

AutoDock Vina

blocked URL

- blocked URL
 - Opis
 - Verzije
 - Službena dokumentacija
 - Primjeri
 - Niz (polje) poslova

Opis

AutoDock Vina je računalno-kemijska aplikacija otvorenog koda, za molekularni *docking*.

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Paralelizacija	Kompajler	Supek	Padobran
1.2.5	scientific/autodock-vina/1.2.5	CPU	OpenMP	GNU	✓	✗

Službena dokumentacija

- <https://vina.scripps.edu/>
- <https://github.com/ccsb-scripps/AutoDock-Vina>
- <https://autodock-vina.readthedocs.io/en/latest/>

Primjeri

Bash skripta

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

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load "scientific/autodock-vina/1.2.5"

vina --cpu ${OMP_NUM_THREADS} --config config.txt
--ligand lgnd963.pdbqt
vina --cpu ${OMP_NUM_THREADS} --config config.txt
--ligand lgnd255.pdbqt
vina --cpu ${OMP_NUM_THREADS} --config config.txt
--ligand lgnd965.pdbqt
```

Niz (polje) poslova



U slučaju rada s velikim brojem sličnih *inputa*, preporučuje se korištenje nizova (polja) poslova, danih PBS opcijom `-J`.

U primjeru niže, pokrenut će se niz od 6 "pod-poslova", svaki na vlastitim procesorskim jezgrama (32 kom.), i uz rezervaciju 32 GiB po "pod-poslu".

Inputi se nalaze u datotekama `input_1.txt`, `input_2.txt`... `input_6.txt`

Bash skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=1:ncpus=32:mem=32gb
#PBS -J 1-6:1

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load "scientific/autodock-vina/1.2.5"

vina --cpu ${OMP_NUM_THREADS} --config
input_${PBS_ARRAY_INDEX}.txt
```