

gmx_MMPBSA



- - [Opis](#)
 - [Verzije](#)
 - [Službena dokumentacija](#)
 - [Napomene](#)
 - [Primjeri](#)

Opis

gmx_MMPBSA je računalno-kemijska aplikacija temeljena na Amber-ovom alatu MMPBSA.py, s ciljem izračuna slobodne energije s GROMACS-ovim datotekama.

Aplikacija je otvorenog koda, a podržava **MPI paralelizaciju** te ima pripadajuće grafičko sučelje **gmx_MMPBSA_ana**.

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Paralelizacija	Uključuje <i>AmberTools</i>	Uključuje <i>GROMACS</i>	Supek	Padobran
1.6.2	scientific/gmx_mmpbsa/1.6.2	CPU	MPI	23	2022.5	✓	✗

Službena dokumentacija

- https://valdes-tresanco-ms.github.io/gmx_MMPBSA/v1.6.2/

Napomene



Kako bi se aplikacija **gmx_MMPBSA_ana** uspješno pokrenula, potrebno je spojiti se na pristupni čvor uz prosljeđivanje X11.

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

```
ssh -X -i ~/.ssh/id_rsa username@login-cpu.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*).



Za izvođenje zahtjevnijih računa/analiza, potrebno je aplikaciju pokretati iz interaktivnog načina rada:

```
$ qsub -X -I -q cpu -l select=8
```

```
$ module load scientific/gmx_mmpbsa
```

```
$ gmx_MMPBSA_test -f ${PBS_O_WORKDIR} -n 10
```

Primjeri

U primjeru niže, aplikacija će pokrenuti 16 MPI procesa.

PBS skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=16

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/gmx_mmpbsa

mpiexec gmx_MMPBSA -O -i mmpbsa.in -cs md.tpr -ct 3000frames.xtc -ci index.ndx -cg 18 19 -cp maoa_delta.top -o
FINAL_RESULTS_MMPBSA.dat -eo FINAL_RESULTS_MMPBSA.csv
```