

Amber——经典的分子动力学模拟程序（特别适合生物大分子）

Amber（Assisted Model Building with Energy Refinement）这个名词通常涉及两个产品：一个是一套生物分子动力学模拟软件包，另一个是由TSRI&UCSF发布的包含代码和演示的分子模拟软件包，由AmberTools和Amber组成，当前最新版本是AmberTools 15和Amber 14，Amber是一个多个程序的集合包，大约包含50多个程序，相互协调工作。

环境

功能环境

Simulated annealing with NMR-derived energy restraints, 用来自NMR的能量限制模拟退火。可以基于来自NOE的距离转角限制、基于化学位移和NOESY值的性能损失函数, 进行NMR的精细化。Sander也是用于分子动力学模拟的主程支持QM/MM(量子/动力学)运算。

使用一阶和二阶导数信息进行简正模式分析的程序, 用于寻找局域最小值, 进行振动分析, 寻找过渡态。

K-window程序, 用于基本模型, AMBER坐标和参数/拓扑文件的创建。它包含分子编辑器, 可以创建氨基酸残基并

X-window程序，用于基本模型，AMBER坐标和参数/拓扑文件的创建。它包含分子编辑器，可以创建氨基酸残基并进行修饰。

Amber: 该程序套件对大多数有机分子和金属配位中心自动产生力场描述。它从结构开始（通常是PDB格式），产生识别的文件用于分子模拟。要求对蛋白质和核酸产生的力场与通常的Amber力场一致，另外还可以和高斯兼容，生成输入文件用于量化计算。

Journal: 用于分析MD轨迹, 计算参考结构的RMS偏差, 氢键分析, 时间相关函数, 扩散特性, 等。

a: 脚本, 对MD轨迹自动后期处理, 用连续溶剂方法进行热力学分析。它能够把能量归属到不同的氨基酸残基片并估算不同构象之间的自由能量差。

这是一个在sander基础上进行重大修改的程序，用于优化周期性、PME模拟以及GB模拟过程。新版本pmemd的计算比Sander快，而且更适用于并行。从11版新增NVIDIA GPU加速，因此，它通常是一可选程序，除非你需要的选项。在新版模型中，我们可以理解为：sander是研究新的性质的有效手段，pmemd如同“生产”的代码，是实现常用的一个行之有效的工具，在高性能环境中表现良好。

来分析MD轨迹, 计算的各种数据, 如: 相关结构的均方根偏差, 氢键分析, 时间相关函数, 扩散行为等。

运营环境

er 14以源代码形式发布,支持主流的各种32位/64位Linux 操作系统,支持串行、单节点内并行和集群跨节点并行。各种NVIDIA CUDA GPU显卡的加速运算,相比传统的CPU计算最高可以获得10倍以上的加速。

代理销售



北京分公司：北京市顺义区安泰大街融慧园15-3



Amber 14 分子动力学模拟软件

基于GPU加速的分析动力学模拟计算

分子动力学模拟集群可以把整个模拟的过程从原来的几天缩短至几小时，基于Tesla设计的动力学模拟集群，可以用于模拟大型模型，得到精确的计算结果并且可以缩短计算时间。

GPU能为AMBER带来哪些好处?首先，加速模拟过程，可以模拟分子、分子之间的相互作用，快速的计算过程可以使得研究者对其所研究的体系有一个更深刻的理解，同时还可以使得所设计出产品的性能更加稳定；其次，效率更高的计算流程可以使得我们发现的候选药物质量更高，避免找到活性较差的候选药物；最后，在模拟若干纳秒级的大分子复合物时，可以有效避免时间的浪费。

Leadtek 丽台HPC WS2000 塔式 高性能服务器		标配数量
CPU处理器	Intel Xeon E5-2620 v2 处理器 6核12线程 (15M Cache,2.1GHz,7.2GT/s Intel QPI,80W)	1
	支持双路 Intel® Xeon® E5-2600 系列	
CPU散热套装	CPU散热配套风扇	1
芯片组	Intel C602芯片组系列	
内存	16DDR3 1600MHz DDR3 RECC memory	2
	高达512GB的DDR3 1600MHz的ECC RDIMM; 16个 DIMM插槽	
硬盘	1TB 7200转 SATA3 企业级硬盘	1
	最高可支持10个SATA硬盘，其中8个热插拔3.5“ SATA热插拔硬盘托架，2个固定式3.5寸/5.25寸，2个6.0Gb/s，8个3.0Gb/s，支持RAID 0, 1, 5, 10	
I/O端口	前方面板 2个USB 2.0，后方面板 4个USB 2.0，1个VGA D-Sub接头，2个RJ-45GbE网络接头，1个RJ-45 IPMI网络接头	
网络	GbE网络	
光驱	24倍速DVD刻录机，支持DVD-ROM,DVD-R/RW/RAM/+R/RW/+R DL M-DISC/+M SL	
产品尺寸	673*178*462mm	
工业噪音	低于30分贝,按照ISO 9296 《声学计算机和办公设备噪声发射的申报值》宣布的工业标准	
编程环境	CUDA程序环境，支持多种编程语言和API,包括C,C++,OpenCL,DirectCompute或Fortran	
	并行编译环境：GNU C/C++编译器，GUN Fortran77/90编译器	
	高性能计算函数库：LAPACK,BLAS,GOTO,Atlas, FFTW	
	GPU CUDA函数库：cuBlas cuFFT,cuSparse, cuRand, npp, OpenCL	
电源	1620W 80 Plus白金级可热插拔电源	
IPMI	IPMI 2.0 支持KVM-over-LAN	
散热系统	6PWM可调式散热风扇	
安全锁孔	支持keylock与kensington安全专用孔	
保修	3年保修	
Nvidia Tesla GPU		标配数量
GPU计算卡	Nvidia k40c	1
	扩展卡支持：4个PCI-E 3.0 X16，2个PCI-E 3.0 X8；1个PCI-E 3.0 X4；支持高达4个双槽GPU超算卡	
显示卡	支持nvidia 全系列Kepler核心Quadro与Tesla产品线，支持NVIDIA Maximus技术搭配Quadro与高达3个Tesla GPU	

50000

以上配置已预装AMBER14软件，并已完成所有GPU部署，插电即用！