

AMBER 16

生体分子のためのモデリング・動力学計算シミュレーションプログラム

更新日 2016/6/22

【概要】

AMBER は、カリフォルニア大学のコールマン教授らのグループによって生体分子のために開発された、モデリングおよび分子力学と動力学計算シミュレーションプログラムのパッケージです。

【利用可能ホスト】

malt1.hucc.hokudai.ac.jp (北海道大学に所属する教職員・学生)

malt2.hucc.hokudai.ac.jp (北海道大学に所属する教職員・学生)

malt3.hucc.hokudai.ac.jp (大学に所属する教職員・学生および国または自治体に所属する研究者)

【環境設定ファイルとサンプルプログラムのコピー】

環境設定ファイルとサンプルプログラムが

```
/usr/local/huccsrc/amber16/
```

にあります。任意のディレクトリにコピーして利用してください。

```
% cp -r /usr/local/huccsrc/amber16 .
```

【注意事項】

アプリケーションサーバは1サーバあたり40コアとなっております。TSSノード (**malt1, malt2, malt3**) で利用される方は、他のアプリケーションソフトウェア利用者や別の AMBER 利用者との兼ね合いがありますので、**top** コマンドで確認しながら節度をもった指定値で利用されるようご協力願います。1利用者1サーバにつき16コアまでとさせていただきます。それ以上使用される場合はあらかじめご連絡ください。混雑期はさらにコア数を少なくさせていただく場合があります。なお、16コアを超えるプログラムが実行されていた場合は **nice** 値でプライオリティ (優先度) を下げる場合がありますことをご了承ください。

【環境設定】

```
% cd amber16
```

```
% source login.amber16 …環境変数の設定
```

【起動方法】

```
% cd sample/dna_pol
```

```
% ./Run.dna_pol
```

出力の最後に”PASSED”と表示されることを確認してください。

【ヘルプ】

【マニュアル】

Amber16 Reference Manual

AMBER 日本語チュートリアル

オンラインマニュアルは[こちら](#)から（大型計算機システム利用者のみ）

【メーカーリンク】

http://www.conflex.co.jp/prod_amber.html