```
#!/bin/bash

#PBS -l nodes=16:ppn=16
#PBS -q compchem
#PBS -N surfactants_heat

#################
# compiles envs #
#################

cd $PBS_O_WORKDIR
source
/opt/intel/compilers_and_libraries_2016.2.181/linux/bin/compilervars.sh
intel64
source
/opt/intel/compilers_and_libraries_2016.2.181/linux/mkl/bin/mklvars.sh
intel64
source
/opt/intel/compilers_and_libraries_2016.2.181/linux/mpi/intel64/bin/mpiva
rs.sh release_mt

######################
# gromacs executables #
######################

GMX="/path-to-gromacs-version/gromacs/bin/gmx_mpi"
MDRUN="/path-to-gromacs-version/bin/mdrun-5.1.2"

###############
# input files #
###############

MDP="heat.mdp"
TOP="../surfactants-water.top"
CRD="surfactants_min.gro"
NDX="../surfactants.ndx"

TPR=surfactants_heat.tpr

DEFFNM=surfactants_surface_heat.tpr

########################## preproc ###################################
$GMX grompp -f $MDP -c $CRD -p $TOP -n $NDX -o $TPR
######################################################################

###################
# mdrun arguments #
###################
ARGS="-v -deffnm $DEFFNM -s $TPR "
###################

#################
# MPIEXEC stuff #
#################
```

```
nodefile=tmpnodefile.$PBS_JOBID

cat $PBS_NODEFILE | sort -u > $nodefile

nodes=$(wc -l < $nodefile)

mpiexec.hydra -f $nodefile -ppn 2 -genv OMP_NUM_THREADS 8 $MDRUN  $ARGS
```