

<https://ccub.u-bourgogne.fr/dnum-ccub/spip.php?article393>

# Gromacs

- Site Public - Calcul - Logiciels -

Publication date: mardi 21 février 2012

---

**Copyright © Site du Centre de Calcul de l'Université de Bourgogne - Tous  
droits réservés**

---

## Site officiel

<http://www.gromacs.org/>

## Documentation

<http://www.gromacs.org/Documentation>

## Versions installées

Pour afficher la liste des versions installées sur le cluster, taper la commande

```
module avail gromacs
```

Pour chaque version de Gromacs, plusieurs versions du binaire sont installés. Pour utiliser Gromacs en version double précision, ajouter le suffixe **\_d**, pour utiliser la version compatible MPI, ajouter **\_mpi**. Un exemple avec la version MPI double précision de mdrun : **mdrun\_mpi\_d**.

## Utilisation en mode interactif

- positionner l'environnement pour la version souhaitée
  - `module load gromacs/4.5.5`
- utiliser une des commandes Gromacs
  - `mdrun -v -s traj.trr -o ...`

## Utilisation en mode batch

- Créer un fichier de soumission nommé **mon\_job**, contenant par exemple :
-

```
#!/bin/ksh
#$ -q par2 -pe dmp 128

deb="158"
fin="164"

tpbconv -s HSP_300k_28.tpr -extend 500 -o HSP_300k_29.tpr

mpiib mdrun_mpi -v -s HSP_300k_29.tpr -o HSP_2kho_ADP_300k_${deb}a${fin}ns.trr -c
HSP_2kho_ADP_300k_${fin}ns.gro -cpi state_28.cpt -cpo state_29.cpt -e
HSP_2kho_ADP_300k_${deb}a${fin}ns.edr -g HSP_300k_29
```

- charger l'environnement
  - `module load gromacs/4.5.5`
- soumettre le job
  - `qsub mon_job`