

Gromacs 4.5.5 for UV2000

webページ

<http://www.gromacs.org/>

バージョン

Gromacs 4.5.5

ビルド環境

- Intel Compiler 13.1.1
- MPT 2.0.7

ビルドに必要なファイル

gromacs-4.5.5.tar.gz

ビルド手順

```
#!/bin/csh -f
umask 022
set file_gromacs=/home/users/${USER}/build/gromacs455/gromacs-4.5.5.tar.gz
set work=/work/users/${USER}
cd ${work}
rm -rf ${work}/gromacs455
if (-d gromacs-4.5.5) then
  mv gromacs-4.5.5 gromacs-4.5.5-erase
  rm -rf gromacs-4.5.5-erase &
endif
tar xzf ${file_gromacs}
cd gromacs-4.5.5
source /opt/intel/composer_xe_2013/mkl/bin/mklvars.csh intel64
setenv CC icc
setenv CFLAGS "-O3 -ip -xHost -mkl"
setenv LIBS "-mkl"
setenv CXX icpc
setenv CXXFLAGS "-O3 -xHost"
./configure --enable-double --disable-la-files --enable-mpi --with-fft=mkl --with-external-blas --with-external-lapack --with-gsl --prefix=/local/apl/uv/gromacs455
make -j12
make install
```