

Amber



- - Opis
 - Verzije
 - Službena dokumentacija
 - Primjeri
 - Napomene
 - CPU
 - MPI
 - GPU
 - Single GPU
 - Multi GPU

Opis

Amber je računalno-kemijska aplikacija za molekulska dinamiku (MD), a prvenstveno se koristi za simulacije makromolekula.

Amber se prvenstveno temelji na klasičnoj mehanici, što znači da koristi jednadžbe gibanja klasične mehanike za izračunavanje kretanja molekule i njihovih segmenata. MD simulacije mogu pružiti informacije o ponašanju i svojstvima molekula, poput njihovih konformacija, energija i interakcija s drugim molekulama.

Amber je komercijalna aplikacija, a podržava **hibridnu paralelizaciju, MPI + OpenMP**, kao i upotrebu grafičkih procesora koji značajno ubrzavaju MD izračune.

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Paralelizacija	Supek	Padobran
22	scientific/amber/22-gnu	CPU	MPI + OpenMP	✓	✓
22	scientific/amber/22-cuda	GPU + CPU	MPI + OpenMP	✓	✗

Službena dokumentacija

- <https://ambermd.org/doc12/Amber22.pdf>
- <https://ambermd.org/tutorials/>

Primjeri

Napomene

CPU

MPI

U primjeru niže, aplikaciji će se dodijeliti 16 CPU jezgara.

PBS skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=16:mem=500mb
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/amber/22-gnu

mpiexec sander.MPI -A -i md.mdin -p 4LYT.parm7 -c
4LYT.heat.rst7 -cpin 4LYT.cpin -o 4LYT.equil.mdout
-cpout 4LYT.equil.cpout -r 4LYT.equil.rst7 -x 4LYT.
equil.nc -cpresrt 4LYT.equil.cpin
```

GPU

Aplikaciju možete paralelizirati korištenjem jednog ili više grafičkih procesora.

Single GPU

U primjeru niže, aplikaciji će se dodijeliti 1 GPU i 1 CPU jezgra.

PBS skripta

```
#PBS -q gpu
#PBS -l select=1:ngpus=1:ncpus=1:mem=2gb

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/amber/22-cuda

pmemd.cuda -O -i md.in -p RAMP1.prmtop -c
RAMP1_eq7.rst7 -ref RAMP1_eq7.rst7 -o RAMP1_md.out
-r RAMP1_md.rst7 -x RAMP1_md.nc
```

Multi GPU

U primjeru niže, aplikacija će stvoriti 2 MPI procesa, pri čemu će se svakom MPI procesu dodijeliti 1 GPU i 1 CPU jezgra.



Supek

Podrazumijevano PBS ponašanje je „slobodno“ razmještanje *chunkova* po slobodnim čvorovima.

Zbog aktualnog **cray-pals** buga, trenutno je ograničen broj poslova koji se mogu širiti van čvora kad koriste Cray-ev **mpie xec**. Ako Vaš posao prijeđe taj limit te proširi svoje MPI procese na druge čvorove, prekinut će se.

Kako bi sigurno izbjegli bug, potrebno je sve MPI procese smjestiti na isti čvor. Najjednostavniji način je korištenjem opcije:

```
#PBS -l place=pack
```



Padobran

U slučaju izvođenja na računalnom klasteru Padobran, aplikaciju je potrebno zadržati u granicama jednog čvora, dodavanjem opcije:

```
#PBS -l place=pack
```

PBS skripta

```
#PBS -q gpu
#PBS -l select=2:ngpus=1:ncpus=1:mem=2gb
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/amber/22-cuda

mpiexec pmemd.cuda.MPI -O -i md.in -p RAMP1.prmtop
-c RAMP1_eq7.rst7 -ref RAMP1_eq7.rst7 -o RAMP1_md.
out -r RAMP1_md.rst7 -x RAMP1_md.nc
```