

Gromacs 5.0.6 版本安装过程

郑刚 NSCC-TJ

zhenggang@nsc-tj.gov.cn

2015.08.10

1. 什么是 Gromacs?

GROMACS 是用于研究生物分子体系的分子动力学程序包。它可以用分子动力学、随机动力学或者路径积分方法模拟溶液或晶体中的任意分子，进行分子能量的最小化，分析构象等。它的模拟程序包包含 GROMACS 力场(蛋白质、核苷酸、糖等)，研究的范围可以包括玻璃和液晶、到聚合物、晶体和生物分子溶液。GROMACS 是一个功能强大的分子动力学的模拟软件，其在模拟大量分子系统的牛顿运动方面具有极大的优势。

2. Gromacs 编译环境

[gromacs-5.0.6.tar.gz](#) 2015-07-26 b0bb547227143e15b3715c0115a2f4af

- intel Compiler 2013
- mpich2
- cmake-3.3.0
- fftw-3.3.4

3. Gromacs 安装过程

3.1 设置 intel Compiler 2013 及 mpich2 的环境变量

```
$ vim ~/.bashrc
# Intel + MPI
# Intel 2013
source /opt/intel/composer_xe_2013.0.079/bin/iccvars.sh intel64
source /opt/intel/composer_xe_2013.0.079/bin/fortvars.sh intel64
# MPI
export PATH=/usr/local/mpi-intel2013/bin:$PATH
export LD_LIBRARY_PATH=/usr/local/mpi-intel2013/lib:$LD_LIBRARY_PATH
$ source ~/.bashrc
```

3.2 安装 cmake-3.3.0

- a) 下载 cmake 源文件（下载合适的版本）

网站下载: <http://www.cmake.org/download/>

```
$ tar -zxvf cmake-3.3.0.tar.gz
```

- b) 编译

```
$ cd cmake-3.3.0
$ ./bootstrap --prefix=$HOME/bin/cmake330 2>&1 | tee bootstrap-cmake330.LOG
$ make -j12 2>&1 | tee make- cmake330.LOG
$ make install 2>&1 | tee make-install- cmake330.LOG
```

- c) 配置环境（写入.bashrc）

```
# cmake-3.3.0
export PATH=$HOME/bin/cmake330/bin:$PATH
export LD_LIBRARY_PATH=$HOME/bin/cmake330/lib:$LD_LIBRARY_PATH
```

3.3 安装 FFTW-3.3.4

a) 下载 FFTW3.3.4 源文件

网站下载: <http://www.fftw.org/download.html>

```
$ tar -xzvf fftw-3.3.4.tar.gz
```

b) 编译

```
$ cd FFTW-3.3.4
```

```
./configure --prefix=$HOME/lib/fftw334 CC=icc --enable-mpi --enable-float  
--enable-shared --enable-fma 2>&1 | tee configure-singlePrecision.LOG
```

```
$ make 2>&1 | tee make-singleP.log
```

```
$ make install 2>&1 | tee make-install-singleP.log
```

c) 参数说明:

./configure	配置环境
--prefix=\$HOME/lib/fftw334	安装目录
CC=icc	编译器选择 使用 icc (默认为 gcc)
--enable-mpi	支持 mpi
--enable-float	支持单精度 (默认双精度)
--enable-threads	支持线程
--enable-openmp	支持 openmp
--enable-sse	启用 SSE2 优化
--enable-sse2	启用 SSE2 优化
--enable-shared	生成共享库
--enable-fma	启用优化的机器乘加

其他配置选项可以通过: ./configure -h 查看。

3.4 安装 gromacs-cpu-static

a) 下载 gromacs-5.0.6 源文件

网站下载: <http://www.gromacs.org/Downloads>

```
$ tar -xzvf gromacs-5.0.6.tar.gz
```

b) 编译

```
$ cd gromacs-5.0.6
```

```
$ mkdir build-cpu-static
```

```
$ cd build-cpu-static
```

```
$ cmake .. -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/gromacs506/cpu
```

```
-DCMAKE_C_COMPILER=icc -DCMAKE_CXX_COMPILER=icpc
```

```
-DGMX_FFT_LIBRARY=fftw3
```

```
-DFFTW_LIBRARY="$HOME/lib/fftw334/lib/libfftw3f.a"
```

```
-DFFTW_INCLUDE_DIR="$HOME/lib/fftw334/include/" -DGMX_MPI=on
```

```
-DGMX_GPU=off -DGMX_PREFER_STATIC_LIBS=on -DBUILD_SHARED_LIBS=off
```

```
$ make -j12 2>&1 | tee make-gromacs506.LOG
```

```
$ make install 2>&1 | tee make-install-gromacs506.LOG
```

c) 配置环境 (写入 .bashrc 或执行程序脚本)

```
# gromacs-5.0.6-cpu
```

```
export PATH=$HOME/gromacs506/cpu-static/bin:$PATH
```

```
export LD_LIBRARY_PATH=$HOME/gromacs506/cpu-static/lib:$LD_LIBRARY_PATH
```

d) cmake 的参数说明

-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=\$HOME/gromacs506/cpu	安装目录
-DCMAKE_C_COMPILER=icc	使用 icc 编译 c
-DCMAKE_CXX_COMPILER=icpc	使用 icpc 编译 cpp
-DGMX_FFT_LIBRARY=fftw3	使用 fftw3
-DFFTW_LIBRARY="\$HOME/lib/fftw334/lib/libfftw3f.a"	fftw 动态库 (.so 改为动态库)
-DFFTW_INCLUDE_DIR="\$HOME/lib/fftw334/include/"	fftw/include 目录
-DGMX_MPI=on	支持 MPI
-DGMX_GPU=off	关闭 GPU
-DGMX_PREFER_STATIC_LIBS=on	编译静态库
-DBUILD_SHARED_LIBS=off	关闭共享库

3.5 安装 gromacs-gpu-static

a) 配置环境

```
# CUDA
export CUDA_HOME=/vol-th/software/cuda/cuda-5.0
export PATH=$CUDA_HOME/bin:$PATH
export LD_LIBRARY_PATH=/vol-th/lib:$CUDA_HOME/lib64:$LD_LIBRARY_PATH
```

b) 编译

```
$ cd gromacs-5.0.6
$ mkdir build-gpu
$ cd build-gpu
$ cmake .. -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/gromacs506/gpu
-DMAKE_C_COMPILER=icc -DCMAKE_CXX_COMPILER=icpc
-DGMX_FFT_LIBRARY=fftw3
-DFFTW_LIBRARY="$HOME/lib/fftw334/lib/libfftw3f.a"
-DFFTW_INCLUDE_DIR="$HOME/lib/fftw334/include/" -DGMX_MPI=on
-DGMX_GPU=on -DGMX_PREFER_STATIC_LIBS=on -DBUILD_SHARED_LIBS=off
-DCUDA_TOOLKIT_ROOT_DIR=/vol-th/software/cuda/cuda-5.0
$ make -j12 2>&1 | tee make-gromacs506.LOG
$ make install 2>&1 | tee make-install-gromacs506.LOG
```

c) 配置环境 (写入.bashrc 或执行程序脚本)

```
# gromacs-5.0.6-gpu
export PATH=$HOME/gromacs506/gpu-static/bin:$PATH
export LD_LIBRARY_PATH=$HOME/gromacs506/gpu-static/lib:$LD_LIBRARY_PATH
```

d) cmake 的参数说明

-DGMX_GPU=on	支持 gpu
-DCUDA_TOOLKIT_ROOT_DIR=/vol-th/software/cuda/cuda-5.0	cuda 路径

4. Gromacs 测试

a) 下载

ftp://ftp.gromacs.org/pub/benchmarks/ADH_bench_systems.tar.gz

b) 测试算例

```
$ tar xvf ADH_bench_systems.tar.gz
$ cd adh_cubic
```

```
$ grompp_mpi -f rf_verlet.mdp （设置环境变量，否则找不到）
```

c) 提交任务（CPU）

```
$ vim run.sh
#!/bin/bash
export PATH=$HOME/gromacs506/cpu-static/bin:$PATH
export LD_LIBRARY_PATH=$HOME/gromacs506/cpu-static/lib:$LD_LIBRARY_PATH
yhrun -n24 -pdebug mdrun_mpi
$ source run.sh
$ chmod +x run.sh
$ yhbatch -n24 -pdebug run.sh
```

d) 提交任务（GPU）

```
$ vim run.sh
#!/bin/bash
export PATH=$HOME/gromacs506/gpu-static/bin:$PATH
export LD_LIBRARY_PATH=$HOME/gromacs506/gpu-static/lib:$LD_LIBRARY_PATH
yhrun -n1 -pgpu_test mdrun_mpi
$ source run.sh
$ chmod +x run.sh
$ yhbatch -n1 -pgpu_test run.sh
```

c) 检查输出文件

如果能够正常计算并结束，说明 gromacs 已经安装成功。

如有疑问欢迎联系，祝好！

郑刚

国家超级计算天津中心 应用研发工程师

电话：022-65375527

传真：022-65375501

邮箱：zhenggang@nscg-tj.gov.cn

地址：天津经济技术开发区第六大街与北海路交口滨海外包产业园 5 号楼 3 层

邮编：300457

网址：www.nscg-tj.gov.cn