

思想家公社的门口：量子化学·分子模拟·二次元

最高水准的计算化学交流论坛“计算化学公社”：<http://bbs.keinsci.com>。思想家公社QQ群专供讨论理论、计算化学，1号群18616395，2号群466017436（讨论内容相同，可加入任意其一但不可都加入，申请信息务必注明研究方向，否则一概不批）。Sobereva的硬件资料库：<http://sobereva.com/datasheet.rar>。本博客文章皆为原创，版权归Sobereva所有，未经允许不得转载

[首页](#)[博文索引](#)[关于本博客](#)

Gromacs 5.1.1与4.6.7编译方法

Author: [sobereva](#) | Date: June 8, 2015 | Category: [分子模拟](#) | Views: 5,691

Gromacs 5.1.1与4.6.7编译方法

文/Sobereva(1) Last update: 2016-Jan-25

Gromacs 5.0(5.1.1编译方法与此完全一样)

编译条件：RHEL6-U1 64bit, Intel Q6600, root。

必须有cmake 2.8.8及以上。MKL、icc不是必需的，用MKL不比FFTW更快，用icc比gcc优势也不明显，故没必要装。单机并行不用装MPI库，因为用的是OpenMP并行。跨节点运行基于MPI，可以用OpenMPI 1.6及以上版本或MPICH 1.4.1及以上版本。

运行cmake -version，如果显示的版本低于2.8.8，到这里下载最新的cmake源代码：

<http://www.cmake.org/cmake/resources/software.html>

解压cmake，进入其目录，运行./bootstrap;make -j;make install，就被安装到了/usr/local/bin下面。删掉cmake目录。

tar -zxf gromacs-5.0.tar.gz解压之，进入Gromacs的解压目录

mkdir build

cd build

cmake .. -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/sob/gromacs50（注：如果用的CPU比较新，编译器版本又比较老，比如RHEL6自带的，这一步可能会报错提示说编译器不支持AVX2指令集，此时应当再加上-DGMX_SIMD=AVX_256来强制用AVX1指令集）

```
make -j    //-j代表调用所有核并行编译
make install
```

在make过程中Gromacs会自动下载FFTW3.3.3并编译之。下载和编译总共只需几分钟。程序被安装到了/sob/gromacs50。删掉Gromacs安装目录，并在用户的.bashrc里加上export PATH=\$PATH:/sob/gromacs50/bin。

如果要编译双精度版本，cmake的时候写上-DGMX_DOUBLE=ON。此时不兼容GPU加速。编译出来的可执行文件默认都带着_d后缀，因此可以和单精度版安装到同一目录，不会冲突。

**** CUDA版安装方法

Gromacs通过CUDA支持nVidia的GPU来加速动力学计算，效率很好。如果用的是4核CPU，用高端GeForce显卡可加速>3倍，性价比很高。

先去nVidia网站下载并安装CUDA toolkit到默认路径。其它同上，区别仅是cmake这一步：

```
cmake .. -DGMX_GPU=ON -DCUDA_TOOLKIT_ROOT_DIR=/usr/local/cuda-5.5
-DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/sob/gromacs50
```

Gromacs从5.0开始也支持Intel XEON phi来加速计算，但只是初步支持，性价也远低于使用高端GeForce显卡，故这里就不说了。

**** 自己装FFTW的情况

有时候安装的机器不通网，Gromacs编译时没法自动联网下载FFTW，就必须先自行下载安装FFTW，然后在编译时调用。过程是：去<ftp://ftp.fftw.org/pub/fftw/>下载FFTW3.3.3或更高版本，解压并进入目录，运行

```
./configure --prefix=/sob/fftw333 --enable-sse2 --enable-float --enable-shared
```

```
make -j
make install
```

在编译Gromacs的cmake那步之前先运行

```
export CMAKE_PREFIX_PATH=/sob/fftw333
```

然后在cmake时去掉-DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON。

注意--enable-float代表编译单精度版本FFTW。如果是给双精度Gromacs用的，应该把--enable-float去掉。

**** 编译MPI版的方法

去<http://www.open-mpi.org>下载openmpi，这里用1.6.5版。解压并进入目录后运行

```
./configure
```

```
make all install
```

然后在cmake时加上-DGMX_MPI=on即可。编译出来的文件都带着_mpi后缀，因此和单节点并行的版本可以装到一起，不会冲突。

注：Gromacs充分对主流的CPU支持的SIMD指令集进行优化，编译时会自动检测CPU架构，采用适当的编译选项，充分利用支持的指令集达到最佳性能。因此，如果几个机子的CPU架构不同，不要把编译好的Gromacs程序直接互拷，否则运行会出问题。

Gromacs 4.6.7

编译方法和5.0基本没有任何差异，下面只是简要写写，具体请参考上面的内容。

编译条件：RHEL6-U1 64bit, Q6600, root。

gmx 4.6开始完全使用cmake而不用./configure。必须有cmake 2.8及以上。MKL、icc不需要装。单机并行不用装MPI库，跨节点运行可以用openMPI或mpich。安装方法参考了http://www.gromacs.org/Documentation/Installation_Instructions。

到这里下载最新的cmake源代码：<http://www.cmake.org/cmake/resources/software.html>

解压cmake，进入其目录，运行./bootstrap;make;make install，就被安装到了/usr/local/bin下面。删掉cmake目录。

tar -zxf gromacs-4.6.7.tar.gz解压之，进入gmx的解压目录

mkdir build

cd build

cmake .. -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/sob/gromacs467

make -j

make install

在make过程中gmx会自动下载fftw3.3.2并编译之。下载和编译总共只耗时<3分钟。程序被安装到了/sob/gromacs467。删掉gmx安装包及解压目录。

如果要编译双精度版本，cmake的时候写上-DGMX_DOUBLE=ON。此时不兼容GPU加速。编译出来的可执行文件默认都带着_d后缀。

**** CUDA版安装方法

安装CUDA toolkit。其它同上，区别仅是cmake这一步：

cmake .. -DGMX_GPU=ON -DCUDA_TOOLKIT_ROOT_DIR=/usr/local/cuda-5.5

-DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/sob/gromacs467gpu

**** 自己装fftw的情况

解压fftw3.3.2，进去，运行

./configure --prefix=/sob/fftw332 --enable-sse2 --enable-float --enable-shared

make

make install

然后gmx里的cmake步骤改为

```
export CMAKE_PREFIX_PATH=/sob/fftw32
```

```
cmake .. -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/sob/gromacs467
```

如果用于编译双精度gmx，--enable-float应去掉

评论已关闭

Next: [使用KiSTheIP结合Gaussian基于过渡态理论计算反应速率常数](#)

Previous: [简谈原子半径](#)

京ICP备15027470号