

Amber 9

Installazione e configurazione

```
scp amber9.tgz andrea@tartaglia.units.it:/home/andrea
scariato da http://amber.scripps.edu il file bugfix.all ed installato con:
cd $AMBERHOME
patch -p0 -N -r patch-rejects < bugfix.all
scp bugfix.all andrea@tartaglia.units.it:/home/andrea
mkdir /prodotti/amber9
mv /home/andrea/amber9.tgz /prodotti/amber9.tgz
mv /home/andrea/bugfix.all /prodotti/amber9/bugfix.all
gunzip -c amber9.tgz | tar xvf -
module load /csia/modules/amber/amber (x configurare l'ambiente - nota: x scaricare tutto: module
clear)
```

contenuto di /csia/module/amber/amber:

```
#!/Module
# Mez
# Tue Nov 09 10:00:00 CET 2007
```

```
setenv AMBERHOME "/prodotti/amber9"
prepend-path PATH /prodotti/amber9/exe
module load /csia/modules/openmpi/intel
setenv MPI_HOME "/opt/openmpi-1.2.1/intel"
setenv MKL_HOME "/opt/intel/mkl/9.1.021"
prepend-path LD_LIBRARY_PATH /opt/intel/mkl/9.1.021/lib/em64t
```

```
yum install byacc
cd /prodotti/amber9/src
./configure ifort_x86_64
```

moduli seriali

```
make serial
Per testare l'installazione:
cd $AMBERHOME/test
make test.serial
```

moduli paralleli

modificato il file /prodotti/amber9/src/configure; aggiunto "-I\$MPI_HOME/include" alla riga fflags=" -w95 " della sezione ### EM64T Intel compilers; ### paragrafo "ifort_x86_64"

```
da utente fermegli:
cd /prodotti/amber9/src
./configure -openmpi -opteron ifort_x86_64
make parallel
cd /prodotti/amber9/test
export DO_PARALLEL="mpiexec -mca btl ^openib -n 4" (senza infiniband, su 4 cpu)
make test.parallel
```

```
copiare la dir /prodotti/amber9 su tutti i nodi:
cd /prodotti/
tar -cvf amber9.tar amber9
mv amber9.tar /scratch_gl
cluster-fork tar -xvf /scratch_gl/amber9.tar -C /prodotti
```

installazione pmemd

```
loggarsi con user fermegli
cd /prodotti/amber9/src/pmemd
module load openmpi/intel
modificare il file config.h come sotto:
```

```
IFORT_RPATH = /opt/openmpi-1.2.1/intel/lib:/opt/intel/fce/9.1.036/lib:/opt/intel/cce/9.1.042/lib
#MATH_DEFINES = -DMKL
#MATH_LIBS = -L/opt/intel/mkl/9.1.021/lib/em64t -lmklem64t -lpthread
MATH_DEFINES =
MATH_LIBS =
FFT_INCLUDEDIR =
FFT_LIBDIR =
FFT_DEFINES = -DPUBFFT
FFT_INCLUDE =
FFT_LIBS =
NETCDF_HOME =
NETCDF_DEFINES =
NETCDF_MOD =
NETCDF_LIBS =
MPI_HOME = /opt/openmpi-1.2.1/intel
MPI_DEFINES = -DMPI
MPI_INCLUDE = -I/opt/openmpi-1.2.1/intel/include
MPI_LIBDIR = /opt/openmpi-1.2.1/intel/lib
#MPI_LIBS = -L$MPI_LIBDIR -lmpi -lorte -lopal -lutil -lnsl -lpthread
DIRFRC_DEFINES = -DDIRFRC_EFS -DDIRFRC_NOVEC
CPP = /lib/cpp
CPPFLAGS = -traditional -P
F90_DEFINES = -DFFTLOADBAL_2PROC

#F90 = ifort
F90 = mpif90
MODULE_SUFFIX = mod
F90FLAGS = -c -auto
```

```
F90_OPT_DBG = -g -traceback
F90_OPT_LO = -tpp7 -O0
F90_OPT_MED = -tpp7 -O2
F90_OPT_HI = -tpp7 -xW -ip -O3
F90_OPT_DFLT = $F90_OPT_HI
```

```
CC = gcc
CFLAGS =
```

```
#LOAD = ifort
LOAD = mpif90
LOADFLAGS =
LOADLIBS = -limf -lsvml -Wl,-rpath=$IFORT_RPATH
```

lanciare il solito “make install”

procede la compilazione e viene creato l'eseguibile: /prodotti/amber9/exe/pmemd

From:

<https://docu.units.it/dokuwiki/> - Area dei Servizi ICT - Documentation

Permanent link:

<https://docu.units.it/dokuwiki/servizi:cluster:amber>

Last update: **2010/04/12 08:37 (15 anni fa)**

