



Universidade Estadual de Feira de Santana



Tutorial de Instalação do AmberTools usando MPI

Feira de Santana - BA

Agosto, 2015

## 1 Introdução

Tutorial criado por Lucas Santana, estudante da Universidade Estadual de Feira de Santana e bolsista do Laboratório de Computação de Alto Desempenho, com o objetivo de orientar como se instala a ferramenta AmberTools usando MPI[1].

O conteúdo deste tutorial foi criado para fins de pesquisa e pode ser usado livremente desde que citada a fonte. O LaCAD não se responsabiliza pelo uso dessas informações.

## 2 Passos do tutorial

### 2.1 Download do Amber

O pacote do Amber está disponível em <http://ambermd.org/>

### 2.2 Instalar bibliotecas necessárias

```
$ yum install gcc gcc-gfortran gcc-c++ flex tcsh zlib-devel bzip2-devel libXt-devel  
$ devel libXdmcp-devel mpich mpich-devel
```

### 2.3 Decomprimir pastas

```
$ tar -vxf AmberTools12.tar.bz2  
$ tar -vxf Amber12.tar.bz2
```

### 2.4 Acessar o Diretório

```
$ cd amber12
```

### 2.5 Definir variáveis de ambiente

É recomendado que as variáveis sejam definidas no ambiente do usuário dentro do arquivo de ambiente do usuário (`~/.bashrc`).

```
$ MPI_HOME=Diretorio onde o MPI esta em seu sistema  
$ AMBERHOME=Diretorio onde o AMBER esta  
$ LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:$MPI_HOME/lib  
$ PATH=$MPI_HOME/bin:$AMBERHOME/exe:$PATH  
$ export AMBERHOME MPI_HOME LD_LIBRARY_PATH PATH  
$ export LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:$AMBERHOME/lib
```

### 2.6 Compilando o Amber

```
$ ./configure --mpi gnu
```

### 2.7 Instalação

```
$ make install
```

## 2.8 Testando instalação

```
$ export DO_PARALLEL="mpirun -np 16"  
$ make test
```

## Referências

- [1] Pacheco, P., *An Introduction to Parallel Programming*, 1ed, Burlington: Morgan Kaufmann, 2011.