

Linux サーバー版 Gromacs インストールマニュアル

2019/1/28

本マニュアルの目的

本マニュアルでは、単独ユーザが独占的に Linux サーバー (CentOS 6.6) を使用して Gromacs ジョブを実行するための環境構築方法と Winmostar のリモートジョブ機能による計算手順を示しています。つまり複数ユーザが共同使用する計算サーバー等は対象外です。そのため計算環境は全てユーザのホームディレクトリ配下で行う構築することを想定しています。また単独ノードでの複数コアによる並列計算のみを想定しており、mpi による複数ノードにまたがる並列計算や GPU による計算は対象としておりません。共用サーバー上での環境構築および複数ノードをまたぐ mpi 並列実行の環境構築、GPU を用いた環境構築などにつきましては別途お問い合わせください。

なお、本マニュアルでは Linux サーバー上でジョブスケジューラ TORQUE¹が使用できる状態であることを仮定しています。また以下の命名としています。


サーバーホスト名 : remote_server

ユーザ名 : winmostar_user

I. Linux サーバー上への Gromacs の動作環境設定方法

1. Gromacs のサイト内の Downloads of outdated releases

http://www.gromacs.org/Downloads_of_outdated_releases にブラウザ (IE など) を用いてアクセスし `gromacs-5.0.7.tar.gz` をダウンロードする。²



The screenshot shows the GROMACS website's 'Downloads of outdated releases' page. The page has a navigation menu on the left and a main content area. The main content area is titled 'Downloads of outdated releases' and contains sections for 'Supported releases' and 'Older unsupported releases'. Under 'Older unsupported releases', there is a section for 'GROMACS 5.0 releases' which contains a table of releases. The table has three columns: the release name (e.g., gromacs-5.0.7.tar.gz), the release date, and a hash. A mouse cursor is pointing at the gromacs-5.0.7.tar.gz link.

Release Name	Release Date	Hash
gromacs-5.0.7.tar.gz	2015-10-14	2e63e1f5e492415af8bf72191064395b
gromacs-5.0.6.tar.gz	2015-07-26	b0bb547227143e15b3715c0115a2f4af
gromacs-5.0.5.tar.gz	2015-05-13	206884042be656dc06fb73847a9af97f
gromacs-5.0.4.tar.gz	2014-12-15	c177ae5fd6d71e2bec7369bc66cd082e

2. `gromacs-5.0.7.tar.gz` を ftp など で Linux サーバー に転送する。

3. Linux サーバー にログイン し環境を確認する。

`cmake` (2.8.8 以降), `make`, 及び GNU compiler (4.7 以降) が使用できる環境でなくてはならな

¹ <http://www.adaptivecomputing.com/products/open-source/torque/> yum 等を用いて導入する。

² 本手順は、Gromacs のバージョン `gromacs-5.0.4` に基づいて記述されている。それ以外のバージョンについては手順が異なることがある。

い。以下のようなコマンドで確認する。

```
$ cmake --version
```

```
$ make --version
```

```
$ gcc --version
```

環境が無いあるいはバージョンが古い場合は yum などを用いて導入、最新化を行う。

4. 圧縮ファイルを解凍する。

```
$ tar xzvf gromacs-5.0.7.tar.gz
```

5. cmake を用いて/build 配下にインストール環境を構築する。³

```
$ cd gromacs-5.0.7
```

```
$ mkdir build
```

```
$ cd build
```

```
$ cmake .. -DGMX_SIMD=SSE4.1 -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON -  
DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=ON -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/  
gromacs-5.0.7 -DGMX_GPU=OFF -DGMX_DOUBLE=OFF
```

※ gmx だけ作成するなら-DGMX_BUILD_MDRUN_ONLY=ON⁴ とする。

※ Gromacs 倍精度版を作成する場合は-DGMX_DOUBLE=ON とする。

³ -DGMX_SIMD= SSE4.1 は 2007 年以降の全ての Intel processor に対応するオプション指定であるが、必要に応じて変更する。例えば AVX_256 は Sandy Bridge(2011)以降の Intel processor 用のオプション指定であり SSE4.1 より若干の高速化が期待できる。

⁴ http://www.gromacs.org/Documentation/Installation_Instructions “Building only mdrun”参照

```

:
:
-- [download 80% complete]
-- [download 81% complete]
-- [download 82% complete]
-- [download 83% complete]
-- [download 84% complete]
-- [download 85% complete]
-- [download 86% complete]
-- [download 87% complete]
-- [download 88% complete]
-- [download 89% complete]
-- [download 90% complete]
-- [download 91% complete]
-- [download 92% complete]
-- [download 93% complete]
-- [download 94% complete]
-- [download 95% complete]
-- [download 96% complete]
-- [download 97% complete]
-- [download 98% complete]
-- [download 99% complete]
-- [download 100% complete]
-- Configuring done
-- Generating done
-- Build files have been written to: /home/winmostar_user /gromacs-5.0.7/build
[winmostar_user @ remote_server gromacs-5.0.7]

```

画面にエラーが出力されていないか確認する。

6. コンパイルとリンクを行う

```
$ make
```

```

:
:
:
[ 98%] Building C object src/gromacs/CMakeFiles/libgromacs.dir/__/external/thre
ad_mpi/src/once.c.o
[ 98%] Building C object src/gromacs/CMakeFiles/libgromacs.dir/utility/basevers
ion-gen.c.o
Linking CXX shared library ../lib/libgromacs.so
[ 98%] Built target libgromacs
Scanning dependencies of target template
Scanning dependencies of target gmx
[ 98%] [100%] [100%] Building CXX object share/template/CMakeFiles/template.dir
/template.cpp.o
Building CXX object src/programs/CMakeFiles/gmx.dir/gmx.cpp.o
Building CXX object src/programs/CMakeFiles/gmx.dir/legacymodules.cpp.o
Linking CXX executable ../bin/gmx
[100%] Built target gmx
Linking CXX executable ../bin/template
[100%] Built target template
[winmostar_user@remote_server gromacs-5.0.7]

```

画面にエラーが出力されていないか確認する。

7. チェックを行う

```
$ make check
```

自動的に 21 種のテストを実施する。

```
:
:
:
Start 19: regressiontests/freenenergy
19/21 Test #19: regressiontests/freenenergy ..... Passed 8.31 sec
Start 20: regressiontests/pdb2gmx
20/21 Test #20: regressiontests/pdb2gmx ..... Passed 8.25 sec
Start 21: regressiontests/rotation
21/21 Test #21: regressiontests/rotation ..... Passed 5.55 sec

100% tests passed, 0 tests failed out of 21

Label Time Summary:
GTest          = 0.89 sec
IntegrationTest = 3.14 sec
UnitTest       = 0.89 sec

Total Test time (real) = 114.79 sec
[100%] Built target run-ctest
Scanning dependencies of target check
[100%] Built target check
```

上記のとおりメッセージであれば正常にコンパイルとリンクが正しく行われている。

8. インストールする

```
$ make install
```

9. .bashrc に次の行を追加する。⁵

```
source $HOME/gromacs-5.0.7/bin/GMXRC
```

II. Winmostar から Gromacs をリモートジョブ実行する方法

- (ア) [Winmostar Gromacs 基礎編チュートリアル](#)の内容に従い操作を進めるが、キーワード設定ウインドウで **Run** ボタンを押さずに **OK** ボタンを押す。
- (イ) その後、[ユーザマニュアルのリモートジョブの実行手順](#)に従って操作を行い、**Get All Files** ボタンを押してファイルを取得するところまで実行する。
- (ウ) 再び [Winmostar Gromacs 基礎編チュートリアル](#)の内容に戻り、ローカルジョブの時と全く同じ操作方法で結果解析を行う。

以上

⁵ ここでは OpenBabel、AmberTools14 及び Acrypype の計算環境が全てユーザのホームディレクトリ配下に構築されていることを想定している。