

iDove

博客园 首页 新随笔 联系 订阅 管理

搭建高性能计算环境（八）、应用软件的安装之gromacs


1, 下载安装新版本的gcc（高版本的gcc只是推荐使用的，系统自带的gcc4.4照样能正常编译、运行）



```
wget http://ftp.tsukuba.wide.ad.jp/software/gcc/releases/gcc-4.8.2/gcc-4.8.2.tar.bz2
tar xvf gcc-4.8.2.tar.bz2
cd gcc-4.8.2
./contrib/download_prerequisites
mkdir build
cd build
../configure --prefix=/opt/gcc-4.8.2 --enable-shared --enable-threads=posix --enable-check
ing=release --enable-languages=c,c++,fortran
make  此处可以使用make -j4进行4核并行编译，提高速度。根据机器配置需要耗费时间不同，大概需要1个多小时。
make install
```




安装完成后设置环境变量(/etc/profile)，需要重新登录后才起作用。




```
export PATH=/opt/gcc-4.8.2/bin:$PATH
export LD_LIBRARY_PATH=/opt/gcc-4.8.2/lib:$LD_LIBRARY_PATH
export LD_LIBRARY_PATH=/opt/gcc-4.8.2/lib64:$LD_LIBRARY_PATH
```


2, 下载安装fftw




```
wget http://fftw.org/fftw-3.3.4.tar.gz
tar xvf ~test/fftw-3.3.4.tar.gz
cd fftw-3.3.4
./configure --prefix=/opt/fftw-3.3.4 --enable-float --enable-shared
make
make install
```



3,下载安装cmake



```
wget http://www.cmake.org/files/v2.8/cmake-2.8.12.2.tar.gz
tar xvf cmake-2.8.12.2.tar.gz
cd cmake-2.8.12.2
./configure --prefix=/opt/cmake-2.8.12.2
gmake
gmake install
```




安装完成后设置环境变量(/etc/profile)，需要重新登录后才起作用。



```
export PATH=/opt/cmake-2.8.12.2/bin/:$PATH
```

4, 下载安装gromacs



```
wget ftp://ftp.gromacs.org/pub/gromacs/gromacs-5.0.2.tar.gz
tar xvf gromacs-5.0.2.tar.gz
cd gromacs-5.0.2
```

公告

昵称: iDove  
园龄: 1年9个月  
粉丝: 5  
关注: 1  
+加关注

< 2016年9月 >						
日	一	二	三	四	五	六
28	29	30	31	1	2	3
4	5	6	7	8	9	10
11	12	13	14	15	16	17
18	19	20	21	22	23	24
25	26	27	28	29	30	1
2	3	4	5	6	7	8

搜索

找找看

谷歌搜索

常用链接

我的随笔  
我的评论  
我的参与  
最新评论  
我的标签

我的标签

HPC(6)  
md(3)  
linux(2)  
lammps(1)  
mpi(1)  
MS(1)  
ssh(1)  
vasp(1)  
分子动力学(1)  
量化计算(1)  
更多

随笔分类

Hadoop  
HPC(9)  
Linux(5)

```
mkdir build
cd build
cmake .. -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/opt/gromacs-5.0.2 -DGMX_FFT_LIBRARY=fftw3 -DFFTW_LIBRARY=
"/opt/fftw-3.3.4/lib/libfftw3f.so" -DFFTW_INCLUDE_DIR="/opt/fftw-3.3.4/include/" -DCMAKE_
C_COMPILER=/opt/gcc-4.8.2/bin/gcc -DCMAKE_CXX_COMPILER=/opt/gcc-4.8.2/bin/g++ -DGMX_MPI=on
-DGMX_GPU=on
如果需要跨节点计算加上-DGMX_MPI=on, 需要GPU支持加上-DGMX_GPU=on, 需要提前配置好mpi和cuda环境
make -j4 并行编译
make install
```

安装完成后设置环境变量(/etc/profile), 需要重新登录后才起作用。

```
export PATH=/opt/gromacs-5.0.2/bin:$PATH
export LD_LIBRARY_PATH=/opt/gromacs-5.0.2/lib64:$LD_LIBRARY_PATH
```

5, 测试, 验证安装成功

```
wget ftp://ftp.gromacs.org/pub/benchmarks/ADH_bench_systems.tar.gz
tar xvf ADH_bench_systems.tar.gz
cd adh_cubic
grompp_mpi -f rf_verlet.mdp
mdrun_mpi
如果能够正常计算并结束, 说明gromacs已经安装成功。
```

分类: [HPC](#), [Linux](#)

标签: [HPC](#), [md](#), [Gromacs](#)

好文要顶

关注我

收藏该文



iDove

关注 - 1

粉丝 - 5

+加关注

« 上一篇: [搭建高性能计算环境\(七\)、应用软件的安装之MS](#)

» 下一篇: [搭建高性能计算环境\(九\)、应用软件的安装之gaussian 09](#)

posted @ 2014-11-21 10:55 iDove 阅读(566) 评论(0) 编辑 收藏

[刷新评论](#) [刷新页面](#) [返回顶部](#)

注册用户登录后才能发表评论, 请 [登录](#) 或 [注册](#), [访问网站首页](#)。

【推荐】50万行VC++源码: 大型组态工控、电力仿真CAD与GIS源码库

【活动】硅谷IT教育平台Udacity邀请您来免费上课

【推荐】移动直播百强八成都在用融云即时通讯云

【推荐】报表开发有捷径: 快速设计轻松集成, 数据可视化和交互

【推荐】网易云信一天开发一个微信, 独创1对1技术顾问让开发加速



最新IT新闻:

- 三星专利: 让智能手机同时运行Android和Windows Mobile系统
- 施普林格·自然集团回应: 韩春雨事件尚无最终结果

随笔档案

2014年11月 (10)

最新评论

1. Re:搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP

非常感谢楼主的详细安装信息, 按照楼主的方法成功的安装了MS, 但是在编译VSAP时报错。报错信息如下: ./preprocess base.f90 - DHOST=\"LinuxIFC\" -DCACHE.....

--安风琴

2. Re:搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP

非常感谢楼主, 我找了好久, 没想到楼主这里写的这么详细! 一定要顶上去!!

--huoxing487

3. Re:搭建高性能计算环境 (一)、Linux操作系统的安装和配置

博主, 你真辛苦, 这里的10篇笔记对我们做计算的人来说, 是极大的帮助。只是第一, 二篇的图片不能显示。

--coffeeetan

阅读排行榜

1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(989)
2. 搭建高性能计算环境 (三)、安装intel编译器和mpi(909)
3. 搭建高性能计算环境 (九)、应用软件的安装之gaussian 09(596)
4. 搭建高性能计算环境 (八)、应用软件的安装之gromacs(565)
5. 搭建高性能计算环境 (五)、应用软件的安装之Amber12(528)

评论排行榜

1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(2)
2. 搭建高性能计算环境 (一)、Linux操作系统的安装和配置(1)

推荐排行榜

1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(1)
2. 搭建高性能计算环境 (十)、应用软件的安装之Wien2k(1)
3. 搭建高性能计算环境 (九)、应用软件的安装之gaussian 09(1)

- 苹果香港网站页面意外出现新一代iPhone正式名称
- 2016微博用户研究：新欢、旧爱、核心价值与迫切之疾
- 沃尔沃将向其它汽车制造商出售无人驾驶汽车技术
- » 更多新闻...



**最新知识库文章:**

- 程序猿媳妇儿注意事项
- 可是姑娘，你为什么要编程呢？
- 知其所以然（以算法学习为例）
- 如何给变量取个简短且无歧义的名字
- 编程的智慧
- » 更多知识库文章...

Copyright ©2016 iDove