



Universidade Estadual de Feira de Santana



Tutorial para Instalação do Gromacs

Feira de Santana - BA

Agosto, 2015

1 Introdução

Este tutorial, criado por Lucas Santana Carneiro, tem o objetivo de ensinar a instalar o Gromacs em plataformas com sistema operacional Centos.

O conteúdo deste tutorial foi criado para fins de pesquisa e pode ser usado livremente desde que citada a fonte. O LaCAD não se responsabiliza pelo uso dessas informações.

2 Passos do tutorial

2.1 Instalar o cmake

Ele será necessário para compilar o Gromacs

2.1.1 Baixando o cmake

```
wget http://www.cmake.org/files/v3.0/cmake-3.0.1.tar.gz
```

2.1.2 Descompactando o arquivo

```
tar -vzxf cmake-3.0.1.tar.gz
```

2.1.3 Entrando na pasta do cmake

```
cd cmake-3.0.1
```

2.1.4 Compilando e instalando o cmake

```
./bootstrap  
make  
make install
```

2.2 Instalando o Gromacs

2.2.1 Baixando o Gromacs

```
wget ftp://ftp.gromacs.org/pub/gromacs/gromacs-5.0.1.tar.gz
```

2.2.2 Descompactando o arquivo

```
tar -xfz gromacs-5.0.1.tar.gz
```

2.2.3 Entrando na pasta do gromacs

```
cd gromacs-5.0.1
```

2.2.4 Criando a pasta de configuração

```
mkdir build  
cd build
```

2.2.5 Compilando e instalando o Gromacs

```
cmake .. -DGMX_MPI=ON -DGMX_GPU=off -DGMX_TREAD_MPI=off  
-DGMX_BUILD_OWN_FFTW=off -DGMX_BUILD_MDRUN_ONLY=OFF  
-DGMX_FFT_LIBRARY=fftpack -DGMX_SIMD=sse2  
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/local_da_instalacao/  
make -j 4  
make check  
sudo make install
```