

NBO-7.0.2 for LX

ウェブページ

<http://nbo7.chem.wisc.edu/>

バージョン

7.0.2

ビルド環境

- ▶ Intel Compiler 18.0.2.199
- ▶ Intel MKL 2018 Update 2

ビルドに必要なファイル

- ▶ nbo7.0-src.tar.gz

ビルド手順

```
#!/bin/csh -f
umask 022
set file_nbo=/home/users/${USER}/build/nbo702/nbo7.0-src.tar.gz
set prefix=/local/apl/lx/nbo702
#-----
if (-e $prefix/bin) then
echo "Remove $prefix to be clean."
exit 1
endif
if (! -d $prefix) then
echo "Create $prefix before build."
exit 1
endif
cd $prefix
tar xf $file_nbo
mv nbo7/* .
rmdir nbo7
sed -i "s/LenBuf=2048/LenBuf=10000/" src/g16nbo/utils.F
sed -i 's/^FC = .* /FC = ifort/ Make.config
sed -i 's/^CC = .* /CC = icc/ Make.config
sed -i "s/^NBODIR = .* /NBODIR = \local/apl/lx/nbo702/ Make.config
sed -i 's/^LAPACK = .* /LAPACK = true/ Make.config
sed -i 's/^LAPACKLIB = .* /LAPACKLIB = -mkl/ Make.config
sed -i 's/^BLAS = .* /BLAS = true/ Make.config
sed -i 's/^BLASLIB = .* /BLASLIB = -mkl/ Make.config
make
sed -i "s/^setenv BINDIR .* /setenv BINDIR \local/apl/lx/nbo702/bin/" bin/gaunbo6
sed -i "s/^setenv BINDIR .* /setenv BINDIR \local/apl/lx/nbo702/bin/" bin/gaunbo7
sed "s/^setenv GAUNBO g09nbo/setenv GAUNBO g16nbo/" bin/gaunbo6 > bin/gaunbo6-g16
sed "s/^setenv GAUNBO g09nbo/setenv GAUNBO g16nbo/" bin/gaunbo7 > bin/gaunbo7-g16
mv bin/gaunbo6 bin/gaunbo6-g09
mv bin/gaunbo7 bin/gaunbo7-g09
chmod 755 bin/gaunbo6-g16
chmod 755 bin/gaunbo7-g16
chmod 700 src
chmod 600 bin/*.[Fao]
```

注意

- ▶ ファイルは /local/apl/lx/nbo702 以下にインストールされています。