Linux サーバー版 Gromacs インストールマニュアル

2025 年 5 月 16 日

本マニュアルの目的

本マニュアルでは、単一ユーザが独占的に Linux サーバ（RockLinux 9.4）を使用して Gromacs ジョブを並列実行するための環境を構築する方法と、Winmostar™のリモートジョブ投入機能から Linux サーバへジョブを投入する方法を示しています。計算環境は全てユーザのホームディレクトリ以下で行うことを想定しています。複数ユーザが使用する共用サーバの環境を構築する方法、複数ノードを利用する環境を構築する方法、GPU を用いる環境を構築する方法などは本マニュアルに含まれませんので、別途お問い合わせください。

1. コンパイラの確認・インストール

① Linux サーバにログインし、以下のコマンドで make, gcc(4.7 以降), gcc-c++, cmake(2.8.8 以降)がインストールされているか確認する。

```
$ which make
$ gcc --version
$ cmake --version
```

インストールされていない場合は dnf などのパッケージ管理ソフトウェアを用いてインストールする。

```
$ sudo dnf install make gcc gcc-c++ cmake
```

② （MPI 並列版が必要な方のみ）以下のコマンドで mpicc がインストールされているか確認する。

```
$ which mpicc
```

インストールされていない場合は dfn などのパッケージ管理ソフトウェアを用いてインストールする。

```
$ sudo dnf install mpich-devel
```

上記の手順でインストールした場合は、現在のシェルで Gromacs をビルドするために、以下のコマンドを実行して MPICH を有効にする。なお、~/.bashrc にこのコマンドを追記すると Linux サーバにログインし直すたびにこのコマンドの実行が不要となるが、同サーバ上における他のソフトウェアとの設定の調整が必要となる。本書では~/.bashrc への追記は必須ではない。

```
$ export PATH=$PATH:/usr/lib64/mpich/bin
```

2. Gromacs のインストール

① Gromacs のサイト内の https://ftp.gromacs.org/pub/gromacs/にウェブブラウザでアクセスし gromacs-5.0.7.tar.gz をダウンロードする。

② gromacs-5.0.7.tar.gz を SCP, FTP などで Linux サーバに転送する。ここではホームディレクトリ直下に置いたと仮定する。

③ Linux サーバにログインし、以下のコマンドで圧縮ファイルを解凍する。

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

④ 以下のコマンドで単精度スレッド並列版 Gromacs のビルド設定を行う。なお、Winmostar は単精度版と倍精度版の両方がインストールされていることを前提としている。また、Regression Test は本稿執筆時点でダウンロードできないため OFF にしている。Gromacs のバージョンによっては、gromacs-5.0.7 ディレクトリがホームディレクトリ直下でない場合に、cmake の引数の-DCMAKE_INSTALL_PREFIX の値を実際の gromacs-5.0.7 ディレクトリのパスに変更しないとビルドできない場合がある。

```
$ cd gromacs-5.0.7
$ mkdir build
$ cd build
$ cmake .. -DGMX_SIMD=AVX_256 -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON
-DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=OFF
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/gromacs-5.0.7 -DGMX_GPU=OFF
-DGMX_THREAD_MPI=ON -DGMX_DOUBLE=OFF
```

（cmake からの行は改行せず一行で入力する）

```
   :
-- 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したら、次のコマンドでビルドを行う。

```
$ make
```

```
   :
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したら、次のコマンドでインストールを開始する。

```
$ make install
```

※　Regression Test をダウンロードできるバージョンの場合（5.0.7 の場合は不可）はインストールの前に$ make check で動作確認を行う。

⑤　同様に以下のコマンドで倍精度スレッド並列版 Gromacs をビルドしインストールする。なお、Winmostar は単精度版と倍精度版の両方がインストールされていることを前提としている。

```
$ cmake .. -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/gromacs-5.0.7 -DGMX_GPU=OFF
-DGMX_THREAD_MPI=ON -DGMX_DOUBLE=OFF
```

（cmake からの行は改行せず一行で入力する）

```
$ make
$ make install
$ cmake .. -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/gromacs-5.0.7 -DGMX_GPU=OFF
-DGMX_THREAD_MPI=ON -DGMX_DOUBLE=ON
```

（cmake からの行は改行せず一行で入力する）

```
$ make
$ make install
```

⑥　（MPI 並列版が必要な方のみ）同様に以下のコマンドで MPI 並列版 Gromacs をビルドしインストールする。

```
$ cmake .. -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/gromacs-5.0.7 -DGMX_GPU=OFF
-DGMX_MPI=ON -DGMX_DOUBLE=OFF
```

（cmake からの行は改行せず一行で入力する）

```
$ make
$ make install
$ cmake .. -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/gromacs-5.0.7 -DGMX_GPU=OFF
-DGMX_MPI=ON -DGMX_DOUBLE=ON
```

（cmake からの行は改行せず一行で入力する）

```
$ make
$ make install
```

3. Linux サーバ上での最終確認

① Winmostar から接続するときの状況を再現するため、Linux サーバにログインしなおす。

② （MPI 並列版が必要な方のみ）MPI の動作を確認するため、MPI の起動に必要な環境を設定するコマンドを入力しメモに控えておく。本書の手順に従った場合は、以下のコマンドを入力する。

```
$ export PATH=$PATH:/usr/lib64/mpich/bin
```

③ （MPI 並列版が必要な方のみ）以下のコマンドを実行してインストールした mpirun のパスが表示されることを確認する。確認できない場合は②の設定を見直す。

```
$ which mpirun
```

④ （MPI 並列版が必要な方のみ）MPI の動作確認のため、以下のコマンドを実行して現在のディレクトリ名が 2 つ表示されることを確認する。確認できない場合は②の設定を見直す。

```
$ mpirun -n 2 pwd
```

⑤ Gromacs の動作を確認するため、Gromacs の起動に必要な環境を設定するコマンドを入力しメモに控えておく。本書の手順に従った場合は、以下のコマンドを入力する。

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

⑥ 以下のコマンドを実行してインストールした Gromacs のパスが表示されることを確認する。確認できない場合は⑤の設定を見直す。

```
$ which gmx
$ which gmx_d
```

⑦ 以下のコマンドを実行して Gromacs が起動しヘルプが表示されることを確認する。確認できない場合は⑤の設定を見直す。

```
$ gmx -quiet -h
```

表示される例：

```
SYNOPSIS

gmx [-[no]h] [-[no]quiet] [-[no]version] [-[no]copyright]

OPTIONS

Other options:
-[no]h          (no)     Print help and quit
…
（以下省略）
```

4. Winmostar からの設定および動作確認

ユーザマニュアルの 7.2. リモートジョブの設定手順に従って設定し動作確認を行う。

テンプレートスクリプトを編集する際には、「# Insert commands here」 から「# Do not modify the followings」の間に 3-②と 3-⑤でメモに控えた内容を追記する。

```
echo "*************************************************"
echo "***       Set user-defined variables        ***"
echo "*************************************************"
set -v
# Insert commands here
MPI_COMMAND="mpirun -n %WM_NUM_PROC% "
BIN_GMX_SERIAL_SINGLE=gmx
BIN_GMX_SERIAL_DOUBLE=gmx_d
BIN_GMX_MPI_SINGLE=gmx_mpi
BIN_GMX_MPI_DOUBLE=gmx_mpi_d

export PATH=$PATH:/usr/lib64/mpich/bin
source $HOME/gromacs-5.0.7/bin/GMXRC

# Do not modify the followings
```

5. Linux サーバ上への ERmod の動作環境設定方法（必要な方のみ）

ER 法による溶媒和自由エネルギー計算を Linux サーバで実行する場合は、本節の内容に従い ERmod を設定する。詳細は ERmod の Build Guide を参照する。

① ermod-0.3.4.tar.gz を http://sourceforge.net/projects/ermod/files/?source=navbar からダウンロードする。

② 以下のようにコンパイルする。

```
$ sudo dnf install fftw-devel
$ sudo dnf --enablerepo=crb install lapack-devel
$ tar zxvf ermod-0.3.4.tar.gz
$ cd ermod-0.3.4
$ ./configure FCFLAGS="-fPIE -fallow-argument-mismatch" CFLAGS=-fPIE
$ make
$ sudo make install
```

以上