



Gromacs ユーザーマニュアル



目次

1	Gromacs について	2
2	Gromacs インストール概要	3
3	Gromacs 実行例	5
4	既知の問題点	7
A.1	HPC システムズ お問い合わせ先	8

1 Gromacs について

Gromacs は元々グローニンゲン大学で開発された分子動力学シミュレーションのソフトウェアパッケージです。主なターゲットは生体分子を意識していますが、GROMOS 力場をサポートしている為、ガラスや液晶からポリマーや結晶など高分子材料にも適用事例が増えてきています。現在は、インターネット上で、世界中の大学や、技術者によって、開発が進められています。

豊富な force field が使用可能な点も特徴で、2018.8 でサポートされている force field は、以下の通りです。

- AMBER
 - AMBER94
 - AMBER96
 - AMBER99
 - AMBER99SB
 - AMBER99SB-ILDN
 - AMBER03
 - AMBERGS
- CHARMM
 - CHARMM27
- GROMOS
- OPLS
 - OPLS-AA / M

Gromacs は LGPL 2.1 で配布されているフリーソフトウェアです。以下サイトからパッケージをダウンロードできます。

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

本マニュアルでは、計算機にインストールされている Gromacs の概要と、Gromacs での計算の実行方法をご案内します。

2 Gromacs インストール概要

本項では当社が行いました Gromacs のインストールについて概説します。Gromacs のメジャーバージョンはリリースされた西暦年で、fix などの update が出る毎にソースコードが配布されます。Version 2018 の update 8 である 2018.8 を以下の表で示したディレクトリにインストールしています。

パッケージ	ディレクトリ
Gromacs 2018.8	/usr/local/gromacs/gromacs-2018.8
バイナリ	/usr/local/gromacs/gromacs-2018.8/bin
Force fields data	/usr/local/gromacs/gromacs-2018.8/share/gromacs/top
Online manual	/usr/local/gromacs/gromacs-2018.8/share/gromacs/html
ソースコード	/usr/local/gromacs/src

Gromacs はソースコードで配布されています。以下のコンパイラを使用してビルドしていません。

パッケージ	ディレクトリ
Intel Parallel Studio XE 2019 Composer Edition (19.0.5)	/opt/intel/psxe2019/ parallel_studio_xe_2019.5.281
Intel Math Kernel Library	/opt/intel/psxe2019/mkl
Intel MPI 2018 update 4	/opt/intel/psxe2018/impi/2018.4.274

数値精度はビルド時に、公式テストである regressiontests で試験を実施し、問題が無い事を確認してあります。

Gromacs を使用するための環境設定はインストールの際に、設定してあります。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 gromacs の環境設定スクリプトを実行します。

その設定は、/usr/local/gromacs/gromacs-2018.8/bin にある GMXRC.bash (bash 用) や GMXRC.csh (tcsh 用) を読み込む形となっています。スクリプト等を作成して実行する際に gromacs の設定が必要な場合など、ご活用下さい。

スクリプト内では以下の内容を実行しています。

- tcsh の場合

```
source _/usr/local/gromacs/gromacs-2018.8/bin/GMXRC.csh
```

- bash の場合

```
._/usr/local/gromacs/gromacs-2018.8/bin/GMXRC.sh
```

3 Gromacs 実行例

Gromacs の実行ファイルは、ver. 5 以降、`gmx` に統合されました。`gmx` はコンパイル時に浮動小数点数が単精度または倍精度、MPI を使用または未使用を指定する必要があります。そこで当社では全てのバイナリモデルで実行可能なように、名前を変えて複数のモデルのバイナリをインストールしてあります。

バイナリの末尾が「`_d`」のものが倍精度浮動小数点数のバイナリです。また、「`_mpi`」は MPI で実行可能なバイナリです。

- `gmx` : 単精度浮動小数点数のシリアル版
- `gmx_mpi` : 単精度浮動小数点数の MPI 版
- `gmx_d` : 倍精度浮動小数点数のシリアル版
- `gmx_mpi_d` : 倍精度浮動小数点数の MPI 版

Gromacs のコマンドは、この `gmx` にオプションを続ける形で実行します。

help を呼び出す方法

```
$ gmx -h
```

pdb2gmx の実行例

```
$ gmx pdb2gmx -f job.pdb -o conf.gro -p topol.top -g logfile
```

mdrun の実行例

```
$ gmx mdrun -nice 4 -s topol.tpr -o job_md_output -c conf.gro -g logfile
```

gmx_mpi での mdrun の実行例

```
$ mpirun -np 4 /usr/local/gromacs-2018.8/bin/gmx_mpi_mdrun -s topol.tpr -o job_md_output -c conf.gro -g logfile
```

※ `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。

Gromacs の使用方法の詳細は以下をご確認下さい。

- Gromacs のディレクトリの `share/gromacs/` にユーザーマニュアル `manual-2018.8.pdf` をインストールしてあります。
- Gromacs のディレクトリの `share/gromacs/html/index.html` に Web ブラウザで確認できるマニュアルがあります。
- Gromacs ホームページ (<http://www.gromacs.org>) にドキュメントが公開されています。

4 既知の問題点

2020年4月14日現在、Gromacs 2018で明らかになっている問題点はありません。

A 付録

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

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