



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	4
3.1	GROMACS 実行環境の設定	4
3.2	GROMACS のプログラム名と実行コマンド例	7
4	既知の問題点	8
A.1	HPC システムズ お問い合わせ先	9

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、2023.1 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
 - CHARMM36¹
- 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。

¹ CHARMM36 を使用するには、[MacKerell lab website](#) よりファイルをダウンロードし、mdp ファイルの修正が必要です。詳細は GROMACS ドキュメントの 3.6.2 節を参照してください。

2 GROMACS インストール概要

本項では弊社が行いました 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 2023 の update 1 である 2023.1 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 2023.1	/usr/local/gromacs/gromacs-2023.1
バイナリ	/usr/local/gromacs/gromacs-2023.1/bin
Force fields data	/usr/local/gromacs/gromacs-2023.1/share/gromacs/top
ソースコード	/usr/local/gromacs/gromacs-2023.1/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す。

パッケージ	ディレクトリ
Intel oneAPI Base & HPC Toolkit Version 2023.2.0 + Compiler patch 1	/opt/intel/oneapi/compiler/2023.2.1
Intel Math Kernel Library	/opt/intel/oneapi/mkl/2023.2.0
Intel MPI 2021 update 10	/opt/intel/oneapi/mpi/2021.10.0

数値精度はビルド時の make check、バイナリ作成後の公式テストである regressiontests という 2 種類の試験を実施し、双方ともに問題が無い事を確認してあります。

3 GROMACS 実行例

3.1 GROMACS 実行環境の設定

弊社出荷の RHEL/AlmaLinux 8 系 OS においては、GROMACS の実行環境の設定を、GROMACS を実行したいタイミングで、[Environment Module](#) と呼ばれる環境設定ユーティリティを用いて実施ください。Environment Module ではアプリケーション等のソフトウェア部品の環境設定を「モジュール」と呼び、`module load`・`module unload` というコマンドによりモジュールの有効化・無効化を実施できます。モジュールが有効化されているとき、そのアプリケーション等は、PATH 等の環境設定が済んで実行可能な状態になっています。

Environment Module で GROMACS を使用可能とするモジュール定義ファイルは次の場所に設置してあります。

```
/home/.common/modulefiles/oneAPI/oneAPI バージョン/GROMACS/GROMACS バージョン
```

以下では Environment Module を用いた GROMACS 実行環境設定の方法を示します。

(1) 使用できるモジュールの一覧表示 : `module avail`

`module avail` コマンドにより、使用可能なモジュールの一覧を表示します。次は GROMACS 2023.1 の場合の例です。

```
$ module_ avail
----- /home/.common/modulefiles/oneAPI/2023.2.0 -----
GROMACS/2023.1
(後略)
```

赤文字で示したように、使用可能なモジュール（ソフトウェア名/バージョン）が表示されます。

(2) モジュールの有効化・無効化 : `module load` ・ `module unload`

モジュールを有効にするコマンドは `module load` です。その後ろにモジュール名を付けて実行します。例えば GROMACS 2023.1 のモジュールを有効化する場合、具体的なコマンドは次となります。

```
$ module load GROMACS/2023.1
```

逆に、有効化したモジュールを無効化するコマンドは `module unload` です。同様に、後ろにモジュール名を付けて実行します。

```
$ module unload GROMACS/2023.1
```

`module unload` は、有効化したモジュールによる環境設定が別の作業に悪影響を及ぼす際などに使用ください。有効化したモジュールによる環境設定が特に悪影響を及ぼしていない場合には、わざわざ無効化する必要はありません。

正常にモジュールを読み込めたかどうかについては、次の `module list` コマンドで確認できます。

(3) 有効になっているモジュールの表示 : `module list`

`module list` により、Environment Module で有効化されているモジュールの一覧を表示します。

```
$ module list
```

例えば GROMACS/2023.1 のモジュールが有効になっている場合、次のように Currently Loaded Modulefiles: 行より下に表示されます。

```
# module list
Currently Loaded Modulefiles:
 1) tbb/2021.10.0           4) mkl/2023.2.0
 2) compiler-rt/2023.2.1  5) mpi/2021.10.0
 3) compiler/2023.2.1     6) GROMACS/2023.1
```

(4) ユーザーシェルログイン時にモジュールを自動的に有効化する方法

ユーザーログイン時に、自動的にモジュールの有効化を行いたい場合、ユーザーのシェル環境設定ファイルに `module load` コマンドを追記してください。

GROMACS 2023.1 の場合の具体的な修正例を次に示します。

- ☞ Bash をお使いの場合
ホームディレクトリの `.bashrc` の最終行に以下の追記を行います。

- ☞ Tcsh をお使いの場合
ホームディレクトリの `.cshrc` の最終行に以下の追記を行います。

```
# ----- 任意のコメント -----  
# module load GROMACS/2023.1
```

モジュールの有効化が他のアプリケーションに悪影響を及ぼすようなケースも存在いたしますので、ログイン時のシェル環境における自動有効化については、有効時の影響に十分注意した上で行うようお願いいたします。

3.2 GROMACS のプログラム名と実行コマンド例

GROMACS のプログラムである 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選択して調製します。そこで弊社では、それぞれの条件でコンパイルして出来上がったプログラムを、名前を変えて同居させています。

プログラム名の末尾が「_d」のものが倍精度浮動小数点数のプログラムです。また「_mpi」が付いたものが MPI で実行可能なプログラムです。

- ・ 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、これらプログラム名にオプションを続ける形で実行します。

GROMACS のヘルプを呼び出すには次のコマンドを実行ください。

```
$ gmx_-h
```

以下に挙げる pdb2gmx や mdrun のヘルプは以下のコマンドで参照できます。

```
$ gmx_pdb2gmx_-h
```

```
$ gmx_mdrun_-h
```

pdb2gmx は次のように実行します。

```
$ gmx_pdb2gmx_-f_job.pdb_-o_conf.gro_-p_topol.top_-g_logfile
```

mdrun は次のように実行します。

```
$ gmx_mdrun_-nice_4_-s_topol.tpr_-o_job_md_output_-c_conf.gro_-g_logfile
```

gmx_mpi を用いて mdrun を並列実行するには次のようにします。-np に続く数字が並列数です。

```
$ mpirun_-np_4_gmx_mpi_mdrun_-s_topol.tpr_-o_job_md_output_-c_conf.gro_-g_logfile
```

この他、GROMACS の使用方法の詳細については以下をご参照下さい。

- /usr/local/gromacs/gromacs-2023.1/src に、公式 HP よりユーザーマニュアル manual-2023.1.pdf をダウンロードし、置いてあります。
- GROMACS のホームページ (<https://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

2024年2月9日現在、GROMACS 2023.1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 <https://www.hpc.co.jp/support/>

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