Gromacs-2021.3 (???? GPU??)

4. Gromacs-2021.3 (????GPU??)

???

使用 Singularity容器解决方案，调用 /fs00/software/singularity-images/ngc_gromacs_2021.3.sif完成 Gromacs的能量最小化（em）、平衡模拟（nvt、npt）以及成品模拟（md）在公共共享 100%GPU队列 722080tiib、72rtxib、723090ib的表现。

?????

队列	节点数	每节点 **CPU**	每节点内存 **(GB)**	平均每核内存 **(GB)**	**CPU**主频 **(GHz)**	每节点 **GPU**数量	每 **GPU** 显存 **(GB)**	浮点计算理论峰值 **(TFLOPS)**
83a100ib	1	64	512	8	2.6	8	40	双精度 :82.92 单精度 :------
723090ib	2	48	512	10.7	2.8	8	24	双精度 :4.30 单精度 :569.28
722080tiib	4	16	128	8.0	3.0	4	11	双精度 :3.07 单精度 :215.17
72rtxib	3	16	128	8.0	3.0	4	24	双精度 :2.30 单精度 :195.74

前人关于 Gromacs-2021.3(全部相互作用用 GPU计算)的测试报告中，尝试用 GPU来模拟 102808个原子体系（464 residues, 9nt DNA, 31709 SOL, 94 NA, 94 CL）50 ns内所有相互作用的运算，结果表明 **83a100ib**（

250 ns/day以上) > **723090ib**（ **220 ns/day**以上) > **722080tiib**（ **170 ns/day**以上) > **72rtxib**（ **180 ns/day**以上) ，但 83a100ib和 723090ib队列常年存在 80以上的 NJOBS

，因此作为成品模拟的前期准备，笔者通常不使用这两个队列。

?????

```
/fs00/software/singularity-images/ngc\_gromacs\_2021.3.sif
```

?????

能量最小化（ **em.lsf**）

```
#BSUB -q 72rtxib
#BSUB -gpu "num=1"
export OMP_NUM_THREADS="$LSB_DJOB_NUMPROC"
SINGULARITY="singularity run --nv /fs00/software/singularity-images/ngc_gromacs_2021.3.sif"
${SINGULARITY} gmx grompp -f minim.mdp -c 1aki_solv_ions.gro -p topol.top -o em.tpr
${SINGULARITY} gmx mdrun -nb gpu -ntmpi 2 -deffnm em
```

平衡模拟（ **nvt**）

```
#BSUB -q 72rtxib
#BSUB -gpu "num=1"
export OMP_NUM_THREADS="$LSB_DJOB_NUMPROC"
SINGULARITY="singularity run --nv /fs00/software/singularity-images/ngc_gromacs_2021.3.sif"
${SINGULARITY} gmx grompp -f nvt.mdp -c em.gro -r em.gro -p topol.top -o nvt.tpr
${SINGULARITY} gmx mdrun -nb gpu -ntmpi 2 -deffnm nvt
```

平衡模拟（ **npt**）

```
#BSUB -q 72rtxib
#BSUB -gpu "num=1"
export OMP_NUM_THREADS="$LSB_DJOB_NUMPROC"
SINGULARITY="singularity run --nv /fs00/software/singularity-images/ngc_gromacs_2021.3.sif"
${SINGULARITY} gmx grompp -f npt.mdp -c nvt.gro -r nvt.gro -t nvt.cpt -p topol.top -o npt.tpr
${SINGULARITY} gmx mdrun -nb gpu -ntmpi 2 -deffnm npt
```

成品模拟（ **md**）

```
#BSUB -q 723090ib
#BSUB -gpu "num=1"
export OMP_NUM_THREADS="$LSB_DJOB_NUMPROC"
SINGULARITY="singularity run --nv /fs00/software/singularity-images/ngc_gromacs_2021.3.sif"
${SINGULARITY} gmx grompp -f md.mdp -c npt.gro -t npt.cpt -p topol.top -o md_0_1.tpr
${SINGULARITY} gmx mdrun -nb gpu -bonded gpu -update gpu -pme gpu -pmefft gpu -deffnm md_0_1
```

□□□□□ **md**□

□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□

```
#BSUB -q 723090ib
#BSUB -gpu "num=1"
export OMP_NUM_THREADS="$LSB_DJOB_NUMPROC"
SINGULARITY="singularity run --nv /fs00/software/singularity-images/ngc_gromacs_2021.3.sif"
${SINGULARITY} gmx pdb2gmx -f protein.pdb -o protein_processed.gro -water tip3p -ignh -merge
all <<< 4
${SINGULARITY} gmx editconf -f protein_processed.gro -o pro_newbox.gro -c -d 1.0 -bt cubic
${SINGULARITY} gmx solvate -cp pro_newbox.gro -cs spc216.gro -o pro_solv.gro -p topol.top
${SINGULARITY} gmx grompp -f ../MDP/ions.mdp -c pro_solv.gro -p topol.top -o ions.tpr
${SINGULARITY} gmx genion -s ions.tpr -o pro_solv_ions.gro -p topol.top -pname NA -nname CL -
neutral <<< 13
${SINGULARITY} gmx grompp -f ../MDP/minim.mdp -c pro_solv_ions.gro -p topol.top -o em.tpr
${SINGULARITY} gmx mdrun -v -deffnm em
${SINGULARITY} gmx energy -f em.edr -o potential.xvg <<< "10 0"
${SINGULARITY} gmx grompp -f ../MDP/nvt.mdp -c em.gro -r em.gro -p topol.top -o nvt.tpr
${SINGULARITY} gmx mdrun -deffnm nvt
${SINGULARITY} gmx energy -f nvt.edr -o temperature.xvg <<< "16 0"
${SINGULARITY} gmx grompp -f ../MDP/npt.mdp -c nvt.gro -r nvt.gro -t nvt.cpt -p topol.top -o
npt.tpr
${SINGULARITY} gmx mdrun -deffnm npt
${SINGULARITY} gmx energy -f npt.edr -o pressure.xvg <<< "18 0"
${SINGULARITY} gmx grompp -f ../MDP/md.mdp -c npt.gro -t npt.cpt -p topol.top -o md.tpr
${SINGULARITY} gmx mdrun -v -deffnm md
${SINGULARITY} gmx rms -f md.xtc -s md.tpr -o rmsd.xvg <<< "4 4"
```

?????

```
GROMACS version:    2021.3-dev-20210818-11266ae-dirty-unknown
Precision:          mixed
Memory model:       64 bit
MPI library:        thread_mpi
OpenMP support:     enabled (GMX_OPENMP_MAX_THREADS = 64)
GPU support:        CUDA
SIMD instructions:  AVX2_256
FFT library:        fftw-3.3.9-sse2-avx-avx2-avx2_128-avx512
CUDA driver:        11.20
CUDA runtime:       11.40
```

?????

```
ATOM 218234 (401 Protein residues, 68414 SOL, 9 Ion residues)


nsteps = 100000000 ; 200 ns
```

eScience中心 GPU测试: 能量最小化（ em）、平衡模拟（ nvt、npt）使用 1个 GPU进行模拟，成品模拟（ md ）使用 1个 GPU进行模拟。

任务 **1**	**em**	**nvt**	**npt**	**md**
---	72rtxib	722080tiib	722080tiib	723090ib
CPU time	1168.45	13960.33	42378.71	
Run time	79	1648	5586	117.428 ns/day 0.204 hour/ns
Turnaround time	197	1732	5661	
任务 **2**	em	nvt	npt	md
---	72rtxib	722080tiib	72rtxib	722080tiib
CPU time	1399.30	15732.66	40568.04	
Run time	93	1905	5236	106.862 ns/day 0.225 hour/ns
Turnaround time	181	1991	5479	
任务 **3**	em	nvt	npt	md
---	72rtxib	72rtxib	72rtxib	72rtxib
CPU time	1368.11	5422.49	5613.74	
Run time	92	355	366	103.213 ns/day 0.233 hour/ns

□□ 1	em	nvt	npt	md
Turnaround time	180	451	451	
□□ 4	em	nvt	npt	md
---	72rtxib	72rtxib	72rtxib	722080tiib
CPU time	1321.15	5441.60	5618.87	
Run time	89	356	369	111.807 ns/day 0.215 hour/ns
Turnaround time	266	440	435	
□□ 5	em	nvt	npt	md
---	72rtxib	72rtxib	72rtxib	72rtxib
CPU time	1044.17	5422.94	5768.44	
Run time	72	354	380	110.534 ns/day 0.217 hour/ns
Turnaround time	162	440	431	
□□ 6	em	nvt	npt	md
---	723090ib	723090ib	723090ib	723090ib
CPU time	1569.17	7133.74	6677.25	
Run time	81	326	325	114.362 ns/day 0.210 hour/ns
Turnaround time	75	320	300	
□□ 7	em	nvt	npt	md
---	723090ib	723090ib	723090ib	722080tiib
CPU time	1970.56	5665.71	6841.73	
Run time	91	253	327	111.409 ns/day 0.215 hour/ns
Turnaround time	123	251	328	
□□ 8	em	nvt	npt	md
---	72rtxib	72rtxib	72rtxib	72rtxib
CPU time	1234.24	5540.59	5528.91	
Run time	108	363	370	114.570 ns/day 0.209 hour/ns
Turnaround time	85	364	363	

任务 **1**	**em**	**nvt**	**npt**	**md**
任务 **9**	em	nvt	npt	md
---	723090ib	723090ib	723090ib	723090ib
CPU time	2016.10	7633.83	7983.58	
Run time	93	342	361	115.695 ns/day 0.207 hour/ns
Turnaround time	130	377	356	
任务 **10**	em	nvt	npt	md
---	723090ib	723090ib	723090ib	72rtxib
CPU time	1483.84	7025.65	7034.90	
Run time	68	317	333	102.324 ns/day 0.235 hour/ns
Turnaround time	70	319	316	

???

1. 能量最小化（em）在任务较少的722080tiib和72rtxib队列中，Run time分别为88.83 ± 12.45和83.25 ± 11.44s;
2. 平衡模拟（nvt）任务在722080tiib、72rtxib和723090ib队列中，Run time分别为1776.50 ± 181.73、357.00 ± 4.08和309.50 ± 39.06 s;
3. 平衡模拟（npt）任务在722080tiib、72rtxib和723090ib队列中，Run time分别为5411.00 ± 247.49、371.25 ± 6.08和336.50 ± 16.68 s;
4. 原子数218234的200 ns成品模拟（md）任务在722080tiib、72rtxib、和723090ib队列中，性能表现差别不大，分别为110.03 ± 2.75、115.83 ± 1.54和107.66 ± 5.90 ns/day。
5. 综上，建议在能量最小化（em）、平衡模拟（nvt、npt）等阶段使用排队任务较少的**72rtxib**队列，建议在成品模拟（md）阶段按照任务数量（从笔者使用情况来看，排队任务数量72rtxib< 722080tiib< 723090ib< 83a100ib）、**GPU**收费情况（校内及协同创新中心用户：72rtxib队列1.8元/卡/小时=0.45元/核/小时、722080tiib队列1.2元/卡/小时=0.3元/核/小时、723090ib队列1.8元/卡/小时=0.3元/核/小时、83a100ib队列4.8元/卡/小时=0.3元/核/小时）适当考虑队列。
6. 在以上提交代码中，未涉及到Gromacs的并行效率问题（直接**“num=4”**并不能在集群同时使用**4**块**GPU**），感兴趣的同学可以查看http://bbs.keinsci.com/thread-13861-1-1.html以及

https://developer.nvidia.com/blog/creating-faster-molecular-dynamics-simulations-with-gromacs-2020/的相关解释。但根据前辈的经验，**ATOM 500000**以上才值得使用两张**GPU**加速卡，原因在于Gromacs的并行效率不明显。感兴趣的同学也可以使用Amber的GPU并行加速，但对显卡的要求为3090或者tesla A100。这里提供了GPU=4的gromacs命令：

```
gmx mdrun -deffnm $file.pdb.md -ntmpi 4 -ntomp 7 -npme 1 -nb gpu -pme gpu -bonded gpu -pmefft gpu -v
```

Revision #12
Created 2022-03-03 15:46:38 CST by Yao Ge
Updated 2024-12-31 09:54:27 CST by Yao Ge