn24>, CWD <${HOME}/test/gromacs/run-12>, Output File </home-yw/users/nsyw211_LZ/test/gromacs/run-12/output.%J>, Notify when job ends, 12 Processors Requested, Requested Resources < span[ptile=12] >;
Sun Jan 19 17:27:57 2020: Started on 12 Hosts/Processors <12*ys1735>, Execution Home </home-yw/users/nsyw211_LZ>, Execution CWD </home-yw/users/nsyw211_LZ/test/gromacs/run-12>;
Sun Jan 19 17:36:44 2020: Done successfully. The CPU time used is 6092.8 seconds.
```

- 15、任务计算结束后，可以查看输出文件，检查任务是否计算成功（作业脚本中指定的输出文件）：

```
hpc-user@login node:~/test/gromacs/run-12>tail MD.log
```

- 16、如果计算成功，在输出文件 MD.log 的最后会出现如下部分：

```
[nsyw211_LZ@ycn24 run-12]$ tail MD.log
NOTE: 3 % of the run time was spent in domain decomposition,
      12 % 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:         6054.528     509.310           1188.8
              (ns/day)    (hour/ns)
Performance:   0.340       70.667
Finished mdrun on rank 0 Sun Jan 19 17:38:24 2020
[nsyw211_LZ@ycn24 run-12]$
```

- 17、计算完成后，继续进行后续操作或用 FTP 工具将文件下载后，进行分析。

二、短时间使用软件相关命令

- 1、Gromacs 软件安装完成后会生成如下可执行文件：

```
[nsyw145_QLL@ycn24 ~]$ ls /home-yw/soft/packagedir/gromacs-5.1.5/gromacs-5.1.5/gromacs/bin
GMXRC GMXRC.bash GMXRC.csh GMXRC.zsh demux.pl gmx-completion-gmx_mpi.bash gmx-completion.bash gmx_mpi xplor2gmx.pl
[nsyw145_QLL@ycn24 ~]$
```

- 2、若需直接使用 Gromacs 软件的可执行文件进行短时间文件处理或操作，必须进入编译节点，请选择相应分区的编译节点：`ssh +编译节点 IP/名称`。
- 3、把脚本中关于 Gromacs 的环境变量拷贝/添加至账号的 `~/.bashrc` 文件下即可（以 YW 分区 5.1.5 版为例，添加 `source /home-yw/soft/envdir/gromacs-5.1.5-intel2016-openmpi-1.4.4-intel-fftw-3.3.4.sh`，注意 `source` 后面有空格）：

```
hpc-user@compiling node:~/test/gromacs/run-12> vim ~/.bashrc
```

```
o Source global definitions
if [ -f /etc/bashrc ]; then
    . /etc/bashrc
fi
PS1='\[\e[1;31m\][\u@\h \W]\$'\[\e[0m\] '
# User specific aliases and functions
LANG=C
source /home-yw/soft/envdir/gromacs-5.1.5-intel2016-openmpi-1.4.4-intel-fftw-3.3.4.sh
```

- 4、若不会使用 vi/vim 命令，请参考 vi/vim-创建/编辑文件。添加完成后，按下键盘上的 `esc` 键后，输入 `:wq` 保存脚本文件，并退出。
- 5、需要执行 `source ~/.bashrc`，才能使其生效（若已经添加，则不用再添加，直接进入编译节点进行操作即可）。
- 6、即可进行短时间文件处理或操作。