



# Amber18 ユーザーマニュアル



# 目次

1	Amber18 について .....	2
2	Amber18 インストール概要 .....	3
3	Amber18 コマンド .....	4
4	Amber18 実行例 .....	6
4.1	シリアル(1CPU コア)の実行例.....	6
4.2	MPI 並列の実行例.....	7
5	既知の問題点 .....	8
A.1	HPC システムズ お問い合わせ先 .....	9

# 1 Amber18 について

---

Amber18はカリフォルニア大学等のグループが開発する分子動力学シミュレーションプログラムのパッケージです。

Amber18を使用するには開発元との間でライセンス契約が必要です。契約の内容は以下 URL をご参照下さい。

<http://ambermd.org/amber18.license.html>

Amber18のパッケージは [ambermd.org](http://ambermd.org) のサイトからダウンロードして入手します。パッケージの入手方法等については契約時に開発元より Eメール等で案内が届きますので、そちらをご参照下さい。

Amberの最新版である Amber18 のインストールをする際、AmberTools18 のパッケージが必要です。2019年4月に AmberTools 19 リリースされ、AmberTools18 に代り、Amber18 で使用出来るようになりました。そこで、AmberTools19 も合わせてインストールをしてあります。AmberTools19 は [ambermd.org](http://ambermd.org) のサイトの下記 URL でユーザー情報を登録することで無償使用することができます。

<http://ambermd.org/GetAmber.php#ambertools>

本マニュアルは Amber18 のインストール概要とジョブの実行方法等をご案内します。Amber18 の詳細については Amber18 (<http://ambermd.org/AmberMD.php>)の公式サイトをご覧ください。

## 2 Amber18 インストール概要

Amber18 と AmberTools19 は以下ディレクトリにインストールをしています。

パッケージ	ディレクトリ
Amber18	/usr/local/amber18
AmberTools19	/usr/local/amber18/AmberTools
Amber18 の 適用済みのパッチ	/usr/local/amber18/.patches/ Amber18_Applied_Patches
AmberTools19 の 適用済みのパッチ	/usr/local/amber18/.patches/ AmberTools19_Applied_Patches

Amber18 と AmberTools19 はソースコードで配布されています。Amber18 のインストールの際は以下コンパイラを使用してビルドを行っています。また、Amber18 および AmberTools19 では、バグなどの fix があつた際、開発陣よりパッチがリリースされます。適用したパッチに関しては、上記、表の各適用済みパッチのディレクトリにパッチが格納されていますので、詳細はそちらをご確認下さい。

パッケージ	ディレクトリ
Intel Parallel Studio XE 2019 Composer Edition (19.0.5)	/opt/intel/psxe2019/ parallel_studio_xe_2019.5.281
Intel Math Kernel Library	/opt/intel/psxe2019/mkl
Intel MPI 2018 update 4	/opt/intel/psxe2018/impi/2018.4.274

開発陣の作成したソース付属のテストをシリアル、MPI 並列で実行し、テストを全てパスする事を確認しました。rism3d.snglpnt.MPI は、Intel MPI ではビルドされない仕様となっていますが、利便性を考え、当社独自の手法でビルドし、MPI 並列で動作し、テストをパスする事を確認してあります。

Amber18 の環境設定はインストールの際に、設定してあります。各ユーザーのホームディレクトリのファイルで行われています。tcsh をご使用の場合は ~/.cshrc、bash をご使用の場合は ~/.bashrc ファイル内で /home/.common 以下に用意した Amber18 の環境設定スクリプトを実行します。環境変数 AMBERHOME をセットし、bash の場合は、amber.sh、tcsh の場合は amber.csh を実行しています。

- AMBERHOME : /usr/local/amber18

## 3 Amber18 コマンド

---

Amber18のコマンドについては Amber18 公式サイト の以下 URL にマニュアルがありますので、詳しくはそちらをご覧ください。

<http://ambermd.org/doc12/Aamber19.pdf>

以下は主に使用するコマンドと、その説明について Amber18 公式サイト より抜粋したものです。

- **sander**

sander is the basic energy minimizer and molecular dynamics program. This program relaxes the structure by iteratively moving the atoms down the energy gradient until a sufficiently low average gradient is obtained. The molecular dynamics portion generates configurations of the system by integrating Newtonian equations of motion. MD will sample more configurational space than minimization, and will allow the structure to cross over small potential energy barriers. Configurations may be saved at regular intervals during the simulation for later analysis, and basic free energy calculations using thermodynamic integration may be performed. More elaborate conformational searching and modeling MD studies can also be carried out using the sander module. This allows a variety of constraints to be added to the basic force field, and has been designed especially for the types of calculations involved in NMR, Xray or cryo-EM structure refinement.

- **pmemd**

pmemd is a version of sander that is optimized for speed and for parallel scaling; the pmemd.cuda variant runs on GPUs. The name stands for “Particle Mesh Ewald Molecular Dynamics,” but this code can now also carry out generalized Born simulations. The input and output have only a few changes from sander.

- **nab**

(Nucleic Acid Builder) is a language that can be used to write programs to perform non-periodic simulations, most often using an implicit solvent force field.

- **xleap**

LEaP is the primary program to create a new system in Amber, or to modify existing systems. It is available as the command-line program tleap or the GUI xleap. It combines the functionality of prep, link, edit and parm from much earlier versions of Amber.

- **antechamber**

antechamber is the main program to develop force fields for small organic molecules (e.g., drugs, modified amino acids) using a version of the general Amber force field (GAFF). These can be used directly in LEaP, or can serve as a starting point for further parameter development.

- **cpptraj**

cpptraj is the main trajectory analysis utility (written in C++) for carrying out superpositions, extractions of coordinates, calculation of bond/angle/dihedral values, atomic positional fluctuations, correlation functions, analysis of hydrogen bonds, etc.

- **MMPBSA.py**

MMPBSA.py is a python script that automates energy analysis of snapshots from a molecular dynamics simulation using ideas generated from continuum solvent models. (There is also an older perl script, called mm\_pbsa.pl, that has similar functionality.)

## 4 Amber18 実行例

### 4.1 シリアル(1CPU コア)の実行例

sander の実行例

```
$ sander -O -i mdin -o mdout -p prmtop -c inpcrd -r restrt
```

pmemd の実行例

```
$ pmemd -O -i mdin -o mdout -p prmtop -c inpcrd -r restrt
```

sander・pmemd の実行ファイルは以下オプションがあります。

- -O 出力ファイルを全て上書き
- -i sander のオプションを記述した入力ファイル名を指定。デフォルトは "mdin"
- -o 出力ファイル名を指定。デフォルトは、"mdout"
- -p パラメーター／トポロジーファイル名を指定。デフォルトは "prmtop"
- -c 計算に使用する出発座標ファイル名の指定。デフォルトは "inpcrd"
- -r 構造最適化あるいは MD 計算の最終座標ファイル名を指定。デフォルトは "restrt"
- -ref 座標の拘束オプションが入力ファイル中で指定されている場合の参照座標ファイル名を指定。デフォルトは "refc"
- -x 分子動力学計算を行った場合のトラジェクトリーファイル名を指定。デフォルトは "mdcrd"
- -v 分子動力学計算を行った場合のベロシティファイル名を指定。デフォルトは "mdvel"
- -e 分子動力学計算を行った場合のエネルギーの要約ファイル名を指定。デフォルトは "mden"
- -inf 構造最適化あるいは MD 計算の各ステップが出力ファイルに書き込まれる毎に、要約が出力されるファイル名を指定。シミュレーションの進行状況をチェックするのに使用。デフォルトは "mdinfo"

## 4.2 MPI 並列の実行例

実行ファイルに `.MPI` の拡張子があるものは MPI での並列実行が可能です。`-np` 以降に並列数を指定します。以下は 16CPU コアでの例です。MPI 並列での実行時のオプションはシリアルと同様です。

### sander.MPI の実行例

```
$ mpirun -np 16 $AMBERHOME/bin/sander.MPI -O -i mdin -o mdout -p  
prmtop -c inpcrd -r restrt
```

### pmemd.MPI の実行例

```
$ mpirun -np 16 $AMBERHOME/bin/pmemd.MPI -O -i mdin -o mdout -p prmtop  
-c inpcrd -r restrt
```

※ `mpirun` 以降の実行ファイルは絶対パスで指定する必要があります。実行ファイルがあるディレクトリにパスが通っていても同様です。



## 5 既知の問題点

---

AmberTools 19 には、Intel Parallel Studio XE 2019 Composer Edition (19.0.5) との相性問題があります。AmberTools の `libsander` を使用する `sander` API のテストにおいて、C、C++、Fortran で書かれたコードと `libsander.so` を使用するテストの一部でセグメンテーションフォルトする事が確認されました。この現象は、コンパイラバージョン 18 でビルドした `libsander.so` を 19.0.5 のライブラリ環境で使用する事で回避されました。また、同じソースでビルドされる `sander.MPI` の動作に問題はありませんでした。この事から、インテルコンパイラのライブラリのバグ等の問題ではなく、`libsander.so` を作成する際のコンパイラとの相性と考えられます。

そこで、今回の Amber 18 セットアップ手法においては、以下の方法を行いました。`libsander.so` のみ 18.0.2 で作成し、これと 19.0.5 でビルドされた `libsander.so` を置き換えてあります。この `libsander.so` が 19.0.5 のライブラリとリンクして問題無くテストをパスする事を確認してあります。

# 付録 A

---

## A.1 HPC システムズ お問い合わせ先



弊社ホームページ [http://www.hpc.co.jp/support\\_index.html](http://www.hpc.co.jp/support_index.html)

サポート案内やお問い合わせの多い内容など様々な情報を掲載しております。  
是非ご活用ください。

### HPC システムズ株式会社

〒108-0022 東京都港区海岸 3-9-15 LOOP-X 8 階

### HPC 事業部



【営業】 03-5446-5531    【サポート】 03-5446-5532

お電話によるサポート受付は祝日、弊社指定休日を除く月曜日から金曜日の 9:30～17:30  
とさせていただきます。



【FAX】 03-5446-5550



【電子メール】 [hpcs\\_support@hpc.co.jp](mailto:hpcs_support@hpc.co.jp)