Amber 9

Installazione e configurazione

scp amber9.tgz andrea@tartaglia.units.it:/home/andrea scaricato 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 -Impi -lorte -lopal -lutil -Insl -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

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)



3/3