

Tutorial para la instalación del programa Gromacs 4.5.4.

José G. Parra F.

14 de Abril del 2014

En este tutorial nos centraremos en el paquete Gromacs 4.5.4, el cual puede ser bajado de la página web: www.gromacs.org.

Para la instalación de Gromacs, se requieren de un conjunto de programas previamente instalados para la versión linux que tengas presente en tu computador. Las versiones de linux preferenciales para este tutorial son: Ubuntu 12.04, Centos y Debian. En el caso de Ubuntu y Debian, Gromacs puede ser instalados automáticamente por los repositorios de ambos sistemas operativos.

Los programas previamente a instalar son:

- cmake, versión 2.6 en adelante.
- openmotif, versión más actualizada. Este programa es requerido para la instalación de la herramienta ngmx.
- Compilador gcc.
- fftw3. Una versión mayor a 3.3.0.

1. Instalación simple de Gromacs 4.5.4.

Después de instalar los programas necesarios, descomprimir la fuente `gromacs-4.5.4.tar.gz` en la carpeta `/Home` o en `/Documents`. Entrar en la carpeta de Gromacs y proceder con los siguientes comandos en un terminal:

```
$ ./configure
```

```
$ make
```

```
$ make install
```

```
$ make links
```

2. Instalación de Gromacs 4.5.4. usando cmake.

En caso de utilizar cmake, abrir un terminal en la carpeta de gromacs y proceder de la siguiente forma:

```
$ mkdir build
```

```
$ cd build
```

```
$ cmake ../
```

```
$ make install
```

3. Instalación de Gromacs 4.5.4. usando doble precisión.

En este tipo de instalación se desea usar doble precisión para los cálculos en gromacs. Este tipo de instalación corre más lento que precisión simple y a veces no es necesario dependiendo del tipo de cálculo que se requiera hacer. Procedemos de la siguiente forma:

```
$ ./configure --disable-float
```

```
$ make
```

```
$ make install
```

```
$ make links #(este comando no es necesario en algunos casos)#
```

Por lo general, la precisión doble es necesario para:

- Análisis de modos normales, minimización usando gradiente conjugado y el cálculo y diagonalización de la hessiana.
- Cálculo de fuerzas restringidas entre grandes grupos de átomos.
- Conservación de la energía.

3. Instalación de Gromacs 4.5.4. usando mpi.

Inicialmente, debes tener instalado openmpi, mpich o cualquier versión mpi que funcione bien. El procedimiento para instalar es el siguiente:

```
$ ./configure --enable-mpi
```

```
$ make
```

```
$ make install
```

Esto va a generar todos los ejecutables con el nombre dado y una extensión dada. Por ejemplo, mdrun-mpi.

Para cualquier información adicional para la instalación de gromacs, se puede revisar en la pagina web: www.gromacs.org.