

NAMD

Osnovno

NAMD (engl. *Nanoscale Molecular Dynamics*) je računalno-kemijska aplikacija za **molekulsku dinamiku**, a koristi se za simuliranje velikih biomolekula, poput proteina, nukleinskih kiselina i membrana. Više možete pročitati na [službenim stranicama](#).

NAMD je na računalnom klasteru Isabella kompajliran s Intelovim kompajlerom, a koristi paralelizaciju na razini *threadova*, odnosno ne može se širiti izvan jednog fizičkog stroja.



Važno

Obavezno koristite paralelnu okolinu **mpisingle** kako bi sve zatražene jezgre bile dodijeljene na istom fizičkom čvoru.

Moduli

Dostupne verzije s pripadajućim modulima su:

Verzija	Modul
2.13	NAMD/2.13-intel

Primjer

Jednostavan primjer simulacije ATP-aze F tipa, sa svim potrebnim datotekama možete preuzeti u obliku [.zip arhive](#).

Temeljne konfiguracijske postavke NAMD simulacije u nalaze se u **.namd** datoteci.

Primjer SGE skripte, a koja se nalazi i u gore spomenutoj .zip arhivi dan je niže:

run.sge

```
#!/bin/bash

#$ -pe *mpisingle 4
#$ -N namd
#$ -j y
#$ -cwd

module load NAMD/2.13-intel

namd2 +p${NSLOTS} +setcpuaaffinity ${1}
```

U ovom slučaju, SGE skripta prima jedan argument, a to je već spomenuta konfiguracijska **.namd** datoteka.

```
qsub run.sge f1atpase.namd
```

Primjer se u p20-mpisingle paralelnoj okolini, uz 4 CPU jezgre, izvodi oko 6 minuta.