

NAMD



- - Opis
 - Verzije
 - Službena dokumentacija
 - Primjer ulaznih datoteka
 - Napomene
 - Primjeri PBS skripte
 - CPU
 - Multicore
 - GPU
 - Multicore + CUDA

Opis

NAMD (engl. *Nanoscale Molecular Dynamics*) je računalno-kemijska aplikacija za molekulske dinamiku, a koristi se za simuliranje velikih biomolekula, poput proteina, nukleinskih kiselina i membrana.

Aplikacija je otvorenog koda, a podržava i upotrebu grafičkih procesora koji značajno ubrzavaju MD izračune.

Verzije

CPU					
Verzija	Inačica	Kompajler	Modul	Supek	Padobran
2.14	Multicore	GNU	scientific/namd/2.14-multicore	✓	✗
3.0b6	Multicore	GNU	scientific/namd/3.0b6-multicore	✓	✗
GPU					
Verzija	Inačica	Kompajler	Modul	Supek	Padobran
2.14	Multicore + CUDA	GNU	scientific/namd/2.14-multicore-cuda	✓	✗
3.0b6	Multicore + CUDA	GNU	scientific/namd/3.0b6-multicore-cuda	✓	✗

Službena dokumentacija

- <https://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>

Primjer ulaznih datoteka

Napomene



Wrapperi

Za aplikaciju su pripremljeni *wrapperi* `namd2.run`, odnosno `namd3.run` koji olakšavaju pozivanje aplikacije, preuzimajući varijable dodijeljene od PBS-a.

Primjeri PBS skripte

CPU

Multicore

Morate zatražiti jedan računalni čvor, budući da aplikacija radi s **dijeljeno** m memorijom. U primjeru niže, za aplikaciju ću se zatražiti sve zajedno:

- 32 procesorske jezgre
- 2 GiB RAM

Bash skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=1:ncpus=32:mem=2gb

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load "scientific/namd/2.14-multicore"

namd2.run flatpase.namd
```

GPU

Multicore + CUDA

Morate zatražiti jedan računalni čvor, budući da aplikacija radi s **dijeljeno** m memorijom. U primjeru niže, za aplikaciju ću se zatražiti sve zajedno:

- 1 grafički procesor
- 32 procesorske jezgre
- 2 GiB RAM

PBS skripta

```
#PBS -q gpu
#PBS -l select=1:ngpus=1:ncpus=32:mem=2gb

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load "scientific/namd/2.14-multicore-cuda"

namd2.run flatpase.namd
```

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

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