

## Gromacs 2025.2

### ウェブページ

<http://www.gromacs.org/>

### バージョン

2025.2

### ビルド環境

- GCC 13.3.1 (gcc-toolset-13)
- Open MPI 4.1.8
- [CP2K 2024.3](#) (倍精度 MPI 版のみ)
- cmake 3.31.6
- python 3.12.9 (2025/3/10 作成の conda 環境。libtorch ビルドに利用)
- openblas 0.3.29-lp64

### 必要なファイル

- gromacs-2025.2.tar.gz
- regressiontests-2025.2.tar.gz
- 導入済みの [CP2K 2024.3](#) (倍精度 MPI 版のみ)
- (以下手順中でも一部ファイルを取得)

### ビルド手順

#### LibTorch 2.7.0 (簡易版)

公式配布のバイナリ版が glibc のバージョンの問題でそのままでは動作しなかったため、ビルドしています。

```
[user@ccfep ~]$ module purge
[user@ccfep ~]$ . /apl/conda/20250310/conda_init.sh
(base) [user@ccfep ~]$ module load openblas/0.3.29-lp64
(base) [user@ccfep ~]$ module load gcc-toolset/13
(base) [user@ccfep ~]$ git clone https://github.com/pytorch/pytorch -b v2.7.0
(base) [user@ccfep 2.7.0]$ cd pytorch/
(base) [user@ccfep pytorch]$ mkdir build
(base) [user@ccfep pytorch]$ cd build/
(base) [user@ccfep build]$ cmake .. \
  -GNinja \
  -DBLAS=OpenBLAS \
  -DBUILD_FUNCUTORCH=OFF \
  -DBUILD_PYTHON=False \
  -DBUILD_TEST=True \
  -DCMAKE_BUILD_TYPE=Release \
  -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/apl/libtorch/2.7.0/cpu \
  -DCMAKE_PREFIX_PATH="/lustre/rccs/apl/ap/conda/20250310/lib/python3.12/site-packages;/apl/openblas/0.3.29/lp64" \
  -DPython_EXECUTABLE="/lustre/rccs/apl/ap/conda/20250310/bin/python" \
  -DTORCH_BUILD_VERSION=2.7.0a0+git1341794 \
  -DUSE_CUDA=0 \
  -DUSE_NUMPY=True \
  -DINSTALL_TEST=False
(base) [user@ccfep build]$ ninja -j32
(base) [user@ccfep build]$ ninja -j32 test
(base) [user@ccfep build]$ ninja -j32 install
```

- cmake のオプションは setup.py で使われるものを参考に作成しました
- 以下のテストに失敗しています。
  - 48 - vec\_test\_all\_types\_AVX512 (ILLEGAL) => ハードウェアの関係で仕方ないエラーだと思います。
  - 49 - vec\_test\_all\_types\_AVX2 (Failed) => ? 一部テストに失敗

#### Gromacs 2025.2

```
#!/bin/sh
```

```
VERSION=2025.2
```

```
INSTALL_PREFIX=/apl/gromacs/${VERSION}
```

```
BASEDIR=/home/users/${USER}/Software/Gromacs/${VERSION}/
```

```
GROMACS_TARBALL=${BASEDIR}/gromacs-${VERSION}.tar.gz
```

```
REGRESSION_TARBALL=${BASEDIR}/regressiontests-${VERSION}.tar.gz
```

```
WORKDIR=/gwork/users/${USER}
```

```
REGRESSION_PATH=${WORKDIR}/regressiontests-${VERSION}
```

```
TORCH_DIR=/apl/libtorch/2.7.0/cpu
```

```
PARALLEL=12
```

```
export LANG=C
```

```
#-----
```

```
umask 0022
```

```
module -s purge
```

```
module -s load gcc-toolset/13
```

```
module -s load openmpi/4.1.8/gcc13
```

```
module -s load cmake/3.31.6
```

```
cd ${WORKDIR}
```

```
if [ -d gromacs-${VERSION} ]; then
```

```
mv gromacs-${VERSION} gromacs_erase
```

```
rm -rf gromacs_erase &
```

```
fi
```

```
if [ -d regressiontests-${VERSION} ]; then
```

```
mv regressiontests-${VERSION} regressiontests_erase
```

```
rm -rf regressiontests_erase &
```

```
fi
```

```
tar xzf ${GROMACS_TARBALL}
```

```
tar xzf ${REGRESSION_TARBALL}
```

```
cd gromacs-${VERSION}
```

```
# single precision, no MPI
```

```
mkdir rccs-s
```

```
cd rccs-s
```

```
cmake .. \
```

```
-DCMAKE_PREFIX_PATH="${TORCH_DIR}" \
```

```
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \
```

```
-DCMAKE_VERBOSE_MAKEFILE=ON \
```

```
-DCMAKE_C_COMPILER=gcc \
```

```
-DCMAKE_CXX_COMPILER=g++ \
```

```
-DGMX_MPI=OFF \
```

```
-DGMX_GPU=OFF \
```

```
-DGMX_DOUBLE=OFF \
```

```
-DGMX_THREAD_MPI=ON \
```

```
-DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON \
```

```
-DGMX_NNPOT=TORCH \
```

```
-DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=OFF \
```

```
-DREGRESSIONTEST_PATH=${REGRESSION_PATH}
```

```
make -j${PARALLEL} && make check && make install
```

```
cd ..
```

```
# double precision, no MPI
```

```
mkdir rccs-d
```

```
cd rccs-d
```

```
cmake .. \
```

```
-DCMAKE_PREFIX_PATH="${TORCH_DIR}" \
```

```
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \
```

```
-DCMAKE_VERBOSE_MAKEFILE=ON \
```

```
-DCMAKE_C_COMPILER=gcc \
-DCMAKE_CXX_COMPILER=g++ \
-DGMX_MPI=OFF \
-DGMX_GPU=OFF \
-DGMX_DOUBLE=ON \
-DGMX_THREAD_MPI=ON \
-DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON \
-DGMX_NNPOT=TORCH \
-DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=OFF \
-DREGRESSIONTEST_PATH=${REGRESSION_PATH}
make -j${PARALLEL} && make check
make install
cd ..
```

```
# single precision, with MPI
mkdir rccs-mpi-s
cd rccs-mpi-s
cmake .. \
-DMAKE_PREFIX_PATH="${TORCH_DIR}" \
-DMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \
-DMAKE_VERBOSE_MAKEFILE=ON \
-DMAKE_C_COMPILER=mpicc \
-DMAKE_CXX_COMPILER=mpicxx \
-DGMX_MPI=ON \
-DGMX_GPU=OFF \
-DGMX_DOUBLE=OFF \
-DGMX_THREAD_MPI=OFF \
-DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON \
-DGMX_USE_PLUMED=ON \
-DGMX_NNPOT=TORCH \
-DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=OFF \
-DREGRESSIONTEST_PATH=${REGRESSION_PATH}
make -j${PARALLEL} && make check && make install
cd ..
```

```
# double precision, with MPI
mkdir rccs-mpi-d
cd rccs-mpi-d
cmake .. \
-DMAKE_PREFIX_PATH="${TORCH_DIR}" \
-DMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \
-DMAKE_VERBOSE_MAKEFILE=ON \
-DMAKE_C_COMPILER=mpicc \
-DMAKE_CXX_COMPILER=mpicxx \
-DGMX_MPI=ON \
-DGMX_GPU=OFF \
-DGMX_DOUBLE=ON \
-DGMX_THREAD_MPI=OFF \
-DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON \
-DGMX_USE_PLUMED=ON \
-DGMX_NNPOT=TORCH \
-DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=OFF \
-DREGRESSIONTEST_PATH=${REGRESSION_PATH}
make -j${PARALLEL} && make check && make install
cd ..
```

```
# double precision, with MPI + CP2K
CP2KROOT=/apl/cp2k/2024.3
CP2KROOT_TC=${CP2KROOT}/tools/toolchain

mkdir rccs-mpi-d-cp2k
cd rccs-mpi-d-cp2k
cmake .. \
-DMAKE_PREFIX_PATH="${CP2KROOT_TC}/install/fftw-3.3.10" \
-DGMX_DEFAULT_SUFFIX=OFF \
```

```
-DGMX_BINARY_SUFFIX=_mpi_d_cp2k \
-DGMX_LIBS_SUFFIX=_mpi_d_cp2k \
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \
-DCMAKE_VERBOSE_MAKEFILE=ON \
-DCMAKE_C_COMPILER=mpicc \
-DCMAKE_CXX_COMPILER=mpicxx \
-DGMX_MPI=ON \
-DGMX_GPU=OFF \
-DGMX_DOUBLE=ON \
-DGMX_THREAD_MPI=OFF \
-DGMX_CP2K=ON \
-DBUILD_SHARED_LIBS=OFF \
-DGMXAPI=OFF \
-DGMX_INSTALL_NBLIB_API=OFF \
-DCP2K_DIR=${CP2KROOT}/lib/rccs/psmp \
-DGMX_FFT_LIBRARY=fftw3 \
-DGMX_EXTERNAL_BLAS=ON \
-DGMX_BLAS_USER=${CP2KROOT_TC}/install/openblas-0.3.27/lib/libopenblas.so \
-DGMX_EXTERNAL_LAPACK=ON \
-DGMX_LAPACK_USER=${CP2KROOT_TC}/install/openblas-0.3.27/lib/libopenblas.so \
-DGMX_USE_PLUMED=ON \
-DGMX_NNPOT=OFF \
-DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=OFF \
-DREGRESSIONTEST_PATH=${REGRESSION_PATH}
make -j${PARALLEL} && make check
make install
cd ..
```

## テスト(Gromacs)

テストは全て pass しています。

## メモ

- libtorch 2.7.0 と合わせてビルドしているため、Neural Network Potential が利用可能です。
  - ただし、公式ドキュメントによると、利用するモデルも pytorch 2.7.0 で作成する必要があるとのこと。pytorch の別バージョンを使う場合には上記の手順を参考にご自身でビルドする必要があるようです。
  - [GPU 有効版についてはこちらをご確認ください。](#)
- plumed も有効になっています。
  - RCCS 提供の gromacs/2025.2 の module では PLUMED\_KERNEL 環境変数に plumed 2.9.3 の libplumedKernel.so が指定されています。
- CP2K と libtorch を同時に有効にできなかったため、倍精度 MPI のみ 2 つのバージョンを用意しています。
  - (cp2k 2024.3 の toolchain に含まれる libtorch 1.x は gromacs 側で利用できないためです。)
  - cp2k 有効のものは gmx\_mpi\_d\_cp2k のように名前に cp2k が入っているものです。