The codes of Molecular Dynamics Simulation Analysis：

```
#! /bin/bash
#[]
if [ $usr=root ] ;then
module add GROMACS/2020-fosscuda-2019b
export GMX_GPU_DD_COMMS=true
export GMX_GPU_PME_PP_COMMS=true
export GMX_FORCE_UPDATE_DEFAULT_GPU=true
ntomp="$SLURM_CPUS_PER_TASK"
export OMP_NUM_THREADS=$ntomp
echo 4 |gmx pdb2gmx -f Stembromelain212.pdb -o protein_processed.gro -water tip3p -ignh -merge all
gmx editconf -f protein_processed.gro -o box.gro -bt dodecahedron -d 1.0
gmx solvate -cp box.gro -cs spc216.gro -p topol.top -o pro_solv.gro
wget http://www.mdtutorials.com/gmx/lysozyme/Files/ions.mdp
gmx grompp -f ions.mdp -c pro_solv.gro -p topol.top -o ions.tpr
gmx genion -s ions.tpr -o pro_solv_ions.gro -p topol.top -pname NA -nname CL -neutral
gmx grompp -f minim.mdp -c pro_solv_ions.gro -p topol.top -o em.tpr -maxwarn 2 -v
gmx mdrun -v -deffnm em
gmx energy -f em.edr -o potential.xvg
wget http://www.mdtutorials.com/gmx/lysozyme/Files/nvt.mdp
gmx grompp -f nvt.mdp -c em.gro -r em.gro -p topol.top -o nvt.tpr -maxwarn 1
gmx mdrun -deffnm nvt
gmx energy -f nvt.edr -o temperature.xvg
wget http://www.mdtutorials.com/gmx/lysozyme/Files/npt.mdp
gmx grompp -f npt.mdp -c nvt.gro -r nvt.gro -t nvt.cpt -p topol.top -o npt.tpr
gmx mdrun -deffnm npt
gmx energy -f npt.edr -o pressure.xvg
wget http://www.mdtutorials.com/gmx/lysozyme/Files/md.mdp
gmx grompp -f md.mdp -c npt.gro -t npt.cpt -p topol.top -o md_0_1.tpr -maxwarn 1
gmx mdrun -deffnm md_0_1
gmx rms -s md_0_1.tpr -f md_0_1_noPBC.xtc -o rmsd.xvg -tu ns
gmx rms -s md_0_1.tpr -f md_0_1_noPBC.xtc -o rmsd.xvg -tu ns
gmx rms -s em.tpr -f md_0_1_noPBC.xtc -o rmsd_xtal.xvg -tu ns
gmx rmsf -s em.tpr -f md_0_1_noPBC.xtc -o rmsf.xvg
```