Gromacs

Envio local, exemplos de scripts

Informações sobre o uso direto do cluster local estão em [[SLURM|aqui]].

Serial

```
#!/bin/bash
#SBATCH --time 30:00
module load gromacs/5.0.4

CASE=gromacs-serial
goo-job-nanny mdrun -v -nt 1 -s ${CASE}.tpr -o ${CASE}.trr -e ${CASE}.edr -c after_${CASE}.gro -g ${CASE}.log
```

SMP

```
#!/bin/bash
#SBATCH -c8 --time 30:00
module load gromacs

CASE=gromacs-smp
goo-job-nanny mdrun -v -nt 8 -s ${CASE}.tpr -o ${CASE}.trr -e ${CASE}.edr -c after_${CASE}.gro -g ${CASE}.log
```

MPI

```
#!/bin/bash
#SBATCH -n 16 --time 30:00
module load gromacs

CASE=gromacs-mpi
goo-job-nanny srun -n16 mdrun_mpi -v -s ${CASE}.tpr -o ${CASE}.trr -e ${CASE}.edr -c after_${CASE}.gro -g ${CASE}.log
```

Submissao Simplificada

{{include(SubmissaoSimplificadaCabecalho)}}

Exemplo:

```
APP=gromacs
CASE=full
HOSTS=4
```

Essa submissão espera o arquivo de entrada "full.tpr". O arquivo .log será atualizado a cada 15 minutos.
Parâmetros:
- CASE - Nome do caso. Define o nome de arquivos de entrada, log e saida. **Padrão:** (nome do arquivo de parâmetros, sem a extensão)
- HOSTS - Número de hosts (processos) para a execução. **Padrão:** 1
- PPH - Número de cores por servidor. Ativa o modo multi-thread. **Padrão:** 1
- NPME - Parâmetro passado para o gromacs
- PRECISION - Precisão utilizada no programa. Pode ser "single" ou "double". **Padrão:** single

{{include(SubmissaoSimplificadaRodape)}}