

AutoDock-GPU 1.5.3

ウェブページ

<https://autodock.scripps.edu/>
<https://github.com/ccsb-scripps/AutoDock-GPU>

バージョン

v1.5.3

ビルド環境

- GCC 8.5.0
- CUDA Toolkit 12.0
-

ビルドに必要なファイル

(以下の導入手順中で取得します)

ビルド手順

```
#!/bin/sh

VERSION=1.5.3
INSTALL_DIR=/apl/autodock-gpu/${VERSION}

module -s purge
module -s load cuda/12.0

export GPU_INCLUDE_PATH=/apl/cuda/12.0/include
export GPU_LIBRARY_PATH=/apl/cuda/12.0/lib64

# -----

cd ${INSTALL_DIR}

git clone https://github.com/ccsb-scripps/AutoDock-GPU.git
mv AutoDock-GPU/{*,.git*} .
rmdir AutoDock-GPU
git checkout refs/tags/v${VERSION}
# build for A30, A100 (compute capability)
sed -i -e "s/52 60 61 70/80/" Makefile.Cuda
make DEVICE=CUDA NUMWI=128
```

メモ

- NVIDIA A100, A30 向けにビルドしています。
- インプットデータについては MGLTools (<https://ccsb.scripps.edu/mgltools/>) で作成する必要があります。
 - autogrid が付属されていないように見えます(Linux 版)。autodock 4.2.6 に含まれるものを使う必要があるかもしれません。
 - AutoDock Vina 付属のツール(exampleディレクトリ以下)で作ることも可能かもしれません