

1. 下载安装 fftw

wget <http://fftw.org/fftw-3.3.4.tar.gz> %%可自行下载

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

2. 下载安装 cmake

wget <http://www.cmake.org/files/v2.8/cmake-2.8.12.2.tar.gz>

%%可自行下载

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),

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

3. 下载安装 Gromacs （官网 <http://www.gromacs.org/> ）

tar xvf gromacs-5.1.tar.gz

cd gromacs-5.1

mkdir build

cd build

```
cmake .. -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/opt/gromacs-5.1 -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
```

%%注意 gcc 和 g++的路径，可以使用 which 进行查看路径

make -j %%利用所有核并行编译

%%注意 MPI 并行库，我刚开始使用 HPMPi 没有成功，后来安装 OpenMPI 编译 OK

make install

安装完成后设置环境变量(/etc/profile) 可直接改.bashrc

```
export PATH=/opt/gromacs-5.1/bin:$PATH
```

```
export LD_LIBRARY_PATH=/opt/gromacs-5.1/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
```

```
gmx_mpi grompp -f rf_verlet.mdp
```

```
gmx_mpi mdrun
```

%%并行指令：**mpirun -np X gmx_mpi mdrun**

如果能够正常计算并结束，说明 gromacs 已经安装成功。

参考自 <http://www.tuicool.com/articles/3y2e2a>