INSTALACIÓN AMBER 8.0

- Actualizado (17.11.2005)

Se ha instalado la nueva versión 8.0 de AMBER en los siguientes servidores del CESGA:

- HP Superdome
- COMPAQ HPC320

La aplicación se encuentra disponible en ambos sistemas.Los ejecutables están en:
/opt/cesga/amber8.0/exe

Para utilizar esta aplicación es necesario definir la variable de entorno AMBERHOME como /opt/cesga/amber8.0. Por ejemplo,

- para bash o ksh: export AMBERHOME=/opt/cesga/amber8.0 - para csh: setenv AMBERHOME /opt/cesga/amber8.0

Para los ejecutables que permiten la paralelización, se han compilado tanto las versiones serie como las paralelas. En concreto, las versiones paralelas están marcadas con el sufijo .par y han de ejecutarse en modo MPI utilizando el comando mpirun. Por ejemplo, para ejecutar sander en paralelo se utilizará el comando

En el SUPERDOME:
mpirun -np /opt/cesga/amber8.0/exe/sander.par

En el HPC320:
dmpirun -np /opt/cesga/amber8.0/exe/sander.par
donde
- indica los procesadores a utilizar (que deberá coincidir con los solicitados cuando se envió a cola el trabajo). Por ejemplo, 4. - son los parámetros de entrada para el programa sander
Limitaciones conocidas.

Los problemas conocidos de la versión actual están descritos en el fichero KNOWN_PROBLEMS. En concreto, para el caso del CESGA, estas se limitan al Superdome donde:

1. no es posible hacer cálculos de pH, 2. no está soportado el ejecutable pmemd (por lo que no se ha compilado para esa máquina, sí para HPC320) 3. se ha compilado en 32 bits (si por alguna razón se necesitase utilizar la versión de 64 bits en el Superdome, contacte con).
Manuales

Los manuales de esta versión se pueden encontrar en formato PDF en el directorio opt/cesga/amber8.0/docs o en la dirección de Internet http://amber.scripps.edu/
Soporte

En caso de problemas en la utilización de este paquete de software, contacte con
.