Windows 版 NAMD インストールマニュアル

2020/01/15

1. NAMD のインストール

① 以下のサイトにアクセスし、「Win64」のリンクをクリックする。

http://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=NAMD

32bit 環境の場合は Win32 をクリックする。

Overview Download NAMD: **Publications** NAMD is a parallel, object-oriented molecular dynamics code designed for high-performance simulation of lar Research package VMD. Visit the NAMD website for complete information and documentation. Software Selecting an archive below will lead to a user registration and login page. Your download will continue after yo ► NAMD ► VMD Version Nightly Build (2017-06-14) Platforms: GPU Computing • Linux-x86_64-multicore (64-bit Intel/AMD single node) Lattice Microbes Linux-x86_64-multicore-CUDA (NVIDIA CUDA acceleration) Atomic Resolution Brownian Dynamics Source Code ► MDFF Version 2.12 (2016-12-22) Platforms: QwikMD Other · Linux-x86_64-multicore (64-bit Intel/AMD single node) Linux-x86_64 (64-bit Intel/AMD with ethernet) Outreach Linux-x86_64-TCP (TCP may be better on gigabit) Linux-x86_64-ibverbs (InfiniBand via OpenFabrics OFED, not for Omni-Path, no MPI needed) Linux-x86_64-ibverbs-smp (InfiniBand plus shared memory, no MPI needed) Linux-x86_64-multicore-CUDA (NVIDIA CUDA acceleration) Linux-x86_64-ibverbs-smp-CUDA (NVIDIA CUDA with InfiniBand) Linux-x86_64-netlrts (Multi-copy algorithms) Linux-x86_64-verbs (Multi-copy algorithms on InfiniBand) Linux-x86 64-verbs-smp (Multi-copy algorithms on InfiniBand) Linux-x86 64-verbs-smp-CUDA (Multi-copy algorithms on InfiniBand) Linux-KNL-multicore (Intel Xeon Phi KNL processor single node)

② Registraion/Login 画面で「Username」、「Password」に適当に決めたユーザ名とパスワードを 入力し、「Continue with registration or download」をクリックする。

elerati

eleration)

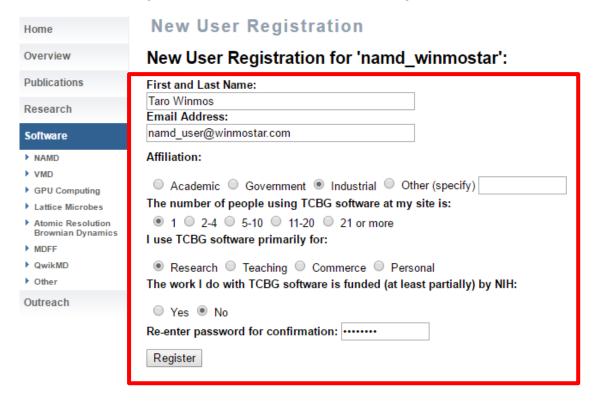
MacOSX-x86_64 (Mac OS X for 64-bit Intel processors)

MacOSX-x86_64-CUDA (NVIDIA CUDA acc

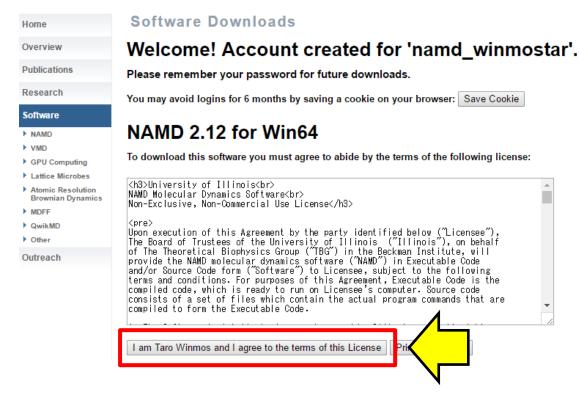
Win32 (Windows XP, etc.)
Win64 (Windows 7, 8, 10, etc.)



③ New user Registration 画面で、必要な情報を入力して、「Register」をクリックする。



④ Software Download 画面で「I am *** and I agree to the terms of this License」をクリックする。zip ファイルのダウンロードが始まる。



⑤ zip ファイルを解凍する。解凍したフォルダ(例えば NAMD_2.12_Win64·multicore)を適当なフォルダ(例えば C:¥)に移動する。

以上