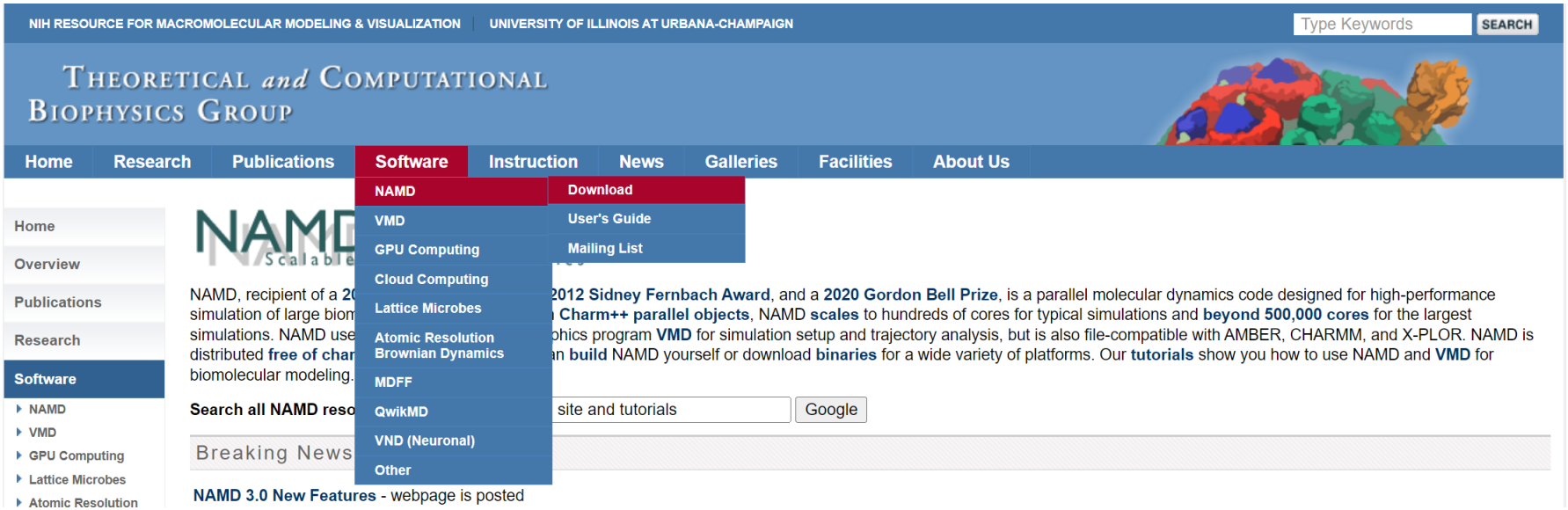
NAMDのインストール（1）

1. https://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/にアクセス
2. 「Software」→「NAMD」→「Download」を選ぶ



NAMDのインストール（2）

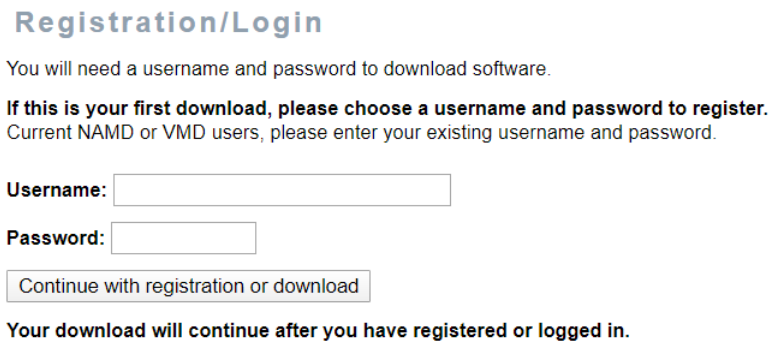
3. Version 2.14から「MacOSX-x86_64」または「Win64」を選ぶ

Version 2.14 (2020-08-05) Platforms:

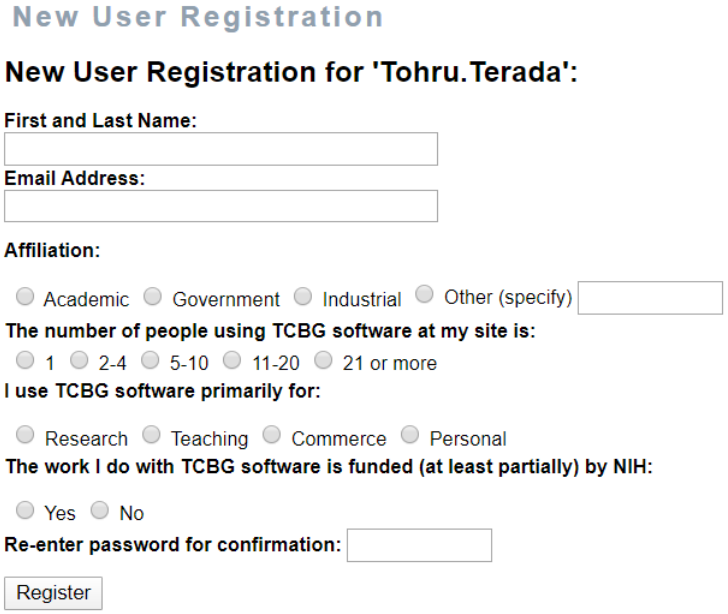
- **Linux-x86_64-multicore** (64-bit Intel/AMD single node)
- **Linux-x86_64-multicore-CUDA** (NVIDIA CUDA acceleration)
- **Linux-x86_64-netlrts** (Multi-copy algorithms, single host or ethernet)
- **Linux-x86_64-netlrts-smp-CUDA** (Multi-copy algorithms, single process per copy)
- **Linux-x86_64-verbs** (InfiniBand, no MPI needed, supports multi-copy algorithms)
- **Linux-x86_64-verbs-smp** (InfiniBand, no MPI needed, supports multi-copy algorithms)
- **Linux-x86_64-verbs-smp-CUDA** (InfiniBand, no MPI needed, supports multi-copy algorithms)
- **Linux-KNL-multicore** (Intel Xeon Phi KNL processor single node)
- **MacOSX-x86_64** (Mac OS X for 64-bit Intel processors)
- **MacOSX-x86_64-CUDA** (NVIDIA CUDA acceleration)
- **MacOSX-x86_64-netlrts** (Multi-copy algorithms)
- **Win64** (Windows 7, 8, 10, etc.)
- **Win64-CUDA** (NVIDIA CUDA acceleration)
- **Win64-MPI** (Windows HPC Server, multi-copy algorithms)
- **Win64-MPI-smp-CUDA** (HPC Server with CUDA)
- Source Code

NAMDのインストール（3）

4. 適当なユーザー名とパスワードを入力して「Continue …」

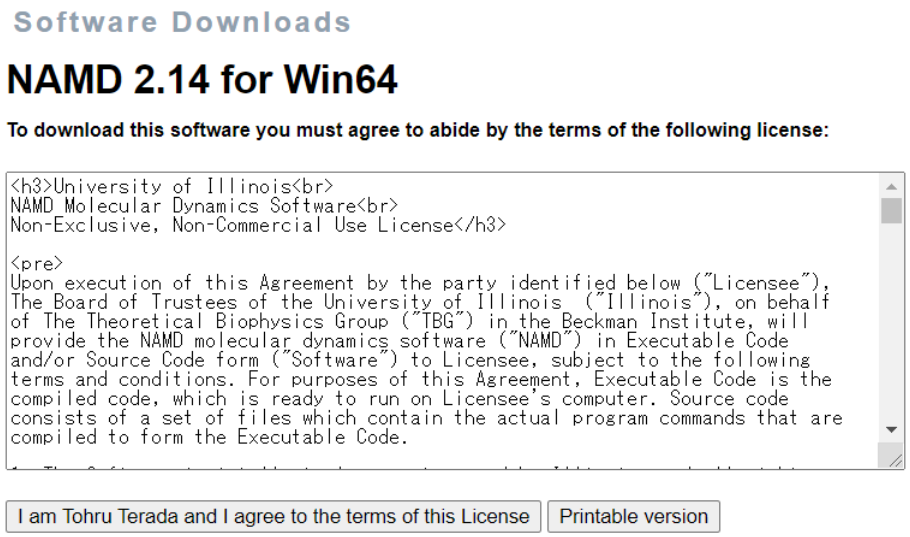


5. 右の画面で情報を埋めて「Register」



NAMDのインストール（4）

6. 右の画面で、「I am ...」をクリック
7. ダウンロードが完了したら「開く」
   - Windowsはスライド5へ
   - macOSはスライド6へ



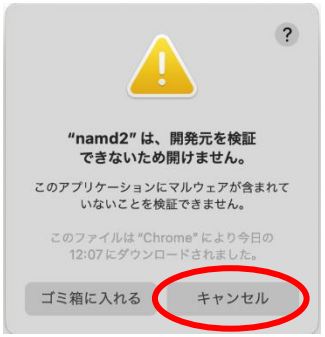
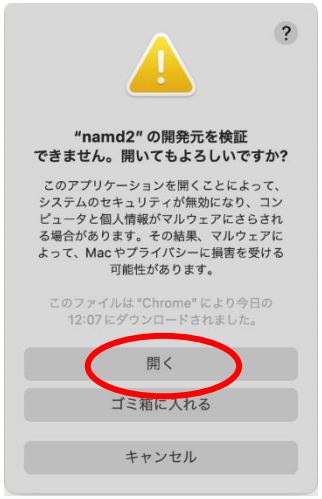
Windows 11

NAMDのインストール（５）

8. 解凍して生成されたフォルダ「 NAMD_2.14_Win64-multicore」内の「namd2.exe」と「tcl85t.dll」をデスクトップにコピー

NAMDのインストール（５）

8. 解凍して生成されたフォルダ「NAMD_2.14_MacOSX-x86_64-multicore」内の「namd2」をデスクトップにコピー

NAMD実行時の注意

1. NAMD実行時に右のウインドウが現れたら「キャンセル」
2. Dockから「システム環境設定」を選ぶ
3. 「セキュリティとプライバシー」を開き「このまま許可」
4. 再度実行し、右のウインドウで「開く」