
INSTALACIÓN AMBER 8.0

- Last Updated (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

.