

## Amber18-bf1 for LX

### ウェブページ

<http://ambermd.org/>

### バージョン

Amber 18-bf1 + AmberTools 18-bf2

### ビルド環境

- Intel Compiler 17.0.4.196
- Intel MKL 2017 update 3
- Intel MPI 2017.0.3
- CUDA 9.1.85
- Python 2.7

### ビルドに必要なファイル

- Amber18.tar.bz2
- AmberTools18.tar.bz2
- (Amber18 update.1; スクリプト内で取得)
- (AmberTools18 update.1-2; スクリプト内で取得)

### ビルド手順

```
#!/bin/sh

VERSION=18
TOOLSVERSION=18

INSTALL_DIR="/local/apl/lx/amber18-bf1"
TARBALL_DIR="/home/users/${USER}"

export AMBERHOME=${INSTALL_DIR}
# cuda 9.1
export CUDA_HOME="/local/apl/lx/cuda-9.1"

PARALLEL=12

# -----
# install directory has to be prepared before running this script
if [ ! -d $AMBERHOME ]; then
  echo "Create $AMBERHOME before running this script."
  exit 1
fi

# the install directory must be empty
if [ "$(ls -A $AMBERHOME)" ]; then
  echo "Target directory $AMBERHOME not empty"
  exit 2
fi

ulimit -s unlimited

# prep files
cd $AMBERHOME
bunzip2 -c ${TARBALL_DIR}/Amber${VERSION}.tar.bz2 | tar xf -
bunzip2 -c ${TARBALL_DIR}/AmberTools${TOOLSVERSION}.tar.bz2 | tar xf -

mv amber${VERSION}/* .
rmdir amber${VERSION}
```

```
# apply patches if exists
./update_amber --update
# configure python separately (miniconda)
AmberTools/src/configure_python
$AMBERHOME/bin/amber.conda install mkl-rt --yes

echo "[GPU serial edition (three versions)]"
./configure --no-updates -cuda gnu
make -j${PARALLEL} install && make clean

echo "[GPU parallel edition (three versions)]"
./configure --no-updates -mpi -cuda gnu
make -j${PARALLEL} install && make clean
# tests of GPU versions will be done elsewhere

# load intel17; intel18 is not officially supported
./local/apl/lx/intel2017update4/bin/compilervars.sh intel64

echo "[CPU serial edition]"
LANG=C ./configure --no-updates -mkl intel
make -j${PARALLEL} install
. ${AMBERHOME}/amber.sh
make test.serial
make clean

echo "[CPU openmp edition]"
LANG=C ./configure --no-updates -openmp -mkl intel
make -j${PARALLEL} install
make test.openmp
make clean

echo "[CPU parallel edition]"
LANG=C ./configure --no-updates -intelmpi -mkl intel
make -j${PARALLEL} install
export DO_PARALLEL="mpirun -np 2"
make test.parallel
export DO_PARALLEL="mpirun -np 4"
cd test && make test.parallel.4proc

cd $AMBERHOME
make clean && chmod 700 src
```

## 注意

- ファイルは /local/apl/lx/amber18-bf1 以下にインストールされています。
- サンプルは samples/ 以下にあります。
- 環境設定スクリプト(amber.sh, amber.csh)は /local/apl/lx/amber18-bf1 直下にあります。CUDA-9.1のパス設定はこのスクリプトでは行われなことに注意してください。
- CUDA版のバイナリを使う際には、CUDA-9.1のパスを明示的に指定する必要があります。samples/以下にあるgpu用サンプルを参考にしてください
- テストのログはlogs/以下に置いてあります。cuda以外のテストはフロントエンドノードで行っています。
  - pythonからの呼び出しでエラーが発生しています。この機能を使う場合には十分ご注意ください。