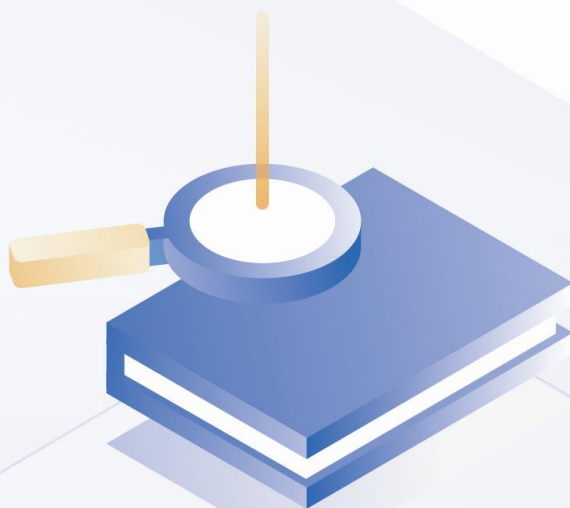


# 云极高性能计算EPC

GROMACS软件运行步骤

版本：2022.2



## EPC系列文档

UCloud云极高性能计算EPC为用户提供基于公有云技术的超高性能算力，以及涵盖数据传输、数据计算、数据可视化处理等一站式的使用体验。

UCloud云极高性能计算系列白皮书涵盖产品介绍、应用场景解析、GROMACS等软件在EPC平台运行步骤、案例分析等。如您在EPC有任何技术问题，可通过微信、电话等方式联系UCloud。

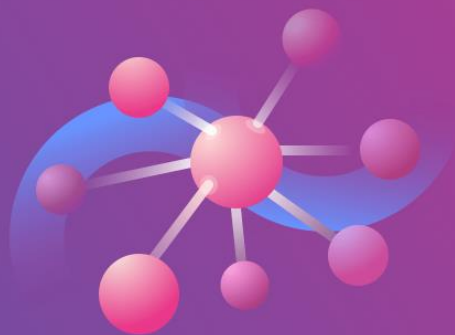


# EPC

## 云极高性能计算

消耗满100元额外赠送200核时EPC算力

立即咨询 免费测试



## 01 背景信息

新学期开学，大学同学们还记得春节前没有完成的作业么，是否还记得导师马上要检查的课题实验么？可能已经完成了开题报告、做了项目规划和分析，但实质性的实验环境还没搭建起来。如何寻找到合适的计算服务平台，便捷而顺畅地搭建好实验环境，就成了燃眉之急。这不，有位同学焦急地在线等待。

### 大三学生

我的实验设计是基于分子动力学模拟软件GROMACS，已经开学了，导师要跟实验进度了，需要赶赶实验进度，运行环境和平台还没搭起来，有啥好的方法，在线等.....

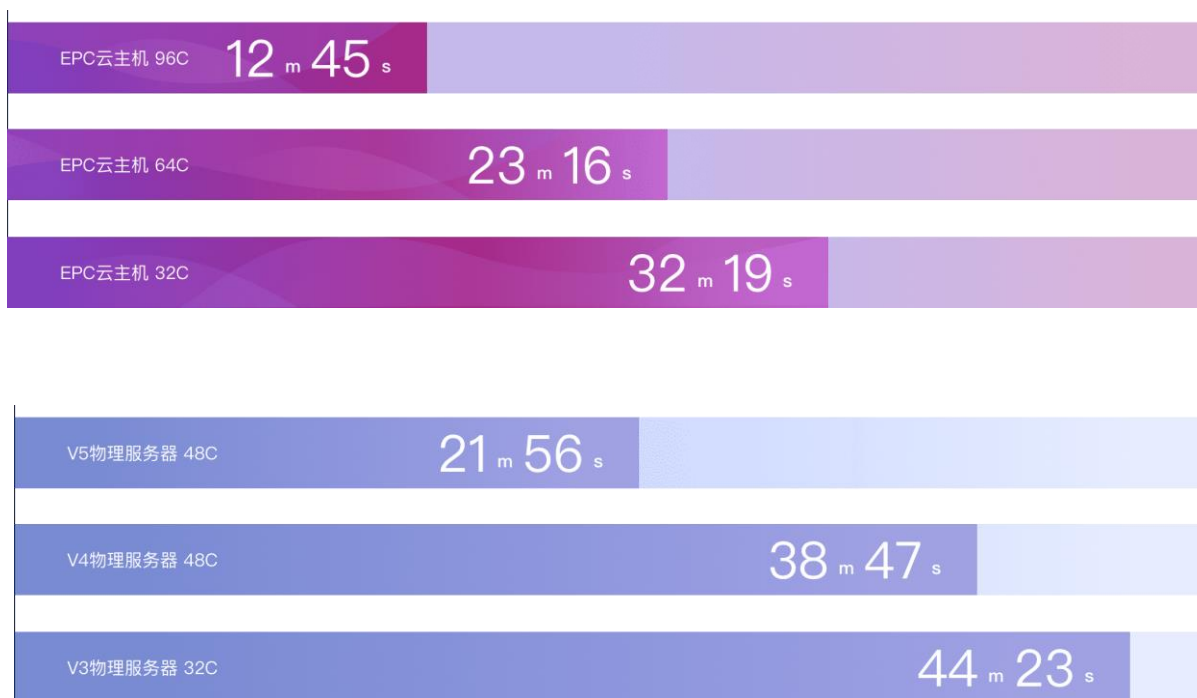
——XX大学学生

我们以GROMACS软件为例，来演示下如何在云极高性能计算EPC平台上便捷而高效的搭建出实验运行环境。为什么要突出快捷呢？因为选用传统的运行方式总会碰到这样那样的问题，比如算力不够、笔记本太卡、电脑24小时不关机不现实、找老师申请资源人数多。



## 02 云极高性能计算 EPC

在合适的高性能平台时，我们该关注哪些因素，主要的有计算性能、计费方式、面向视频等特殊场景的支持、计算数据加载速度等。UCloud EPC云极高性能计算相比物理服务器性能强劲，提供CFD算例/400万网络-500次迭代，强劲性能，节省宝贵时间，并且在以上各指标中均有不俗的表现。



UCloud云极高性能计算EPC集群官方文档

[https://docs.ucloud.cn/epc/epc\\_cluster/introduction](https://docs.ucloud.cn/epc/epc_cluster/introduction)



## 03 在EPC平台运行GROMACS

### Step 1: 开通UCloud账号并实名认证

点击

<https://passport.ucloud.cn/register/campus>

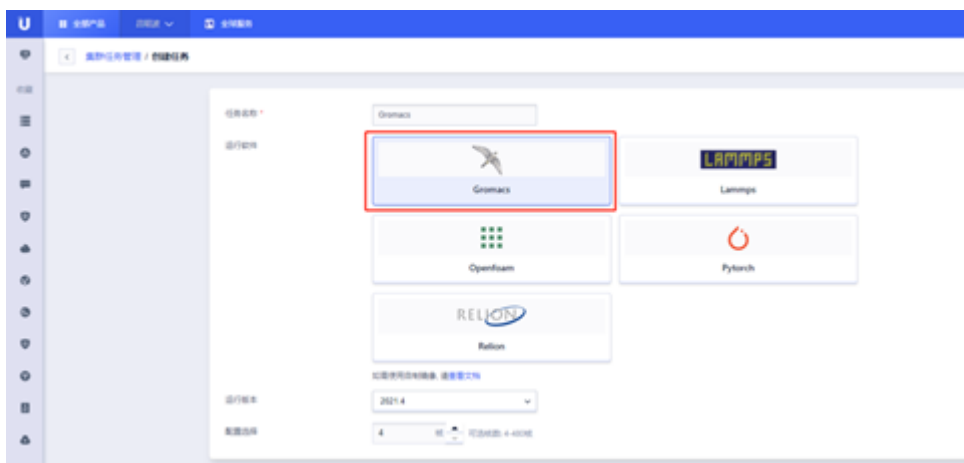
注册UCloud账号，并选择“在校师生”认证，为您提供更加便捷的注册和开通流程。如已有账号可直接进行登录。

### Step 2: 使用EPC, 选择“集群任务管理”

在EPC平台中选择“集群任务管理”，并点击“创建任务”。



在创建任务页面填写“任务名称”，并选择“运行软件”为“Gromacs”。



## 03 在EPC平台运行GROMACS

### Step 3: 上传数据

任务创建成功后在任务列表可查看信息，接下来点击“项目数据”来上传数据。



在新页面中上传数据，可自行选择已有项目数据，如需使用本实验 Demo数据，请在微信号留言或联系UCloud客户经理为您提供。



### Step 4: 运行软件

接下来返回到任务管理列表中，点击“启动”进入到软件运行阶段。



## 03 在EPC平台运行GROMACS

### Step 5: 脚本方式运行

在项目数据中可上传gromacs.sh，以脚本的方式来运行，效果相同。

```
tar -xzf gromacs_water.tgz
cd gromacs_water/1536
gmx_mpi grompp -f pme.mdp -c conf.gro -p topol.top -o water_pme.tpr
mpirun -np ${TOTAL_NPROC} gmx_mpi mdrun -v -ntomp 1 -nsteps 5000 -pin on -s water_pme.tpr
```



### Step 6: 查看任务

项目运行中的状态如下，包括运行时长、状态等数据，可以通过右侧按钮来取消任务或查看数据。



Gromacs软件的标准运行log输出到stderr，因此查看Gromacs运行时的调试信息，需要进到错误日志查看，而不是运行日志。



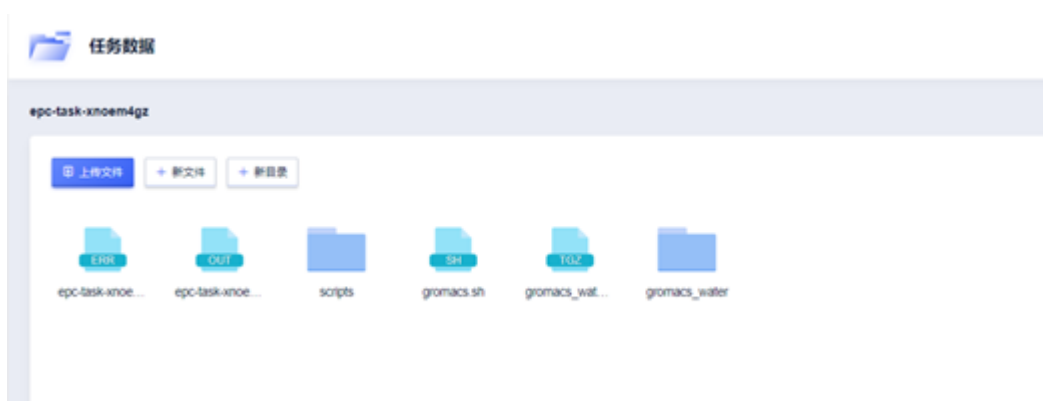
## 03 在EPC平台运行GROMACS

### Step 7: 点击错误日志或运行日志看到的实时输出

在EPC任务列表界面，可点击“运行日志”或“错误日志”按钮来查看任务运行实时数据。



也可以在“项目数据”中查看任务输出的数据文件，以此查看任务运行结果。



### Step 8: 至此，Demo应用运行完成





## 04 GROMACS软件介绍

GROMACS是用于研究生物分子体系的分子动力学程序包，主要用来模拟研究蛋白质、脂质、核酸等生物分子的性质。

在整个运行过程中，mdrun部分才是最耗时的模拟操作，其他可以看作预处理、后处理或者mdrun前的辅助操作。

### ■ 执行MD能量最优化/位置限制模拟

```
1 input: tpr
2 output: gro/top/log/trr/edr
```

### ■ 创建MD输入文件

```
1 input: mdp/gro/top
2 output: tpr
```

### ■ 执行MD最终模拟

```
1 input: tpr
2 output: gro/top/log/trr/edr
```

### ■ 注

```
1 trr（轨迹文件）：contains velocity/force/coordinate
2 edr（能量文件）：portable energy file
```



## 05 如何复用/举一反三

高性能计算不仅能解决分子动力学模拟软件的运行，还有更多流体力学、物理化学、生物信息、视频等场景同样适用。这些软件的运行都需要强大的算力，课题研究一两周、搭建实验环境一两周，跑一次软件查看结果要等一周，结果不符合预期调整再检查结果又要一周，时间都“白白耽误”在等待计算结果上了，通过算力来实现“算力换时间”节省时间成本。

如下不同场景的各种软件都支持在UCloud云极高性能EPC中进行运行，部分软件需要自行安装。

### 流体力学

Fluent / STAT-CCM+ / CFX / OpenFOAM

### 物理化学

VASP / LAMMPS / Gromacs / Gaussian

### 生物信息

BWA / BLAST / Samtools / gatk

### 视频

3D可视化、视频解码



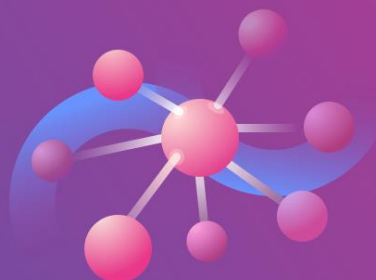
## 06 优惠促销

EPC

云极高性能计算

消耗满100元额外赠送200核时EPC算力

立即咨询 免费测试



UCloud在高性能计算领域中有丰富的落地案例和技术方案，供您在学校实验运行、科研计算进行参考和复用。

云极标准型	云极大内存型	云极GPU型			
CPU核数与内存比为1:2	CPU核数与内存比为1:8	单卡FP32 16.4 TFLOPs   FP64 8.2 TFLOPs			
CPU平台	AMD Rome 2.6Ghz+	CPU平台	NVIDIA V100S		
内存	DDR4 ECC 2933Mhz+	内存	DDR4 ECC 2933Mhz+	显存	32GB
规格	8核16G	规格	32核256G	性能	130 TFLOPS 深度学习
系统盘	200GB高效云盘	系统盘	200GB高效云盘	规格	4核16G
数据存储	1000GB共享文件存储	数据存储	1000GB共享文件存储	数据存储	1000GB共享文件存储
适用于流体力学、分子动力学等科学计算		适用于流体力学、分子动力学等科学计算		适用于流体力学、分子动力学等科学计算	
0.11 元/核时	立即购买	0.22 元/核时	立即购买	9.8 元/小时起	立即购买

最近还有消耗使用云极高性能计算EPC满100元赠送200核时的活动。联系我们，为您提供技术咨询与交流、获取产品促销活动方案。

优惠活动链接：

<https://www.ucloud.cn/site/active/epc.html?ytag=epcpdf>

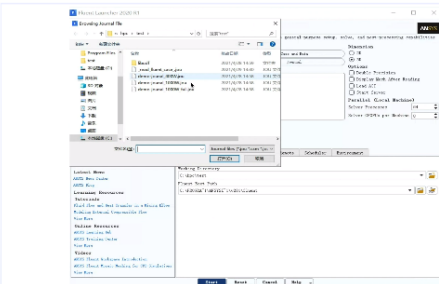
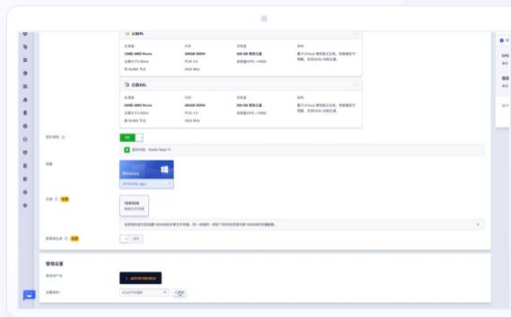


## 07 云极高性能计算EPC多重优势

## ● 开箱即用

## 开箱即用，性能加倍

EPC系列提供可直接使用的计算节点，磁盘、网络、CPU同步配置，并赠送1000GB的共享文件存储，开箱即用。同时EPC计算节点依托于UCloud公有云资源池，拥有海量资源，弹性扩容。



## ✦ 性能卓越

## 搭载新一代AMD Rome，最大240核

EPC计算节点以广受好评的UCloud裸金属快杰云主机为底座，搭载性价比出色的AMD Rome处理器，支持的规格从8核~240核。

## ◆ 图形性能加倍

## 支持图形增强，图形性能4倍提升

为进一步满足数据的3D可视化、视频解码等需求场景，EPC计算节点同时支持图形增强功能。通过挂载一块虚拟的Nvidia Tesla T4 企业级GPU（显存为4GB），为图形处理相关的应用加速，性能大约可提升至原来的4倍。



CPU



CPU + GPU

## ● 数据传输速率加速

## 支持钉钉网盘定向加速

EPC计算节点为高校用户配有专属域名，同时还支持钉钉网盘客户端定向加速，大幅度提升用户向云端传输或下载文件速率。



## 08 典型案例

### 哈尔滨某高校科研教育项目

哈尔滨某高校科研团队在遇到本地计算资源不足、计算性能不高等瓶颈后，主动联系UCloud询问超算资源。借助高性能的UCloud EPC快杰裸金属云主机、弹性灵活的UCloud EPC快杰云主机，同样的CFD算例，迁移至云上之后，速度达到本地高性能工作站的两倍，将原本至少10天以上的计算任务，缩减至仅需5天即可完成。UCloud EPC助力推进科研项目、加速科研产出成果。

### 上海某高校生命科学科研项目

在开展大规模的流体-固体耦合计算进行科研攻关时，对耦合计算要求高性能CPU、大内存和大容量存储提出了更高要求，但本地服务器资源紧张、配置固化、不易扩展，严重制约了科研工作地开展。UCloud“快杰版”云主机搭载了最新一代的高性能芯片，具备内存可指定、存储支持热态扩展等灵活性，科研团队决策快速上云，最终让该项目将原本需要20天以上的耦合计算加速至一周内完成，且实现了TB级数据的线下迁移。

### 蓝威技术传统HPC

上云项目蓝威技术是一家自主研发CAE的软件公司，将CAE和HPC引入云端，提供行业CAE云计算软件和云超算服务，业务场景主要面向工程仿真领域，对CPU的密集计算处理能力要求极高。UCloud EPC为蓝威技术带来了在灵活配置（资源随时供应、灵活调整）、高性能（云主机性能优于原有物理机达30%）、弹性（大业务到来时随时启动新集群，最终用户无需排队）、顺畅连接（UCloud高速跨域网络接入显著提升用户体验）等全方面的服务。相比蓝威之前物理服务器的部署模式，HPC性能提升了30%，而成本却降低了30%。性价比显著提升。



# UCLLOUD 优刻得



优刻得科技股份有限公司

[www.ucloud.cn](http://www.ucloud.cn)

Tel: 4000188113