Gromacs

注意：为了保证 GPU性能 ，在没有特殊要求的情况下，请使用 2021版本的 Gromacs，并用 GPU 计算所有的相互作用。没特殊要求的话请看第三部分。

1. Gromacs-2018.8

说明：

Gromacs使用 CPU计算成键相互作用，使用 GPU计算非键相互作用。

编译环境：

```
gcc/7.4.0
cmake/3.16.3
ips/2017u2
fftw/3.3.7-iccifort-17.0.6-avx2
cuda/10.0.130
```

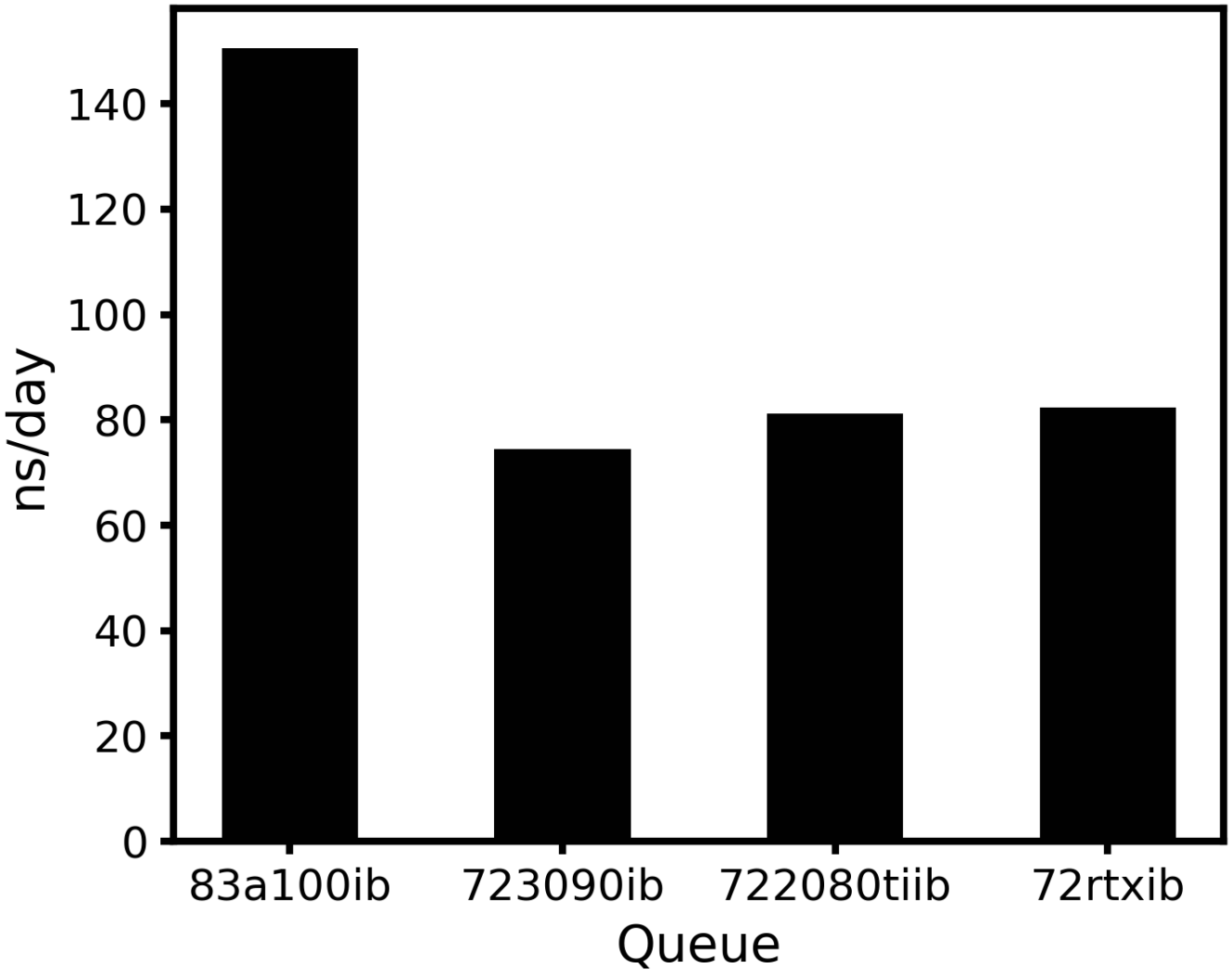
软件信息：

```
GROMACS version:    2018.8
Precision:          single
Memory model:       64 bit
MPI library:        MPI
OpenMP support:     enabled (GMX_OPENMP_MAX_THREADS = 64)
GPU support:        CUDA
SIMD instructions:  AVX2_256
FFT library:        fftw-3.3.7-avx2-avx2_128
CUDA driver:        11.40
CUDA runtime:       10.0
```

测试算例:

```
ATOM  102808(464 residues, 9nt DNA, 31709 SOL, 94 NA, 94 CL)
nsteps      = 25000000     ;50 ns
```

eScience中心GPU测试: 所有GPU节点使用单个GPU进行模拟。



---

2. Gromacs-2021.3

说明:

使用的是集群自带的容器化(singularity)的gromacs-2021.3. Gromacs使用CPU计算成键相互作用, 使用GPU计算非键相互作用。

□□□

```
/fs00/software/singularity-images/ngc_gromacs_2021.3.sif
```

□□□

```
#BSUB -q GPU_QUEUE
#BSUB -gpu "num=1"
module load singlarity/latest
export OMP_NUM_THREADS="$LSB_DJOB_NUMPROC"
SINGULARITY="singularity run --nv /fs00/software/singularity-images/ngc_gromacs_2021.3.sif"
${SINGULARITY} gmx mdrun -nb gpu -deffnm <NAME>
```

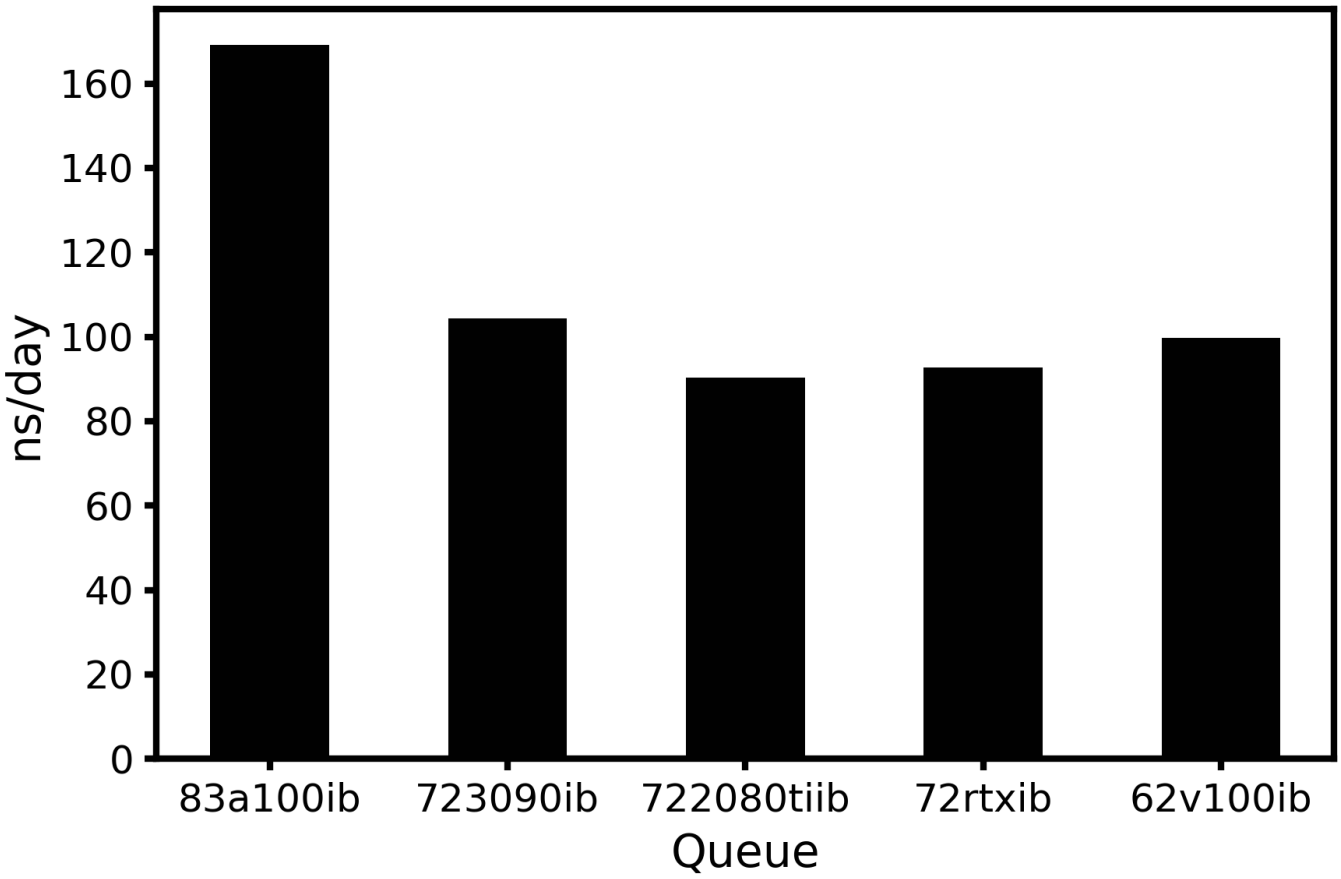
□□□□

```
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  102808(464 residues, 9nt DNA, 31709 SOL, 94 NA, 94 CL)
nsteps      = 25000000     ;50 ns
```

eScience中心GPU测试：所有GPU节点使用单个GPU进行模拟。



---

3. Gromacs-2021.3(全部相互作用用GPU计算)

说明：

由于从2019版本开始，不同的相互作用慢慢都可以在GPU上进行运算，2021版本已经可以将所有模拟的计算用GPU来模拟，所以尝试用GPU进行所有相互作用的运算。

文件位置

```
/fs00/software/singularity-images/ngc_gromacs_2021.3.sif
```

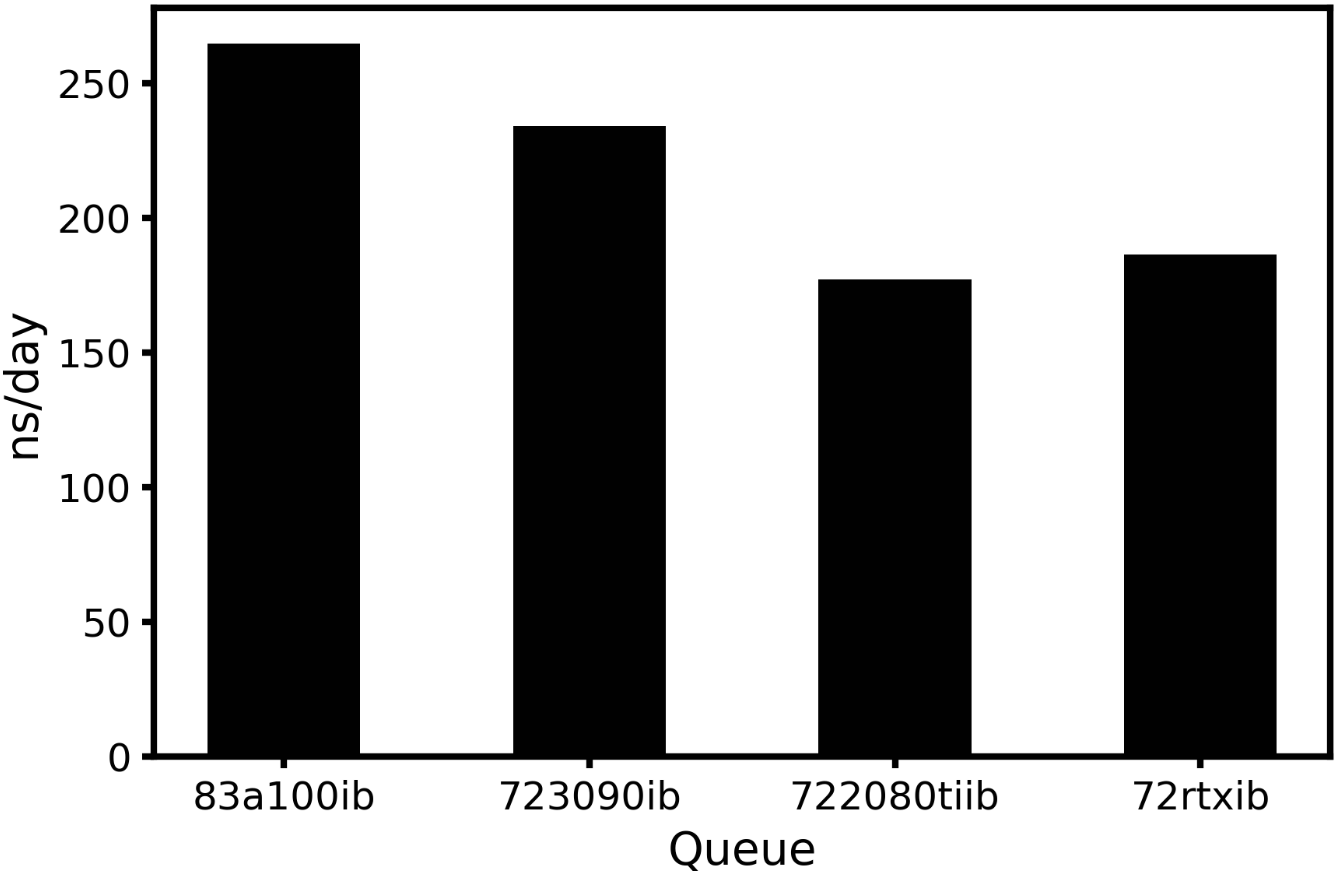
提交代码

```
#BSUB -q GPU_QUEUE
#BSUB -gpu "num=1"
module load singlarity/latest
export OMP_NUM_THREADS="$LSB_DJOB_NUMPROC" □#□□□□□□□□□ CPU□□□□□□□□
SINGULARITY="singularity run --nv /fs00/software/singularity-images/ngc_gromacs_2021.3.sif"
${SINGULARITY} gmx mdrun -nb gpu -bonded gpu -update gpu -pme gpu -pmefft gpu -deffnm <NAME> □#
□□□□□□□ GPU□□
```

□□□□□

```
ATOM  102808(464 residues, 9nt DNA, 31709 SOL, 94 NA, 94 CL)
nsteps      = 25000000     ;50 ns
```

eScience□□ GPU□□□ □□ GPU□□□□□□ GPU□□□□□



□□□

1. 对于GPU节点来说，如果使用GPU+CPU混合运算，主要限制的速度的会是CPU，所以应该尽可能使用GPU进行相互作用的计算。

补充信息

每个GPU队列带有的CPU核数

Queue	CPU Core
72rtxib	4
722080tiib	4
723090ib	6
62v100ib	5
83a100ib	8

Revision #23
Created 16 November 2021 15:18:31 by Yao Ge
Updated 3 January 2023 10:54:50 by Yao Ge