



نرم افزار Gromacs یک برنامه تحلیل مولکولی است که از معادلات نیوتن برای تحلیل حرکت میلیون‌ها مولکول در یک سیستم استفاده می‌کند. این نرم افزار در تحقیقات شیمی و بیو برای بررسی ساختار پروتئین‌ها، چربی‌ها و اسیدها استفاده می‌شود که ساختارهای پیچیده دارند. برای ارسال برنامه به مدیر کار، مراحل زیر را طی کنید.

مرحله ۱) یک اسکریپت برای مدیر کار بنویسید (فایل tor.sh) و محتوای آن را به صورت زیر تغییر دهید. توجه کنید که قسمت‌هایی که با رنگ قرمز نوشته شده‌اند، ثابت هستند و قسمت‌هایی که با رنگ آبی نوشته شده‌اند، بسته به نیاز کاربر می‌تواند تغییر کند. دقت کنید که در این اسکریپت ۲ پارامتر X و Y وجود دارد که هر یک از آن‌ها عدد هستند. X به معنی تعداد گره‌های پردازشی مورد نیاز است که حداکثر می‌تواند عدد ۳ باشد. Y به معنی تعداد هسته‌های لازم از هر گره پردازشی است. به عنوان مثال، nodes=2:ppn=4 به معنی آن است که از دو گره پردازشی استفاده شود و در هر گره پردازشی، ۴ هسته برای اجرای برنامه مورد نیاز است. در نتیجه برنامه بر روی هشت هسته اجرا خواهد شد. به عنوان یک مثال دیگر، اگر nodes=1:ppn=8 به معنی آن است که از ۸ هسته یکی از گره‌های پردازشی استفاده شود. توصیه می‌شود که برای یک اجرا، از nodes=3 و ppn به تعداد مشخص استفاده کنید. به عنوان مثال، برای اجرای برنامه بر روی ۱۰ هسته، nodes=3:ppn=3 مطلوب است هر چند که تعداد هسته‌های به کار رفته در کل ۹ عدد خواهد بود. مسیر /path/to/log/file معرف مسیری است که خروجی برنامه در آن نوشته می‌شود. به عنوان مثال، اگر کاربر U1 بخواهد خروجی برنامه خود را به اسم run1.log در خانه ذخیره کند باید از مسیر /home/U1/run1.log استفاده کند. دقت کنید که مسیرهای مورد نظر کاربر برای ذخیره خروجی برنامه همیشه با /home/USERNAME شروع می‌شود که USERNAME همان نام کاربر است. توجه کنید که در فولدری که این اسکریپت را می‌نویسید باید تمام فایل‌های ورودی مورد نیاز برنامه وجود داشته باشند.

```
#!/bin/bash
#PBS -v
#PBS -q default
#PBS -j oe
#PBS -l nodes=X:ppn=Y
#PBS -N job1
#PBS -o /path/to/log/file
cd $PBS_O_WORKDIR
/share/apps/computer/openmpi-2.0.1/bin/mpirun /share/apps/chemistry/gromacs-5.1/bin/mdrun_mpi -v
```

مرحله ۲) با استفاده از دستور qsub می‌توانید اسکریپت خود را به مدیر کار ارسال کنید و در ادامه از دستور qstat استفاده کنید تا اجرای آن را مشاهده کنید.

```
mahmood@cluster:~$ qsub tor.sh
mahmood@cluster:~$ qstat
```

Job id	Name	User	Time Use	S	Queue
145.cluster	job1	Mahmood	229:25:4	R	default