

国家超级计算天津中心 “天河算道”线上培训 GROMACS简介及在天河超算系统上的使用

2022年6月2日 10:00-11:00

主讲人：韩振鑫

注意事项：

- ◆ **申请试用：**如组里没有使用账号，可申请免费测试账号，请微信扫码入群，获取测试账号；
- ◆ **集中答疑：**请有问题的老师和学生们，提前将您的问题通过腾讯软件里的“聊天”功能，指定发送给“主持人”；或在报告结束后，解除静音来提问。

天河

- 天河系列超级计算机系统及登录方式
- GROMACS简介
- GROMACS使用流程



国家超级计算天津中心
National SuperComputer Center in Tianjin

<https://www.nsccl-tj.cn>

资源	节点配置	系统介绍	系统特点
HPC1-4系统	Intel E5-2690 v4 @ 2.6GHz 28cores, 128GB Intel E5-2697A v4@ 2.6GHz 32cores, 128GB Intel Gold-6240 @ 2.60GHz, 36cores, 128GB/256GB	自主构建的新系统，每套系统512个计算节点	单核性能高，x86结构
3F系统	国产自主飞腾芯片, 64cores, 128GB	5000个计算节点	国产自主，性价比高
天河一系统	Intel Xeon X5670 2.93GHz , 12 cores, 24GB	采用CPU和GPU相结合的异构融合计算体系结构	国内首台TOP500
GPU系统	CPU: Intel CPU Gold 6354 @ 3.0GHz, 36cores,256GB GPU: 2*A100, 单卡显存80GB GPU: 8*A100, 单卡显存80GB CPU: Intel E5-2690 v4 @ 2.6GHz, 28cores, 128GB GPU: 2*K80, 单卡显存40GB	可支持仿真模拟和人工智能研究	GPU计算

登陆方式总览

设备	操作系统	登陆方式	备注
PC端	Windows	青索客户端	青索客户端安装与入门手册.pdf
	Linux（图形）	EasyConnect客户端 + SSH终端	https://thvpn.nscs-tj.cn
	Linux（命令行）	EasyConnect的rpm/deb包 + SSH终端	安装包下载：联系超算工程师
移动端	安卓	EasyConnect + SSH终端（推荐JuiceSSH）	应用商店下载
	苹果	EasyConnect + SSH终端（推荐Terminus）	App Store下载
浏览器	浏览器	访问 HPC云 Web端	https://hpc.nscs-tj.cn

登陆过程需要的信息

用户需要：

- VPN的账号和密码
- 系统的账号和密码
- HPC云的账号密码（仅登陆HPC云使用）

VPN相关：

- 青索客户端 VPN配置：“选择超算资源（智能适配链路）”
- EasyConnect 客户端：<https://thvpn.nsccl-tj.cn>

系统登陆相关：

- TH-1A 系统：192.168.2.3；192.168.2.4；192.168.2.5；192.168.2.8；192.168.2.9
- TH-HPC1-3系统：192.168.2.101；192.168.2.103；192.168.2.107
- TH-HPC4系统：192.168.4.10；192.168.4.11
- TH-3F系统：192.168.10.10；192.168.10.11；192.168.10.32
- 默认端口号 22

1. Windows登陆

建议用户使用 超算中心开发的 **青索客户端** 进行登陆，安装方法详见链接 <https://www.nsccl-tj.cn/yhzc>

- 青索开发的初衷是解决超算使用软件栈的散落，提供安全便捷免费的超算使用方式。
- 青索实现了SSH、SFTP、VPN三大件的集成，目前具备一键使用配置、VPN常驻、数据断点续传、机器智能匹配、多账户登录、第三方应用集成、复杂启动脚本定制、资源实时查看等非常多的功能。
- 目前来看，它可能是国内集成度最高的超算登录工具。

安装方法简介：

- (1) 安装 Easyconnect 客户端
- (2) 安装 青索客户端
- (3) 配置账号信息，或导入配置信息

2. Linux登陆

图形界面：

- 访问 <https://thvpn.nscs-tj.cn> 下载安装 EasyConnect
- 登陆 EasyConnect，输入地址 <https://thvpn.nscs-tj.cn>，然后输入 VPN 的账号密码
- 打开 Terminal 终端，使用 `ssh username@ip` 登陆

命令行：

- 如用用户使用的 Linux 系统 **不支持**图形界面，可以选择安装 命令行版本的客户端。客户端安装包可以联系超算中心工程师获取。

.rpm 安装包

- 安装：`rpm -i easyconn_x64.rpm`
- 登录：`easyconn login -d thvpn.nscs-tj.cn:443 -u 用户名 -p 密码`
- 卸载：`rpm -e EasyConnect`
- 注销：`easyconn logout`

.deb 安装包

- 安装：`sudo dpkg -i easyconn_7.6.8.2-ubuntu_amd64.deb`
- 登录：`easyconn login -d thvpn.nscs-tj.cn:443 -u 用户名 -p 密码`
- 卸载：`sudo dpkg -r easyconn`
- 注销：`easyconn logout`

3. Mac登陆

- 访问 <https://thvpn.nscg-tj.cn> 下载安装 EasyConnect
- 登陆 EasyConnect, 输入地址 <https://thvpn.nscg-tj.cn>, 然后输入 VPN 的账号密码
- 打开 Terminal 终端, 使用 `ssh username@ip` 登陆

4. 移动端登陆

- 安装应用商店或苹果App Store下载安装 EasyConnect App
- 登陆 EasyConnect, 输入地址 <https://thvpn.nscg-tj.cn>, 然后输入 VPN 的账号密码
- 安装 SSH 工具（安装应用商店推荐安装 JuiceSSH, 苹果App Store 推荐安装Terminus），然后配置登陆。

5. Web 登陆

- 访问 <https://hpc.nsccl-tj.cn>
- 输入 hpc 云 平台的账号密码 即可

您正在登录 天河HPC云

账号登录

登录

[立即注册](#)
[忘记密码](#)

其他登录方式

手机登录

微信登录

资源总览

已关联 TH-3 系统用户: zhenggang(所属账户 zhenggang)

支持专员: 郑刚

已用机时

0.05 万核小时

使用率 0%

已用存储

104.69 GB

使用率 6.82%

已用文件

905762 个

使用率 90.58%

最大使用节点数

Null

最大运行作业数

Null

最大提交任务数

Null

实时作业 (23S后刷新)

手动刷新

ID	作业名	分区	用户	状态	节点数	节点列表	提交时间	运行时间	操作
暂无数据									

公告

天河HPC云2.0版本上线

2020-09-08

天河HPC云平台内测活动 (第二批)

2019-05-06

天河HPC云平台停机公告 (停机时间3月9日-3月11日)

2019-03-08

天河HPC云平台内测活动

2019-03-04

更多



GROMACS是一个开源的分子动力学模拟计算工具。它主要用于模拟生物大分子体系，如蛋白质，脂质和核酸。

与其他分析模拟程序相比，GROMACS的主要优势有：

1. 优化过的代码提供了极高的性能。
2. CPU 和 GPU资源的负载均衡。
3. 易于发现并纠正错误
4. 用户友好，无需编写复杂脚本

各平台预安装的GROMACS版本，可直接加载使用。

TH-3F: 4.6.7、5.0.7、5.1.5、2016.6、2018.8、2019.6、2020.2、2020.6、2021.2、2021.3、2021.4

HPC4: 4.6.7、5.0.7、5.1.5、2016.6、2018.8、2019.6、2020.2、2020.6、2021.2、2021.4

HPC3: 4.0.7、4.5.6、4.6.7、5.1.2、2018.4、2020.4、2020.6

HPC2: 4.0.7、4.5.6、4.6.7、5.1.2、2018.4、2019.4、2020.4、2020.6

HPC1: 4.0.7、4.5.6、4.6.7、5.1.2、2018.4、2018.8、2019.4、2020.4、2020.6

TH-1A: 4.5.5、4.5.6、5.0.6、5.1.2、2018.4、2018.7、2019.1



1. 生成拓扑文件

① `gmx_mpi pdb2gmx -f 7t9l.pdb -o 7t9l.gro -water tip3p`

pdb2gmx 命令:

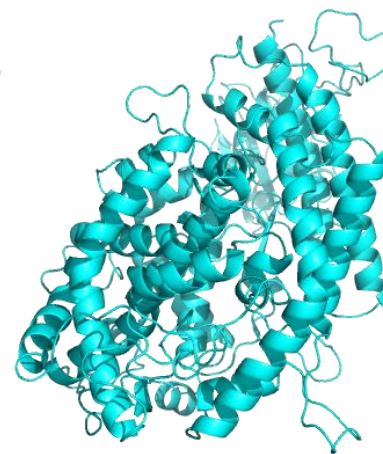
输入:

-f 结构文件 (gro g96 pdb brk ent esp tpr)

输出:

-o 结构文件 (gro g96 pdb brk ent esp tpr)

-water 选择水模型 (spce, tip3p, tip4p, tip5p, tips3p)



蛋白质结构

② 选择力场

```
Select the Force Field:
From '/fs1/home/hanzx/gromacs-2019.4/share/gromacs/top':
 1: AMBER03 protein, nucleic AMBER94 (Duan et al., J. Comp. Chem. 24, 1999-2012, 2003)
 2: AMBER94 force field (Cornell et al., JACS 117, 5179-5197, 1995)
 3: AMBER96 protein, nucleic AMBER94 (Kollman et al., Acc. Chem. Res. 29, 461-469, 1996)
 4: AMBER99 protein, nucleic AMBER94 (Wang et al., J. Comp. Chem. 21, 1049-1074, 2000)
 5: AMBER99SB protein, nucleic AMBER94 (Hornak et al., Proteins 65, 712-725, 2006)
 6: AMBER99SB-ILDN protein, nucleic AMBER94 (Lindorff-Larsen et al., Proteins 78, 1950-58, 2010)
 7: AMBERGS force field (Garcia & Sanbonmatsu, PNAS 99, 2782-2787, 2002)
 8: CHARMM27 all-atom force field (CHARM22 plus CMAP for proteins)
 9: GROMOS96 43a1 force field
10: GROMOS96 43a2 force field (improved alkane dihedrals)
11: GROMOS96 45a3 force field (Schuler JCC 2001 22 1205)
12: GROMOS96 53a5 force field (JCC 2004 vol 25 pag 1656)
13: GROMOS96 53a6 force field (JCC 2004 vol 25 pag 1656)
14: GROMOS96 54a7 force field (Eur. Biophys. J. (2011), 40,, 843-856, DOI: 10.1007/s00249-011-0700-9)
15: OPLS-AA/L all-atom force field (2001 aminoacid dihedrals)
```

③ 文件

```
569846 May 25 19:10 7t9l.gro
983476 May 25 18:25 7t9l.pdb
 50276 May 25 19:10 posre_Protein_chain_A.itp
150871 May 25 19:10 posre_Protein_chain_D.itp
 900436 May 25 19:10 topol_Protein_chain_A.itp
2689946 May 25 19:10 topol_Protein_chain_D.itp
 1125 May 25 19:10 topol.top
```

2. 定义模拟体系的大小

① `gmx_mpi editconf -f 7t9l.gro -o 1box.gro -c -bt cubic -d 2`

editconf命令:

输入:

-f 结构文件 (gro g96 pdb brk ent esp tpr)

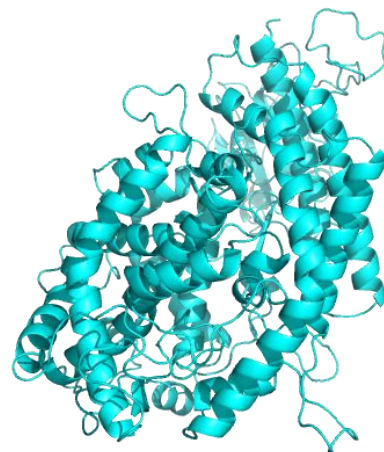
输出:

-o 结构文件 (gro g96 pdb brk ent esp tpr)

-c 蛋白分子在水盒子内居中

-bt 水盒子类型 (triclinic, cubic, dodecahedron, octahedron)

-d 蛋白和水盒子距离



蛋白质结构

② 文件

```
569846 May 25 19:50 1box.gro
569846 May 25 19:10 7t9l.gro
983476 May 25 18:25 7t9l.pdb
50276 May 25 19:10 posre_Protein_chain_A.itp
150871 May 25 19:10 posre_Protein_chain_D.itp
900436 May 25 19:10 topol_Protein_chain_A.itp
2689946 May 25 19:10 topol_Protein_chain_D.itp
1125 May 25 19:10 topol.top
```

3. 模拟体系的溶解

① `gmx_mpi solvate -cp 1box.gro -cs spc216.gro -o 1sol.gro -p topol.top`

solvate命令:

输入:

-cp 结构文件 (gro g96 pdb brk ent esp tpr)

输出:

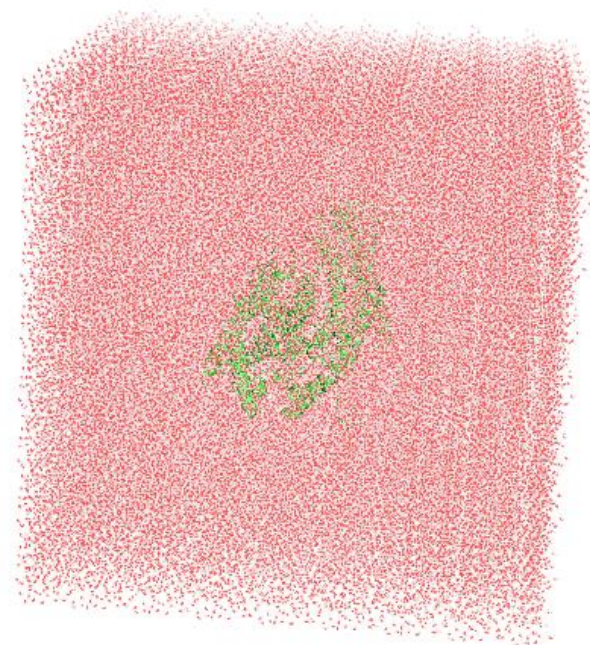
-cs 库结构文件 (gro g96 pdb brk ent esp tpr)

-o 结构文件 (gro g96 pdb brk ent esp tpr)

-p 拓扑文件

② 文件

```
569846 May 25 19:50 1box.gro
16920101 May 25 20:07 1sol.gro
569846 May 25 19:10 7t9l.gro
983476 May 25 18:25 7t9l.pdb
50276 May 25 19:10 posre_Protein_chain_A.itp
150871 May 25 19:10 posre_Protein_chain_D.itp
900436 May 25 19:10 topol_Protein_chain_A.itp
2689946 May 25 19:10 topol_Protein_chain_D.itp
1156 May 25 20:07 topol.top
1125 May 25 19:10 '#topol.top.1#'
```



溶解后模拟体系

4. 添加离子平衡电荷

① `gmx_mpi grompp -f ions.mdp -c 1sol.gro -p topol.top -o ions.tpr`

grompp命令:

输入:

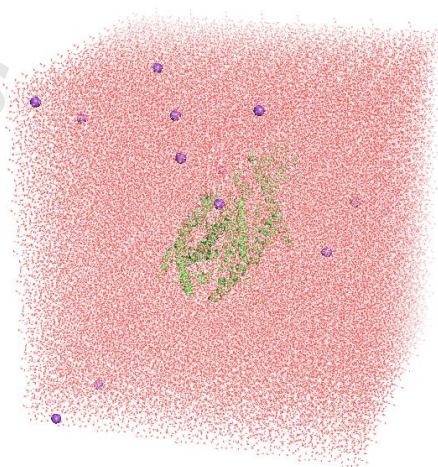
-f MD参数文件 (mdp)

输出:

-c 结构文件 (gro g96 pdb brk ent esp tpr)

-o XDR输入文件 (tpr)

-p 拓扑文件 (top)



添加离子后模拟体系

② `gmx_mpi genion -s ions.tpr -o lions.gro -p topol.top -pname NA -nname CL -neutral`

genion命令:

-s XDR输入文件 (tpr)

-o结构文件 (gro g96 pdb brk ent esp tpr)

-p 拓扑文件 (top)

-pname 阳离子名称

-nname 阴离子名称

-neutral平衡体系电中性

③ 选择

```
Select a continuous group of solvent molecules
Group 0 (      System) has 376001 elements
Group 1 (      Protein) has 12662 elements
Group 2 (    Protein-H) has  6471 elements
Group 3 (      C-alpha) has   796 elements
Group 4 (    Backbone) has  2388 elements
Group 5 (    MainChain) has  3186 elements
Group 6 ( MainChain+Cb) has  3938 elements
Group 7 (    MainChain+H) has  3946 elements
Group 8 (      SideChain) has  8716 elements
Group 9 (    SideChain-H) has  3285 elements
Group 10 (   Prot-Masses) has 12662 elements
Group 11 (   non-Protein) has 363339 elements
Group 12 (      Water) has 363339 elements
Group 13 (      SOL) has 363339 elements
Group 14 (   non-Water) has 12662 elements
Select a group: 
```

④ 文件

```
569846 May 25 19:50 1box.gro
16918310 May 26 11:20 lions.gro
16920101 May 25 20:07 1sol.gro
569846 May 25 19:10 7t9l.gro
983476 May 25 18:25 7t9l.pdb
11886260 May 25 20:40 ions.tpr
50276 May 25 19:10 posre_Protein_chain_A.itp
150871 May 25 19:10 posre_Protein_chain_D.itp
900436 May 25 19:10 topol_Protein_chain_A.itp
2689946 May 25 19:10 topol_Protein_chain_D.itp
1172 May 26 11:20 topol.top
1125 May 25 19:10 '#topol.top.1#'
1156 May 25 20:07 '#topol.top.2#'
```


5. 能量最小化

① `gmx_mpi grompp -f minim.mdp -c lions.gro -p topol.top -o em.tpr`

grompp命令：

输入：

-f MD参数文件（mdp）

输出：

-c 结构文件（gro g96 pdb brk ent esp tpr）

-o XDR输入文件（tpr）

-p 拓扑文件（top）

② `yhbatch -N 20 -n 640 -p cp1 ./1.sh`

1.sh 示例：

`#!/bin/bash`

`yhrun -N 10 -n 320 -p cp1 gmx_mpi mdrun -v -deffnm em`

③ 文件

```
569846 May 25 19:50 1box.gro
16918310 May 26 11:20 lions.gro
66 May 26 11:43 1.sh
16920101 May 25 20:07 1sol.gro
569846 May 25 19:10 7t9l.gro
983476 May 25 18:25 7t9l.pdb
546212 May 26 11:44 em.edr
16918310 May 26 11:44 em.gro
1234245 May 26 11:44 em.log
11886212 May 26 11:44 em.tpr
4511652 May 26 11:44 em.trr
11886260 May 25 20:40 ions.tpr
10811 May 26 11:44 mdout.mdp
1045 May 26 11:43 minim.mdp
50276 May 25 19:10 posre_Protein_chain_A.itp
150871 May 25 19:10 posre_Protein_chain_D.itp
281172 May 26 11:44 slurm-516923.out
900436 May 25 19:10 topol_Protein_chain_A.itp
2689946 May 25 19:10 topol_Protein_chain_D.itp
1172 May 26 11:20 topol.top
1125 May 25 19:10 '#topol.top.1#'
1156 May 25 20:07 '#topol.top.2#'
```

6. NVT平衡

① `gmx_mpi grompp -f nvt.mdp -c em.gro -r em.gro -p topol.top -o nvt.tpr`

grompp命令:

输入:

-f MD参数文件 (mdp)

输出:

-c 结构文件 (gro g96 pdb brk ent esp tpr)

-r 结构文件 (gro g96 pdb brk ent esp tpr)

-o XDR输入文件 (tpr)

-p 拓扑文件 (top)

② `yhbatch -N 20 -n 640 -p cp1 ./2.sh`

2.sh 示例:

`#!/bin/bash`

`yhrun -N 20 -n 640 -p cp1 gmx_mpi mdrun -deffnm nvt`

③ 文件

```
569846 May 25 19:50 1box.gro
16918310 May 26 11:20 1ions.gro
66 May 26 11:43 1.sh
16920101 May 25 20:07 1sol.gro
64 May 26 11:49 2.sh
569846 May 25 19:10 7t9l.gro
983476 May 25 18:25 7t9l.pdb
546212 May 26 11:44 em.edr
16918310 May 26 11:44 em.gro
1234245 May 26 11:44 em.log
11886212 May 26 11:44 em.tpr
4511652 May 26 11:44 em.trr
11886260 May 25 20:40 ions.tpr
10879 May 26 11:49 mdout.mdp
1045 May 26 11:43 minim.mdp
9024720 May 26 11:54 nvt.cpt
58876 May 26 11:54 nvt.edr
25941374 May 26 11:54 nvt.gro
99410 May 26 11:54 nvt.log
2369 May 26 11:49 nvt.mdp
14082160 May 26 11:49 nvt.tpr
911341584 May 26 11:54 nvt.trr
50276 May 25 19:10 posre_Protein_chain_A.itp
150871 May 25 19:10 posre_Protein_chain_D.itp
281172 May 26 11:44 slurm-516923.out
4230 May 26 11:54 slurm-516943.out
900436 May 25 19:10 topol_Protein_chain_A.itp
2689946 May 25 19:10 topol_Protein_chain_D.itp
1172 May 26 11:20 topol.top
1125 May 25 19:10 '#topol.top.1#'
1156 May 25 20:07 '#topol.top.2#'
```

7. NPT平衡

① `gmx_mpi grompp -f npt.mdp -c nvt.gro -r nvt.gro -t nvt.cpt -p topol.top -o npt.tpr`

grompp命令：

输入：

-f MD参数文件（mdp）

输出：

-c 结构文件（gro g96 pdb brk ent esp tpr）

-r 结构文件（gro g96 pdb brk ent esp tpr）

-o XDR输入文件（tpr）

-p 拓扑文件（top）

-t 轨迹文件（trr cpt tng）

② `yhbatch -N 20 -n 640 -p cp1 ./3.sh`

3.sh 示例：

`#!/bin/bash`

`yhrun -N 20 -n 640 -p cp1 gmx_mpi mdrun -deffnm npt`

③ 文件

```
569846 May 25 19:50 1box.gro
16918310 May 26 11:20 lions.gro
66 May 26 11:43 1.sh
16920101 May 25 20:07 1sol.gro
64 May 26 11:49 2.sh
64 May 26 12:10 3.sh
569846 May 25 19:10 7t9l.gro
983476 May 25 18:25 7t9l.pdb
546212 May 26 11:44 em.edr
16918310 May 26 11:44 em.gro
1234245 May 26 11:44 em.log
11886212 May 26 11:44 em.tpr
4511652 May 26 11:44 em.trr
11886260 May 25 20:40 ions.tpr
10919 May 26 12:10 mdout.mdp
1045 May 26 11:43 minim.mdp
9025092 May 26 12:22 npt.cpt
71148 May 26 12:22 npt.edr
25941374 May 26 12:22 npt.gro
99215 May 26 12:22 npt.log
2591 May 26 12:10 npt.mdp
14082160 May 26 12:20 npt.tpr
911341584 May 26 12:22 npt.trr
9024720 May 26 11:54 nvt.cpt
58876 May 26 11:54 nvt.edr
25941374 May 26 11:54 nvt.gro
99410 May 26 11:54 nvt.log
2369 May 26 11:49 nvt.mdp
14082160 May 26 11:49 nvt.tpr
911341584 May 26 11:54 nvt.trr
50276 May 25 19:10 posre_Protein_chain_A.itp
150871 May 25 19:10 posre_Protein_chain_D.itp
281172 May 26 11:44 slurm-516923.out
4230 May 26 11:54 slurm-516943.out
4281 May 26 12:22 slurm-516989.out
900436 May 25 19:10 topol_Protein_chain_A.itp
2689946 May 25 19:10 topol_Protein_chain_D.itp
1172 May 26 11:20 topol.top
1125 May 25 19:10 '#topol.top.1#'
1156 May 25 20:07 '#topol.top.2#'
```

8. MD产出步

① `gmx_mpi grompp -f md.mdp -c npt.gro -p topol.top -o md_0_1.tpr`

grompp命令:

输入:

-f MD参数文件 (mdp)

输出:

-c 结构文件 (gro g96 pdb brk ent esp tpr)

-o XDR输入文件 (tpr)

-p 拓扑文件 (top)

③ 文件

② `yhbatch -N 20 -n 640 -p cp1 ./4.sh`

4.sh 示例:

`#!/bin/bash`

`yhrun -N 20 -n 640 -p cp1 gmx_mpi mdrun -deffnm md_0_1`

```
569846 May 25 19:50 1box.gro
16918310 May 26 11:20 1ions.gro
66 May 26 11:43 1.sh
16920101 May 25 20:07 1sol.gro
64 May 26 11:49 2.sh
64 May 26 12:10 3.sh
68 May 26 12:34 4.sh
569846 May 25 19:10 7t9l.gro
983476 May 25 18:25 7t9l.pdb
546212 May 26 11:44 em.edr
16918310 May 26 11:44 em.gro
1234245 May 26 11:44 em.log
11886212 May 26 11:44 em.tpr
4511652 May 26 11:44 em.trr
11886260 May 25 20:40 ions.tpr
9025080 May 26 12:48 md_0_1.cpt
8352 May 26 12:48 md_0_1.edr
25941374 May 26 12:48 md_0_1.gro
33736 May 26 12:48 md_0_1.log
13390012 May 26 12:46 md_0_1.tpr
15354904 May 26 12:48 md_0_1.xtc
2740 May 26 12:35 md.mdp
10897 May 26 12:36 mdout.mdp
1045 May 26 11:43 minim.mdp
9025092 May 26 12:22 npt.cpt
71148 May 26 12:22 npt.edr
25941374 May 26 12:22 npt.gro
99215 May 26 12:22 npt.log
2591 May 26 12:10 npt.mdp
14082160 May 26 12:20 npt.tpr
911341584 May 26 12:22 npt.trr
9024720 May 26 11:54 nvt.cpt
58876 May 26 11:54 nvt.edr
25941374 May 26 11:54 nvt.gro
99410 May 26 11:54 nvt.log
2369 May 26 11:49 nvt.mdp
14082160 May 26 11:49 nvt.tpr
911341584 May 26 11:54 nvt.trr
50276 May 25 19:10 posre_Protein_chain_A.itp
150871 May 25 19:10 posre_Protein_chain_D.itp
281172 May 26 11:44 slurm-516923.out
4230 May 26 11:54 slurm-516943.out
4281 May 26 12:22 slurm-516989.out
4205 May 26 12:48 slurm-517009.out
900436 May 25 19:10 topol_Protein_chain_A.itp
2689946 May 25 19:10 topol_Protein_chain_D.itp
1172 May 26 11:20 topol.top
1125 May 25 19:10 '#topol.top.1#'
1156 May 25 20:07 '#topol.top.2#'
```

- 中心官网: <https://nscd-tj.cn>
 - 官方邮箱: service@nscd-tj.cn
 - 官方电话: 022-65375560
 - 官方微信公众号: 国家超级计算天津中心
-
- 账户申请: <https://hpc.nscd-tj.cn/apply/index#/>
 - 青索客户端: [青索客户端安装与入门手册.pdf](#)
 - VPN入口: <https://thvpn.nscd-tj.cn>
 - HPC云: <https://hpc.nscd-tj.cn>
 - 培训与教程资源: https://www.nscd-tj.cn/yhzc_pxjh



中心微信



个人微信

天河



谢谢!



(022)-65375561



service@nsc-ty.cn



<https://www.nsc-ty.cn>