

---

# 富岳商用ソフトウェア Amber 利用手順書

2023 年 9 月

版数	更新	作成
第 1.0 版		2023/09/01

---

## 目次

1. まえがき .....	1
2. Amber 実行方法 .....	2
2.1. 実行時の環境設定について .....	2
3. Amber の環境変更について .....	3
4. 問合せ方法.....	4

---

# 1. まえがき

## 本書の目的

本書では、理化学研究所 計算科学研究センター (R-CCS)がスーパーコンピューター「富岳」上に整備した Amber の利用方法を説明します。

- 「富岳」の一般的な利用方法については、富岳ポータル内の各種マニュアルを参照してください
- Amber の一般的な利用方法については、Amber のマニュアルを参照してください
- 「富岳」上で利用可能な Amber のバージョンと機能については[利用できる商用ソフトウェアのバージョン](#)を参照してください。

## 前提条件

利用者が「利用開始までの流れ」に従い、Amber ソフトウェア利用環境設定完了通知を受領しているものとします。

「富岳」上に整備された商用ソフトウェアの利用にあたっては、ソフトウェア・ライセンスの管理（動作確認）やソフトウェア動作に関する問合せ時の調査を、ヘルプデスク、理化学研究所および協力機関が協力して実施します。そのため、ライセンス情報、問合せ内容などをヘルプデスク、理化学研究所および協力機関の間で相互に共有する場合があります。あらかじめご了承ください。

---

## 2. Amber 実行方法

Amber 実行時のジョブ実行用スクリプト例を以下に示します。作業環境に合わせて適宜修正してください。赤字箇所については後述の説明文を参照してください。本ジョブは計算ノードに投入します。本章では Amber20 を例に説明します。

```
#!/bin/bash
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=1"
#PJM -L "elapsed=00:05:00"
#PJM -L "freq=2200,eco_state=2"
#PJM -g <groupname>
#PJM -x PJM_LLIO_GFSCACHE=/vol0004
#PJM --mpi "proc=48"
#PJM -j
#PJM -S

module use /vol0004/apps/isv/Amber20/modulefiles
module load Amber20

/usr/bin/time -p mpiexec -n 48 $AMBERHOME/bin/pmemd.MPI ¥
-O -i mdin -o bench.fix.out_48 < /dev/null
```

### 2.1. 実行時の環境設定について

- #PJM -L "freq=2200,eco\_state=2"

「富岳」の実行モードを指定するオプションです。例ではブーストエコモードを指定していますが、入力データによりエネルギー効率の良い実行モードが異なる可能性がありますので、性能低下が許容範囲で消費エネルギーが最小のモードでの実行をお願いします。詳しくは、下記を参照してください。

[https://www.fugaku.r-ccs.riken.jp/operation/20220701\\_01](https://www.fugaku.r-ccs.riken.jp/operation/20220701_01)

- #PJM -x PJM\_LLIO\_GFSCACHE=/vol0004

ジョブ投入時に指定する環境変数 PJM\_LLIO\_GFSCACHE に必ず /vol0004 を指定してください。

- module コマンド

環境変数を設定するために利用します。

- module use

---

**modulefile** の格納場所を指定します。利用するバージョンに合わせて Amber20 の部分を変更してください。

- `module load modulefile`  
**modulefile** に定義された環境変数群をセットします。

```
module load Amber20
```

を指定した場合、「富岳」上にインストールされている最新のバージョンを利用します。

**重要**：`module load` コマンドで設定される環境変数には実行時パラメーターが含まれている場合があります。実行時パラメーターを指定する場合、必ず `module load` コマンドより後に指定してください。

特定のバージョンを利用する場合、**modulefile** を変更します。

例：Amber2021\_20230802 版(\*)を使用する場合

```
module load Amber20/Amber2021_20230802
```

(\*)Amber は Amber および AmberTools から構成されているため、update バージョン管理のために独自の **modulefile** を定義しています。**modulefile** 指定時に適用される各ソフトウェアの情報については、`module whatis` コマンドから出力されるメッセージを確認してください。

例：Amber2021\_20230802 の設定内容を確認する場合

```
module use /vol0004/apps/isv/Amber20/modulefiles  
module whatis Amber20/Amber2021_20230802
```

➤ `module avail`

**modulefile** に指定するキーワードの一覧を表示します。

```
module use /vol0004/apps/isv/Amber20/modulefiles  
module avail Amber20
```

➤ `module show modulefile`

`module` コマンドによって設定される内容を表示します。

例：**Amber20** 指定時に設定される内容を表示

```
module use /vol0004/apps/isv/Amber20/modulefiles  
module show Amber20
```

### 3. Amber の環境変更について

Amber の環境変更が行われる場合、変更内容と日時が「富岳」利用者ポータルサイトに掲

---

載されます。変更内容を確認し、必要に応じて変更日時までに対応を実施してください。以下に想定される変更内容と、その変更による利用者への影響および対処方法を記します。本章では Amber20 を例に説明します。

- **Amber のバージョンアップ**

module load Amber20 を指定して最新バージョンを使用している場合、変更日時以降実行される Amber のバージョンが新たに導入される最新バージョンに変更されます。現在使用しているバージョンを継続して使用する場合は、Amber20 の部分を Amber20/製品バージョン に変更してください。

- **Amber の特定バージョンの削除**

削除対象のバージョンを module load で指定している場合、変更日時以降 Amber が利用できなくなります。module load の設定を変更して別のバージョンを使用してください。

## 4. 問合せ方法

「富岳」固有の内容については富岳サポートにお問合せください。

Amber に関する一般的な内容については、<https://ambermd.org/Contact.php> にお問合せください。