

Instalación de Gromacs, VMD, Avogadro y graficador en Linux

INSTALACIÓN DE GROMACS

Durante toda la instalación se debe contar con conexión a Internet y contar con clave de súper-usuario; el procedimiento consiste de dos partes:

FORMA 1

Se debe poner en la terminal para ubuntu

```
$sudo apt-get install gromacs
```

para fedora

```
$yum -y install gromacs
```

FORMA 2

PARTE 1.

- Instalar/actualizar Ubuntu (se recomienda la versión más actual):

```
sudo apt-get update
```

```
sudo apt-get upgrade
```

```
sudo update-manager -d
```

- Instalar/actualizar gfortran (Compilador Fortran):

```
sudo apt-get install gfortran
```

- Instalar/actualizar g++ (Compilador C++):

```
sudo apt-get install g++
```

- Instalar/actualizar gcc (Compilador C):

```
sudo apt-get install gcc
```

- Instalar/actualizar cmake

```
sudo apt-get install cmake
```

Al terminar, se debe re-inicializar el equipo, para que se apliquen las actualizaciones.

PARTE 2.

- Descargar la versión más reciente de Gromacs del sitio <http://www.gromacs.org/Downloads>.

- Abrir una terminal e ir a la carpeta donde se aloja el archivo descargado (en este ejemplo es gromacs-5.1.2.tar.gz). Lo más probable es que se encuentre en la carpeta “Descargas” (o “Downloads”); es conveniente crear una carpeta “lib” en el directorio del súper-usuario y trasladar el archivo a “lib”, para trabajar desde ahí.
- Ejecutar, en el orden indicado, cada una de las siguientes instrucciones:

```
tar xzf gromacs-5.1.2.tar.gz
cd gromacs-5.1.2
mkdir build
cd build
cmake .. -DGMX_BUILD_OWN_FFTW=ON -DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=ON
make
make check
sudo make install
source /usr/local/gromacs/bin/GMXRC
```

- Agregar la última línea al archivo .bashrc en el directorio default del usuario (o ejecutarla al iniciar Gromacs).
- NOTA: la compilación del paquete (con “make”) tomará alrededor de una hora

INSTALACIÓN DE VMD

Para instalar **VMD en LINUX** es necesario bajar la versión de VMD.tar que viene en la pagina web

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

- Ir a Software --> VMD --> Download Elegir la versión de acuerdo a su arquitectura, por ejemplo: [LINUXOpenGL](#), [CUDA](#)(Linux (32-bit,

RHEL4 or later) with CUDA)

- Se requiere registrarse en este momento y aceptar los términos de la licencia
- La descarga del archivo vmd-1.9.1.bin.LINUX.opengl.tar.gz iniciara
- Descomprimir la carpeta \$ tar xvf vmd-1.9.1.bin.LINUX.opengl.tar.gz
- Se creara la carpeta vmd-1.9.1

- Pasarse a la carpeta vmd-1.9 y ejecutar comandos (probado en ubuntu) `$cd vmd-1.9` `./configure LINUX` (Si la arquitectura es de 64 bits poner `./configure LINUXAMD64`) `$cd src/` `$sudo make install` (para usar el `make install` hay que ser usuario root por lo que le pedirá la contraseña). En fedora el paso anterior podría requerir lo siguiente `$cd vmd-1.9` `./configure LINUX` `$cd src/` `$su -` (dar password de root) `$echo 'usuario ALL=(ALL) ALL' >> /etc/sudoers` (donde usuario es el nombre de usuario) `$exit` `$sudo make install` (dar password de usuario)

INSTALACIÓN DE AVOGADRO

Escribir en terminal

```
$ sudo apt-get install avogadro
```

INSTALACIÓN DE GRAFICADOR

```
$ sudo apt-get install grace
```