

iDove

博客园 首页 新随笔 联系 订阅 管理

搭建高性能计算环境（五）、应用软件的安装之Amber12

应用软件通常安装在/opt目录下，这样系统中的各个用户都能方便使用，下面的软件都将安装到/opt目录。

- 1，上传需要的软件包Amber12.tar.gz、AmberTools13.tar.bz2、Amber12\_GPU\_Benchmark\_Suite.tar.gz。
- 2，进入/opt目录，解压缩AmberTools、Amber到当前目录。

```
tar xvf ~/AmberTools13.tar.bz2
tar xvf ~/Amber12.tar.gz
```

- 3，在线更新，打补丁(需要联网)

```
cd /opt/amber12
export AMBERHOME=/opt/amber12/
./update_amber --update
```

若出现提示：

```
updater.py has found a patch to itself... I am quitting now so
future updates will apply with the fixed script.

Run this script again to get all updates.
```

则再次运行 ./update\_amber --update，直到所有补丁更新完毕。

- 4，安装串行版本

```
make clean
./configure intel
make install
make test （测试，可能有几项测试提示失败，没关系）
```

- 5，安装并行版本

```
make clean
./configure --mpi intel
make install
export DO_PARALLEL='mpirun -np 4'
make test （测试，可能有几项测试提示失败，没关系）
```

- 6，安装GPU版本（单GPU）

```
make clean
./configure -cuda intel
make install
make test.cuda （测试，可能有几项测试提示失败，没关系）
```

- 7，安装GPU版本（多GPU）

```
make clean
./configure -cuda --mpi intel
make install
export DO_PARALLEL='mpirun -np 2'
cd test
./test_amber_cuda_parallel.sh （测试，可能有几项测试提示失败，没关系）
```

公告

昵称: iDove  
园龄: 1年9个月  
粉丝: 5  
关注: 1  
+加关注

< 2016年9月 >						
日	一	二	三	四	五	六
28	29	30	31	1	2	3
4	5	6	7	8	9	10
11	12	13	14	15	16	17
18	19	20	21	22	23	24
25	26	27	28	29	30	1
2	3	4	5	6	7	8

搜索

找找看

谷歌搜索

常用链接

我的随笔  
我的评论  
我的参与  
最新评论  
我的标签

我的标签

HPC(6)  
md(3)  
linux(2)  
lammps(1)  
mpi(1)  
MS(1)  
ssh(1)  
vasp(1)  
分子动力学(1)  
量化计算(1)  
更多

随笔分类

Hadoop  
HPC(9)  
Linux(5)

8, 设置环境变量, 需要重新登陆后生效。

在/etc/profile文件末尾添加如下行:

```
export AMBERHOME=/opt/amber12
export PATH=$AMBERHOME/bin:$PATH
```

9, 运行测试算例, 验证正确安装

解压缩Amber12\_GPU\_Benchmark\_Suite.tar.gz

cd Amber\_GPU\_Benchmark\_Suite/PME/Cellulose\_production\_NVE

使用CPU版测试:

mpirun -np 20 \$AMBERHOME/bin/pmemd.MPI -O -i mdin -o mdout -p prmtop -c inpcrd

耗时: 2856秒, ns/day:0.61。

使用单GPU版测试:

\$AMBERHOME/bin/pmemd.cuda -O -i mdin -o mdout -p prmtop -c inpcrd

耗时: 332秒, ns/day:5.22。

使用多GPU版测试:

mpirun -np 2 \$AMBERHOME/bin/pmemd.cuda.MPI -O -i mdin -o mdout -p prmtop -c inpcrd

耗时: 278秒, ns/day:6.20。

附软件下载链接 (仅供测试使用):

链接: http://pan.baidu.com/s/1jG87CXK 密码: ljp7

分类: HPC

标签: HPC, md, amber, 分子动力学

好文要顶

关注我

收藏该文

iDove

关注 - 1

粉丝 - 5

+加关注

« 上一篇: 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP

» 下一篇: 搭建高性能计算环境 (六)、应用软件的安装之lammps

posted @ 2014-11-19 10:36 iDove 阅读(529) 评论(0) 编辑 收藏

刷新评论 刷新页面 返回顶部

注册用户登录后才能发表评论, 请 登录 或 注册, 访问网站首页。

- 【推荐】50万行VC++源码: 大型组态工控、电力仿真CAD与GIS源码库
- 【活动】硅谷IT教育平台Udacity邀请你来免费上课
- 【推荐】移动直播百强八成都在用融云即时通讯云
- 【推荐】报表开发有捷径: 快速设计轻松集成, 数据可视化和交互
- 【推荐】网易云信-一天开发一个微信, 独创1对1技术顾问让开发加速



- 最新IT新闻:
- 张旭豪最新内部讲话: 饿了么怎么看友 (he) 商 (bing) ?
  - 携程发行7.5亿美元可转债及2250万股美国存托凭证
  - 通用电气斥资14亿美元收购欧洲两家3D打印公司

随笔档案

2014年11月 (10)

最新评论

1. Re:搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP  
非常感谢楼主的详细安装信息, 按照楼主的方法成功的安装了MS, 但是在编译VSAP时报错。报错信息如下: ./preprocess base.f90 - DHOST=\"LinuxIFC\" -DCACHE.....  
--安风琴
2. Re:搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP  
非常感谢楼主, 我找了好久, 没想到楼主这里写的这么详细! 一定要顶上去!!  
--huoxing487
3. Re:搭建高性能计算环境 (一)、Linux操作系统的安装和配置  
博主, 你真辛苦, 这里的10篇笔记对我们做计算的人来说, 是极大的帮助。  
只是第一, 二篇的图片不能显示。  
--coffeetan

阅读排行榜

1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(989)
2. 搭建高性能计算环境 (三)、安装intel编译器和mpi(909)
3. 搭建高性能计算环境 (九)、应用软件的安装之gaussian 09(596)
4. 搭建高性能计算环境 (八)、应用软件的安装之gromacs(565)
5. 搭建高性能计算环境 (五)、应用软件的安装之Amber12(528)

评论排行榜

1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(2)
2. 搭建高性能计算环境 (一)、Linux操作系统的安装和配置(1)

推荐排行榜

1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(1)
2. 搭建高性能计算环境 (十)、应用软件的安装之Wien2k(1)
3. 搭建高性能计算环境 (九)、应用软件的安装之gaussian 09(1)

- 百度否认与新美大进行合并谈判 从未聘请华兴资本
  - 腾讯昨日成亚洲市值最高公司，今日股价继续上涨成全球十大市值公司
- » 更多新闻...



**最新知识库文章:**

- 程序猿媳妇儿注意事项
  - 可是姑娘，你为什么要编程呢？
  - 知其所以然（以算法学习为例）
  - 如何给变量取个简短且无歧义的名字
  - 编程的智慧
- » 更多知识库文章...

Copyright ©2016 iDove