

Gromacs 2025.4 with CUDA support

ウェブページ

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

バージョン

2025.4

ビルド環境

- GCC 13.3.1 (gcc-toolset-13)
- CUDA 12.8 Update 1
- Open MPI 4.1.8
- cmake 3.31.6
- openblas 0.3.29-lp64
- cuDNN 9.10.1
- cuDSS 0.5.0
- cuSPARSElt 0.7.1

必要なファイル

- gromacs-2025.4.tar.gz
- regressiontests-2025.4.tar.gz
- (以下手順中でも一部ファイルを取得)

ビルド手順

ccgpu にてビルド

```
#!/bin/sh

VERSION=2025.4
INSTALL_PREFIX=/apl/gromacs/${VERSION}-CUDA

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}

FFTW_VER=3.3.10
FFTW_PATH=${BASEDIR}/fftw-${FFTW_VER}.tar.gz
```

PARALLEL=12

export LANG=C

#-----

umask 0022

module -s purge

module -s load gcc-toolset/13

module -s load openmpi/4.1.8/gcc13 # not CUDA-aware Open MPI!

module -s load cuda/12.8u1

module -s load cmake/3.31.6

module -s load openblas/0.3.29-lp64

module -s load cudnn/9.10.1-cuda12

module -s load cudss/0.5.0.16-cuda12

module -s load cusparselt/0.7.1

TORCH_DIR=/apl/libtorch/2.7.0/cu128

OPENBLAS_DIR=/apl/openblas/0.3.29/lp64

export CUDNN_ROOT_DIR=/apl/cudnn/9.10.1/cudnn-linux-x86_64-9.10.1.4_cuda12-archive

export CUDSS_ROOT_DIR=/apl/cudss/0.5.0/libcudss-linux-x86_64-0.5.0.16_cuda12-archive

export CUSPARSELT_ROOT_DIR=/apl/cusparselt/0.7.1/libcusparse_lt-linux-x86_64-0.7.1.0-archive

#export CUDA_VISIBLE_DEVICES=0,1

unset OMP_NUM_THREADS

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};\${OPENBLAS_DIR}" **

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

**-DCMAKE_VERBOSE_MAKEFILE=ON **

**-DCMAKE_C_COMPILER=gcc **

**-DCMAKE_CXX_COMPILER=g++ **

```
-DGMX_MPI=OFF \
-DGMX_GPU=CUDA \
-DGMX_DOUBLE=OFF \
-DGMX_THREAD_MPI=ON \
-DGMX_USE_CUFFTMP=OFF \
-DGMX_NNPOT=TORCH \
-DCAFFE2_USE_CUDNN=ON \
-DCAFFE2_USE_CUSPARSELT=ON \
-DUSE_CUDSS=ON \
-DPython_EXECUTABLE=/usr/bin/python3 \
-DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON \
-DGMX_BUILD_OWN_FFTW_URL=${FFTW_PATH} \
-DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=OFF \
-DREGRESSIONTEST_PATH=${REGRESSION_PATH}
```

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

single precision, with MPI

```
mkdir rccs-mpi-s
```

```
cd rccs-mpi-s
```

```
cmake .. \
```

```
-DCMAKE_PREFIX_PATH="${TORCH_DIR};${OPENBLAS_DIR}" \
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \
-DCMAKE_VERBOSE_MAKEFILE=ON \
-DCMAKE_C_COMPILER=mpicc \
-DCMAKE_CXX_COMPILER=mpicxx \
-DGMX_MPI=ON \
-DGMX_GPU=CUDA \
-DGMX_DOUBLE=OFF \
-DGMX_THREAD_MPI=OFF \
-DGMX_USE_CUFFTMP=OFF \
-DGMX_NNPOT=TORCH \
-DCAFFE2_USE_CUDNN=ON \
-DCAFFE2_USE_CUSPARSELT=ON \
-DUSE_CUDSS=ON \
-DPython_EXECUTABLE=/usr/bin/python3 \
-DGMX_USE_PLUMED=ON \
-DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON \
-DGMX_BUILD_OWN_FFTW_URL=${FFTW_PATH} \
-DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=OFF \
-DREGRESSIONTEST_PATH=${REGRESSION_PATH}
```

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

テスト

全てパス

メモ

- 基本的に 2025.2 と同じ手順でビルドしています。
 - ただし、CUDA-aware MPI を使うと MPI 版(gmx_mpi)が動作しないため、CUDA-aware でない Open MPI を一時的に利用しています。
 - システム側の更新(ネットワーク関連もしくは GPU ドライバ)が原因だと思われますが、現時点では原因を特定できていません。Gromacs のコード変更が原因ではないと思われます。
 - 既存の 2025.2 CUDA 版でも gmx_mpi が正常に動作しないことが確認されています。(当然のことながらインストール時点ではこのような問題)
 - thread MPI 版については 2025.2 と同じ環境でのビルドになります。