

VMD



- - [Opis](#)
 - [Verzije](#)
 - [Službena dokumentacija](#)
 - [Napomene](#)
 - [Primjer korištenja](#)

Opis

VMD (Visual Molecular Dynamics) je računalno-kemijska aplikacija za vizualizaciju molekula i njihovih trajektorija.

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Supek	Padobran
1.9.3	scientific/vmd/1.9.3	GPU + CPU	✓	✗

Službena dokumentacija

- [VMD korisnički priručnik](#)

Napomene



VMD je potrebno koristiti isključivo za **vizualizaciju**.



Budući da aplikacija podržava GPU ubrzanje, potrebno je pokretati je na pristupnom **GPU čvoru**, odnosno `login-gpu.hpc.srce.hr`.

Kako bi se aplikacija uspješno pokrenula, potrebno je spojiti se na pristupni GPU čvor uz proslijeđivanje X11.

U slučaju korištenja **Linuxa** ili **macOS-a**, koristite naredbu:

```
ssh -X -i ~/.ssh/id_rsa username@login-gpu.hpc.srce.hr
```

U slučaju korištenja **Windowsa**, potrebno je preuzeti aplikaciju **Xming** te je pokrenuti prije pokretanja **PuTTY**-ja.

Unutar PuTTY-ja, potrebno je uključiti **X11 forwarding** (*Connection → SSH → X11, Enable X11 forwarding*).

Primjer korištenja

```
module load scientific/vmd/1.9.3
```

```
vmd input.gro
```

