



科学与工程计算中心
Center for Computational Science and Engineering

“太乙” Amber 手册

编写时间：2021 年 1 月

目录

一、 介绍.....	3
1.1. 简介.....	3
1.2. 太乙的amber.....	3
二、 使用软件.....	3
2.1. 输入文件样例.....	3
2.2. 加载该软件.....	5
三、 作业样例.....	5
3.1. 提交脚本.....	5
3.2. 提交并查看作业.....	6
3.3. 作业结果.....	6
四、 注意事项.....	6
4.1. 关于测试样例.....	6
4.2. 联系方式.....	6

一、介绍

1.1. 简介

Amber是由加利福尼亚大学的一组Coleman教授为生物分子开发的一系列建模，分子力学和动力学模拟程序。有许多程序，例如构建模块，其安排溶剂水分子并执行电荷拟合，还可以使用分析工具执行NMR细化并执行动力学计算的轨迹分析。

更多内容，请参考官方网站：<http://ambermd.org/>。

1.2. 太乙的amber

太乙集群上面已经安装配置好了Intel mpi 编译的18版本的amber软件. 软件所在位置：`/share/apps/amber/amber18-cpu-intel-impi`。

二、使用软件

2.1. 输入文件样例

本样例是一个使用amber的sander程序，在核酸力场和一定温度环境下对蛋白质分子运动的模拟，样例所需文件为01_Min.in, 01_Min.ncrst, 02_Heat.in, inpcrd, parm7等，文件位于：`/share/apps/amber/amber18-cpu-intel-impi/example`, 用户可自行下载该文件到自己目录，进行测试。

输入文件1

```
$ cat 01_Min.in
```

```
Minimize
```

```
&cntrl
```

```
imin=1,
```

```
ntx=1,
```

```
irest=0,
```

```
maxcyc=2000,
```

```
ncyc=1000,
```

```
ntpr=100,
```

```
ntwx=0,
```

```
cut=8.0,
```

```
/
```

参数说明

- imin=1: 选择运行能量最小化模式
- ntx=1: 从 ASCII 格式的 inpcrd 坐标文件读取坐标，但不读取速度
- irest=0: 不重新启动模拟
- maxcyc=2000: 最小化的最大循环数
- ncyc=1000: 调用 1000 次最速下降算法
- ntpr=100: 每 100 次循环输出一次
- ntwx=0: 不输出 Amber mdcrd 轨迹文件
- cut=8.0: 非键截断距离 8 埃

输入文件2

```
$ cat 02_Heat.in
Heat
&cntrl
imin=0,
ntx=1,
irest=0,
nstlim=10000,
dt=0.002,
ntf=2,
ntc=2,
tempi=0.0,
temp0=300.0,
ntpr=100,
ntwx=100,
cut=8.0,
ntb=1,
ntp=0,
ntt=3,
gamma_ln=2.0,
nmropt=1,
ig=-1,
/
&wt type='TEMPO', istep1=0, istep2=9000, value1=0.0, value2=300.0 /
&wt type='TEMPO', istep1=9001, istep2=10000, value1=300.0, value2=300.0 /
&wt type='END' /
...
```

参数说明

- imin=0: 选择运行分子动力学
- ntx=0 从无格式的 inpcrd 坐标文件中读取坐标和速度
- nstlim=10000: 运行的 MD 步数
- dt=0.002: 每一个 MD 步的时间
- ntf=2: 不计算受 SHAKE 约束的键所受的力
- ntc=2: 启用 SHAKE 来约束所有包含氢的键
- tempi=0.0: 初始恒温器的温度, 单位 K
- temp0=300.0: 最终恒温器的温度 单位 K
- ntwx=1000: 每 ntwx 步输出 Amber 轨迹文件 mdcrd 一次
- ntb=1: 等容的周期性边界
- gamma_ln=2.0: Langevin 恒温器的碰撞频率
- nmropt=1: 读入 NMR 限制和权重变化

输入文件3

```
$ cat 03_Prod.in
Production
```

```
&cntrl  
imin=0,  
ntx=5,  
irest=1,  
nstlim=5000000,  
dt=0.002,  
ntf=2,  
ntc=2,  
temp0=300.0,  
ntpr=100,  
ntwx=100,  
cut=8.0,  
ntb=2,  
ntp=1,  
ntt=3,  
barostat=1,  
gamma_ln=2.0,  
ig=-1,  
/  
/
```

参数意义同输入文件2

2.2. 加载该软件

太乙amber已经设好软件环境变量文件，直接执行 `source /share/apps/amber/amber18-cpu-intel-impi/amber.env`，即可加载该软件环境。

三、 作业样例

3.1. 提交脚本

提交脚本文件为`test.lsf`，该文件位于：`/share/apps/cp2k-6.1-success/tests/test.lsf`，用户可自行下载该文件到自己目录，进行测试。

脚本内容：

```
#!/bin/sh  
#BSUB -J test_amber  
#BSUB -q debug  
#BSUB -n 40  
#BSUB -R "span[ptile=40]"  
#BSUB -e %J.err  
#BSUB -o %J.out  
source /share/apps/amber/amber18-cpu-intel-impi/amber.env  
sander -O -i 01_Min.in -o 01_Min.out -p parm7 -c inpcrd -r 01_Min.rst -inf  
01_Min.mdinfo  
sander -O -i 02_Heat.in -o 02_Heat.out -p parm7 -c 01_Min.ncrst -r 02_Heat.ncrst -x  
02_Heat.nc -inf 02_Heat.mdinfo
```

```
sander -O -i 03_Prod.in -o 03_Prod.out -p parm7 -c 02_Heat.ncrst -r 03_Prod.ncrst -x 03_Prod.nc -inf 03_Prod.info
```

作业命令说明

- O: 覆盖输出文件, 如果它们已经存在
- i 01_Min.in: 选择输入文件(默认mdin)
- o 01_Min.out: 输出文件(默认mdout)
- p parm7: 选择参数和拓扑文件prmtop
- c 01_Min.ncrst: 选择坐标文件inpcrd
- r 02_Heat.ncrst: 输出包含坐标和速度的重启文件(默认restrt)
- inf 02_Heat.mdinfo: 输出包含模拟状态的MD信息文件(默认mdinfo)

3.2. 提交并查看作业

```
$ bsub < testamber.lsf
```

```
$ bjobs
```

JOBID	USER	STAT	QUEUE	FROM_HOST	EXEC_HOST	JOB_NAME	SUBMIT_TIME
1170977	ccse-zh	RUN	debug	login01	40*r13n46	test_amber	Jan 20 10:24

3.3. 作业结果

结果文件为01_Min.out、02_Heat.mdinfo、02_Heat.out、03_Prod.out

四、 注意事项

4.1. 关于测试样例

- 本文档测试样例, 只是验证改软件能正常运行。
- 欢迎使用该软件的用户, 提供更加好的样例, 以便提高该软件的使用效率。
- 其他补充连接:

<http://community.hartree.stfc.ac.uk/wiki/site/admin/amber.html>

<https://projects.ncsu.edu/hpc/Software/Apps.php?app=Amber>

4.2. 联系方式

- 本文档由科学与工程计算中心编写, 联系邮箱: hpc@sustech.edu.cn, 联系人: 谢作扬, 电话: 0755-88015831