

Amber12-bf21 for UV2000

ウェブページ

<http://ambermd.org/>

バージョン

Amber 12 bugfix 21 + AmberTools 13 bugfix 20

ビルド環境

- Intel Compiler 11.1.080
- SGI MPT 2.07

ビルドに必要なファイル

- Amber12.tar.bz2
- AmberTools13.tar.bz2
- <http://ambermd.org/bugfixes12.html>にあるパッチ
- <http://ambermd.org/bugfixesat.html>にあるパッチ

ビルド手順

```

#!/bin/csh -f
umask 022
# 作業場所がインストール場所でなければ、mpi4pyが動作しない
set work="/local/apl/uv/amber12-bf21"
set build="/home/users/${USER}/build/amber12"
setenv AMBERHOME "$work"
setenv DO_PARALLEL "mpirun -np 2"
# 以前の残骸を消去する
if (-d $AMBERHOME) then
if (-e $AMBERHOME/configure) then
echo "Remove $AMBERHOME to be clean."
exit 1
endif
if (! -d $AMBERHOME) then
echo "Create $AMBERHOME before build."
exit 1
endif
#
cd $AMBERHOME
bunzip2 -c ${build}/Amber12.tar.bz2 | tar xf -
bunzip2 -c ${build}/AmberTools13.tar.bz2 | tar xf -
mv amber12/* .
rmdir amber12
cd $AMBERHOME
foreach i (${build}/patches/AmberTools13 ${build}/patches/Amber12)
foreach j (${i}/*.* ${i}/*.*?)
patch -p0 < $j
end
end
#
# 言語を英語にしないとコンパイラーのバージョン番号取得に失敗する
setenv LANG C
# 環境変数SSE_TYPESは-ax${SSE_TYPES}を設定することを意味するので設定しない
unsetenv SSE_TYPES
# インテルコンパイラー12では
# rism1dがハングアップする？
# mpiではテストが通らない
source /opt/intel/Compiler/11.1/080/bin/iccvars.csh intel64
source /opt/intel/Compiler/11.1/080/bin/ifortvars.csh intel64
#
echo "[CPU serial edition]"
./configure --no-updates intel
make -j 16 install
#make test
make clean
echo "[CPU parallel edition]"
./configure --no-updates -mpi intel
make -j 16 install
make test
make clean

```