

中心 NAMD 使用指南

- 1、以下内容中 `hpc-user` 表示用户已开通的高性能帐号；`login node` 表示不同分区登录节点；
- 2、在编译节点也可以提交任务；
- 3、文件及文件夹命名方式仅供参考；
- 4、在作业提交之前，建议使用者熟悉 Linux 操作的几个常用命令（例如：`vi` 或 `vim`、`cd`、`mkdir`、`ls`、`pwd` 等）和 NAMD 建模。

一、作业提交

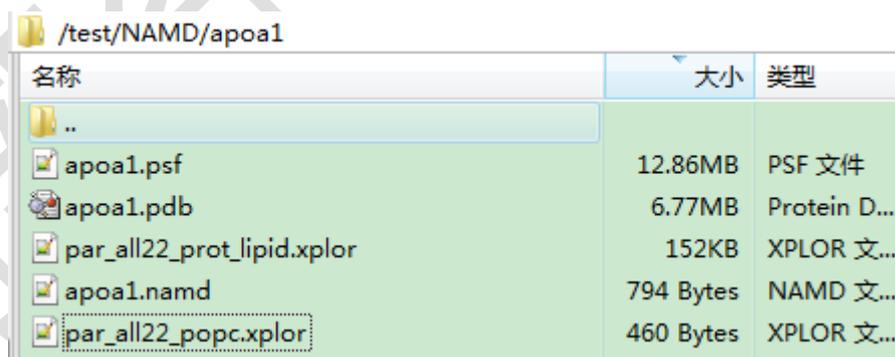
- 1、在电脑上用 Xshell 客户端（或其他类似软件）登陆高性能账号，若不知道自己的高性能帐号在哪个分区，登陆帐号以后输入：`pwd`，可以看到如下图，`home-`后面的就是高性能帐号所在的分区（图中为 GG 分区）：

```
nsgg182_LZ@gcn02:~> pwd
/home-gg/users/nsgg182_LZ
nsgg182_LZ@gcn02:~>
```

- 2、如需直接提交作业，在高性能账号下创建放计算任务的文件夹 `test/NAMD/apoa1`（该名称可以根据自己习惯命名）：

```
hpc-user@login node:~> mkdir -p test/NAMD/apoa1
```

- 3、用 FTP 工具登录高性能帐号，将计算所需的输入文件通过 XFTP 上传至账号目录下 `test/NAMD/apoa1`：



名称	大小	类型
..		
apoa1.psf	12.86MB	PSF 文件
apoa1.pdb	6.77MB	Protein D...
par_all22_prot_lipid.xplor	152KB	XPLOR 文...
apoa1.namd	794 Bytes	NAMD 文...
par_all22_popc.xplor	460 Bytes	XPLOR 文...

- 4、切换至 Xshell 界面，进入算例文件夹中：

```
hpc-user@login node:~> cd test/NAMD/apoa1
```

- 5、创建或拷贝提交作业的脚本文件 `namd-2.10_GG.lsf`（也可在 Windows 系统写好以后用 FTP 工具上传；现以 GG 分区直接从公共目录中拷贝为例），G 分区 NADM 软

件脚本的路径在 `/home-gg/soft/jobscripts/` 中。先查看脚本是否存在，图中 `namd-2.10_GG.lsf` 即为所需脚本（其他版本无法跨节点）：

```
[Insyw145_QLL@ycn26 ~]$ ls /home-yw/soft/jobscripts/
Gaussian09D01  VASP5.4.1      gromacs-515_YW.lsf      namd-2.10_YW.lsf      nwchem-6.6_YW.lsf
MOLPRO        cp2k-6.1_YW.lsf  lammps-2018Mar16_YW.lsf namd-2.11_YW.lsf      qe-6.3_YW.lsf
MS            gromacs-2018.4_YW.lsf lammps-2019Aug07_YW.lsf namd-2.12_YW.lsf      wrf-4.0_YW.lsf
[Insyw145_QLL@ycn26 ~]$
```

- 6、采用您最熟悉的方式将上述脚本拷贝至需要提交任务的文件夹中（注意 `cp` 后、`./` 前有空格）：

```
nsgg182_LZ@gcn02:~/test/NAMD/apoa1> cp /home-gg/soft/jobscripts/namd-2.10_GG.lsf ./
```

- 7、修改模板脚本：

```
hpc-user@login node:~/test/NAMD/apoa1> vi namd-2.10_GG.lsf
```

- 8、输入字母“i”，进入编辑模式。脚本内容如下，部分内容需要根据情况进行修改：

- 1、`APP_NAME=intelG_mid` 为提交作业计算的队列，不同的分区、不同的核数所使用的队列不相同，参见[各分区提交作业脚本及队列说明](#)；
- 2、`NP=12` 为计算该作业设置的核数，可以根据任务的需要进行修改。除 FN 分区外，其他分区每个节点 12 核（FN 分区 32 核），需要跨节点并行时，建议使用 12 的多倍值（新节点除外）；
- 3、`tapoa1.namd`、`apoa1.log` 为输入、输出文件名，要修改为需计算任务的名称。

```
#!/bin/bash
APP_NAME=intelG_mid
NP=12
NP_PER_NODE=12
RUN="RAW"
CURDIR=$PWD

source /home-gg/soft/envdir/namd-2.10.sh

mpirun -np $NP namd2 apoa1.namd > apoa1.log
```

- 9、按下键盘上的 `esc` 键后，输入 `:wq` 保存脚本文件，并退出。
- 10、将脚本文件转换为 UNIX 格式（如从 Windows 系统上传的话必须要转换，不然提交作业时时报错；若直接拷贝公共目录中的脚本，并在 Linux 环境中进行修改，则可以省略步骤 10、11。若提交作业的脚本名称不为 `namd-2.10_GG.lsf`，则需要修改为对应的脚本名称）：

```
hpc-user@login node:~/test/NAMD/apoa1> dos2unix namd-2.10_GG.lsf
```

- 11、赋予脚本文件可执行权限：

```
hpc-user@login node:~/test/NAMD/apoa1> chmod +x namd-2.10_GG.lsf
```

- 12、用 bsub 命令提交作业脚本：

```
hpc-user@login node:~/test/NAMD/apoa1> bsub namd-2.10_GG.lsf
```

```
nsgg182_LZ@gcn02:~/test/NAMD/apoa1> bsub namd-2.10_GG.lsf
Job <5147975> is submitted to queue <intelG_mid>.
```

- 13、如果提交正确，则会出现如下内容（其中 Job 后面的数字为：JobID，每个任务的 JobID 不一样，可根据 JobID 查看该任务情况，出问题，请及时告知 JobID，保留计算的输出文件）：

```
Job <5147975> is submitted to queue <intelG_mid>.
```

- 14、查看任务是否计算完成，可以使用 bjobs 命令（当出现：Done successfully. The CPU time used is xxxx seconds 说明计算结束）：

```
hpc-user@login node:~/test/NAMD/apoa1> bjobs -l 5147975
```

```
nsgg182_LZ@gcn02:~/test/NAMD/apoa1> bjobs -l 5147975
Job <5147975>, User <nsgg182_LZ>, Project <default>, Application <Gapp>, Status
<DONE>, Queue <intelG_mid>, Job Priority <50>, Comma
nd <namd-2.10_GG.lsf>, Share group charged </nsgg182_
LZ>
Sun Feb 16 18:50:17 2020: Submitted from host <gcn02>, CWD <$/HOME/test/NAMD/apo
a1>, Output File </home-gg/users/nsgg182_LZ/test/NAMD
/apoa1/output.%J>, Notify when job ends, 24 Processor
s Requested, Requested Resources < span[ptile=12] >;
Sun Feb 16 18:50:23 2020: Started on 24 Hosts/Processors <12*gg0327> <12*gg0732
>, Execution Home </home-gg/users/nsgg182_LZ>, Execut
ion CWD </home-gg/users/nsgg182_LZ/test/NAMD/apoa1>;
Sun Feb 16 18:51:25 2020: Done successfully. The CPU time used is 1096.5 second
s.
```

- 15、任务计算结束后，可以查看输出文件，检查任务是否计算成功（作业脚本中指定的输出文件）：

```
hpc-user@login node:~/test/NAMD/apoa1>tail apoa1.log
```

- 16、如果计算成功，在输出文件 apoa1.log 的最后会出现如下部分：

```
nsgg182_LZ@gcn02:~/test/NAMD/apoa1> tail apoa1.log

WRITING EXTENDED SYSTEM TO OUTPUT FILE AT STEP 500
WRITING COORDINATES TO OUTPUT FILE AT STEP 500
The last position output (seq=-2) takes 0.002 seconds, 497.469 MB of memory in use
WRITING VELOCITIES TO OUTPUT FILE AT STEP 500
The last velocity output (seq=-2) takes 0.002 seconds, 497.469 MB of memory in use
=====

WallClock: 45.756187 CPUtime: 45.756187 Memory: 497.468750 MB
[Partition 0][Node 0] End of program
nsgg182_LZ@gcn02:~/test/NAMD/apoa1>
```

二、短时间使用软件相关命令

- 1、NAMD 软件安装完成后会生成如下可执行文件：

```
softtestgg@gcn03:/home-gg/soft/packagedir/namd-2.10-parallel/NAMD_2.10_Source/Linux-x86_64-g++> ls
chamrun flipbinpdb flippdb inc Make.config Make.depends Makefile namd2 obj plugins psigen sb sortreplicas src
softtestgg@gcn03:/home-gg/soft/packagedir/namd-2.10-parallel/NAMD_2.10_Source/Linux-x86_64-g++>
```

- 2、若需直接使用 NAMD 软件的可执行文件进行短时间文件处理或操作，必须进入编译节点，进入编译节点方式及 IP 地址详见[各分区编译节点](#)，请选择相应分区的编译节点：`ssh +编译节点 IP/名称`。
- 3、需把脚本中关于 NAMD 的环境变量拷贝/添加至账号的 `~/.bashrc` 文件下即可（以 GG 分区为例，添加 `/home-gg/soft/envdir/namd-2.10.sh`）：

```
hpc-user@compiling node:~/test/NAMD/apoa1> vim ~/.bashrc
```

```
#export PILOTDATE=115200

test -s ~/.alias && . ~/.alias || true
export LANG=zh_CN.UTF-8
LANG=C
source /home-gg/soft/envdir/namd-2.10.sh
```

- 4、按下键盘上的 `esc` 键后，输入 `:wq` 保存脚本文件，并退出。
- 5、需要执行 `source ~/.bashrc`，才能使其生效（若已经添加，则不用再添加，直接进入编译节点进行操作即可）。
- 6、即可进行短时间文件处理或操作。