

# Linux サーバー版 Gromacs インストールマニュアル

2020/06/26

## 本マニュアルの目的

本マニュアルでは、単一ノードの 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。なお、コンパイラ等のセットアップには `sudo` 権限が必要です。本マニュアルでは、Gromacs を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。複数ノードを使用する並列計算や GPU による計算については、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 TORQUE が使用できる状態であることを想定しています。サーバーホスト名、ユーザ名は以下であると想定しています

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 Gromacs のサイト内の Downloads of outdated releases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](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。<sup>1</sup>



GROMACS 5.0 releases		
<a href="#">gromacs-5.0.7.tar.gz</a>	2015-10-14	2e63e1f5e492415af8bf72191064395b
<a href="#">gromacs-5.0.6.tar.gz</a>	2015-07-26	b0bb547227143e15b3715c0115a2f4af
<a href="#">gromacs-5.0.5.tar.gz</a>	2015-05-13	206884042be656dc06fb73847a9af97f
<a href="#">gromacs-5.0.4.tar.gz</a>	2014-12-15	c177ae5fd6d71e2bec7369bc66cd082e

2. `gromacs-5.0.7.tar.gz` を `ftp` など 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。

Gromacs 5.0.7 のインストールには `cmake` (2.8.8 以降), `make`, 及び GNU compiler (4.7 以降) が必要である。

<sup>1</sup> 本マニュアルでは Gromacs のバージョン 5.0.7 を対象としている。それ以外のバージョンでは手順が異なることがある。

以下のコマンドでそれらのバージョンを確認する。

```
$ cmake --version
```

```
$ make --version
```

```
$ gcc --version
```

それらのソフトがない、またはバージョンが古い場合は、`yum` などを用いてインストール、バージョンアップを行う。例えば `yum` でインストールする場合は以下のように実行する。

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

4. ファイルを解凍する。

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

5. 単精度スレッド並列版の Gromacs をビルド、インストールする。

```
$ cd gromacs-5.0.7
```

```
$ mkdir build
```

```
$ cd build
```

```
$ cmake .. -DGMX_SIMD=AVX_256 -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON -
```

```
DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=ON -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/
```

```
gromacs-5.0.7 -DGMX_GPU=OFF -DGMX_THREAD_MPI=ON -DGMX_DOUBLE=OFF
```

※ 使用する CPU の世代次第では `-DGMX_SIMD=SSE4.1` などと使用するルーチンのグレードを落とす必要がある。

```
 :
-- [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したら、次のコマンドでビルドを開始する。

```
$ 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、次のコマンドで動作確認を行う。

```
$ make check
```

```
:
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
```

上記のように全てのテストをパスしたことを確認したら、インストールを開始する。

```
$ make install
```

6. 倍精度スレッド並列版の Gromacs をビルド、インストールする。

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

```
$ make
```

```
$ make install
```

7. .bashrc に次の行を追加する。

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

8. MPI 並列版をインストールする場合は、gromacs-5.0.7/build の下で以下のように実行する。

(必要な方のみ)

```
$ cmake .. -DGMX_SIMD=AVX_256 -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON -
DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=ON -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/
gromacs-5.0.7 -DGMX_GPU=OFF -DGMX_MPI=ON -DGMX_DOUBLE=OFF
```

```
$ make
```

```
$ make install
```

```
$ cmake .. -DGMX_SIMD=AVX_256 -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON -
DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=ON -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=$HOME/
gromacs-5.0.7 -DGMX_GPU=OFF -DGMX_MPI=ON -DGMX_DOUBLE=ON
```

```
$ make
```

```
$ make install
```

なお、MPI がインストールされていない環境では、予め MPI をインストール必要がある。例えば MPICH をインストールする場合は以下のように実行する。

```
$ sudo yum install mpich-devel
```

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

上記手順で MPICH をインストールした後は、`.bashrc` に次の行を追加する。

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

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

1. [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。
2. 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。
3. 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。

## III. Linux サーバー上への 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 サーバーで実行する場合は、本節の内容に従い ERmod を設定してください。詳細は ERmod の [Build Guide](#) にてご確認下さい。

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 yum install fftw-devel
$ sudo yum install lapack-devel
$ tar zxvf ermod-0.3.4.tar.gz
$ cd ermod-0.3.4
$ ./configure
$ make
$ sudo make install
```

以上