



# Amber12 ユーザーマニュアル



# 目次

1	Amber12 について .....	2
2	Amber12 インストール概要 .....	3
3	Amber12 コマンド .....	4
4	Amber12 実行例 .....	6
4.1	シリアル(1CPU コア)の実行例 .....	6
4.2	MPI 並列の実行例 .....	7
5	既知の問題点 .....	8
付録 A	.....	9
A.1	HPC システムズ お問い合わせ先 .....	9

# 1 Amber12 について

---

Amber12はカリフォルニア大学等のグループが開発する分子動力学シミュレーションプログラムのパッケージです。

Amber12を使用するには開発元との間でライセンス契約を行う必要があります。契約の内容は以下 URL をご参照下さい。

<http://ambermd.org/amber12.license.html>

Amber12のパッケージは Amber12 のサイトからダウンロードして入手します。パッケージの入手方法等については契約時に開発元より Eメール等で案内が届きますので、そちらをご参照下さい。当社では Amber12 のパッケージをお借りして計算機へインストールを行っています。

Amber12の最新版である Amber12 のインストールをする際、AmberTools13 のパッケージが必要です。そのため AmberTools13 も合わせてインストールをしております。AmberTools13 は Amber12 のサイトでユーザー情報を登録することで無償使用することができます。AmberTools13 もお客様からパッケージをお借りしてインストールをしています。

本マニュアルは Amber12 のインストール概要とジョブの実行方法等をご案内します。Amber12の詳細については Amber12 の公式サイトをご覧ください。

## 2 Amber12 インストール概要

Amber12 と AmberTools13 は以下ディレクトリにインストールをしています。

パッケージ	ディレクトリ
Amber12	/usr/local/amber12
AmberTools13	/usr/local/amber12/AmberTools

Amber12 と AmberTools13 はソースコードで配布されています。Amber12 のインストールの際は以下コンパイラを使用してビルドを行っています。

パッケージ	ディレクトリ
Intel Composer XE 2013 (13.1)	/opt/intel/composer_xe_2013
Intel Math Kernel Library	/opt/intel/mkl
OpenMPI	/usr/local/openmpi-intel131

Amber12 の環境設定は各ユーザーのホームディレクトリのファイルで行われています。tcsh をご使用の場合は `~/.cshrc`、bash をご使用の場合は `~/.bashrc` ファイル内で `/home/.common` 以下に用意した Amber12 の環境設定スクリプトを実行します。以下の環境変数をセットしています。

- AMBERHOME : /usr/local/amber12
- PATH : /usr/local/amber12/bin を追加

## 3 Amber12 コマンド

---

Amber12のコマンドについては Amber12 公式サイト の以下 URL にマニュアルがありますので、詳しくはそちらをご覧ください。

<http://ambermd.org/#amber12>

以下は主に使用するコマンドと、その説明について Amber12 公式サイト より抜粋したものです。

- **sander**

This allows for NMR refinement based on NOE-derived distance restraints, torsion angle restraints, and penalty functions based on chemical shifts and NOESY volumes. Sander is also the "main" program used for molecular dynamics simulations, and is also used for replica-exchange, thermodynamic integration, and potential of mean force (PMF) calculations. Sander also includes QM/MM capability.

- **pmemd**

This is an extensively-modified version (originally by Bob Duke) of the sander program, optimized for periodic, PME simulations, and for GB simulations. It is faster than sander and scales better on parallel machines. Additionally, starting with version 11, it includes NVIDIA GPU acceleration. In the code model we are now following, sander is the vehicle to explore new features, and pmemd is a "production" code that implements sander's most-used features in a well-tested fashion that performs well in high-performance environments.

- **nab**

Originally named as "nucleic acid builder", NAB is a specialized language for writing programs that manipulate molecules and carry out molecular mechanics or distance-geometry based modeling. NAB provides an interface to Poisson-Boltzmann and RISM integral-equation solvent models. The "amberlite" package uses NAB to study protein-ligand interaction energetics.

- **xleap**

LEaP is an X-windows-based program that provides for basic model building and Amber coordinate and parameter/topology input file creation. It includes a molecular editor which allows for building residues and manipulating molecules.

- **antecamber**

This program suite automates the process of developing force field descriptors for most organic molecules. It starts with structures (usually in PDB format), and generates files that can be read into LEaP for use in molecular modeling. The force field description that is generated is designed to be compatible with the usual Amber force fields for proteins and nucleic acids.

- **ptraj , cpptraj**

These are used to analyze MD trajectories, computing a variety of things, like RMS deviation from a reference structure, hydrogen bonding analysis, time-correlation functions, diffusional behavior, and so on.

- **mm\_pbsa , mmpbsa.py**

These are scripts that automate post-processing of MD trajectories, to analyze energetics using continuum solvent ideas. It can be used to break energies energies into "pieces" arising from different residues, and to estimate free energy differences between conformational basins.

## 4 Amber12 実行例

### 4.1 シリアル(1CPU コア)の実行例

sander の実行例

```
sander -O -i mdin -o mdout -p prmtop -c inpcrd -r restrt
```

pmemd の実行例

```
pmemd -O -i mdin -o mdout -p prmtop -c inpcrd -r restrt
```

sander・pmemd の実行ファイルは以下オプションがあります。

- -O 出力ファイルを全て上書き
- -i sander のオプションを記述した入力ファイル名を指定。デフォルトは "mdin"
- -o 出力ファイル名を指定。デフォルトは、"mdout"
- -p パラメーター／トポロジーファイル名を指定。デフォルトは "prmtop"
- -c 計算に使用する出発座標ファイル名の指定。デフォルトは "inpcrd"
- -r 構造最適化あるいは MD 計算の最終座標ファイル名を指定。デフォルトは "restrt"
- -ref 座標の拘束オプションが入力ファイル中で指定されている場合の参照座標ファイル名を指定。デフォルトは "refc"
- -x 分子動力学計算を行った場合のトラジェクトリーファイル名を指定。デフォルトは "mdcrd"
- -v 分子動力学計算を行った場合のベロシティファイル名を指定。デフォルトは "mdvel"
- -e 分子動力学計算を行った場合のエネルギーの要約ファイル名を指定。デフォルトは "mden"
- -inf 構造最適化あるいは MD 計算の各ステップが出力ファイルに書き込まれる毎に、要約が出力されるファイル名を指定。シミュレーションの進行状況をチェックするのに使用。デフォルトは "mdinfo"

## 4.2 MPI 並列の実行例

実行ファイルに .MPI の拡張子があるものは MPI での並列実行が可能です。-np 以降に並列数を指定します。以下は 16CPU コアでの例です。MPI 並列での実行時のオプションはシリアルと同様です。

### sander.MPI の実行例

```
mpirun -np 16 $AMBERHOME/bin/sander.MPI -O -i mdin -o mdout -p prmtop -c inpcrd  
-r restrt
```

### pmemd.MPI の実行例

```
mpirun -np 16 $AMBERHOME/bin/pmemd.MPI -O -i mdin -o mdout -p prmtop -c inpcrd -r  
restrt
```

※ mpirun 以降の実行ファイルは絶対パスで指定する必要があります。実行ファイルがあるディレクトリにパスが通っていても同様です。



## 5 既知の問題点

---

2013年10月31日現在、Amber12・AmberTools13で明らかになっている問題点はありません。

# 付録A

---

## A.1 HPC システムズ お問い合わせ先



弊社ホームページ [http://www.hpc.co.jp/support\\_index.html](http://www.hpc.co.jp/support_index.html)

サポート案内やお問い合わせの多い内容など様々な情報を掲載しております。  
是非ご活用ください。

### HPC システムズ株式会社

〒108-0022 東京都港区海岸 3-9-15 LOOP-X 8 階

### HPC 事業部



【営業】 03-5446-5531    【サポート】 03-5446-5532

お電話によるサポート受付は祝日、弊社指定休日を除く月曜日から金曜日の 9:30～17:30  
とさせていただきます。



【FAX】 03-5446-5550



【電子メール】 [hpcs\\_support@hpc.co.jp](mailto:hpcs_support@hpc.co.jp)