

Gromacs 2016.5 for LX (intel compiler)

ウェブページ

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

バージョン

2016.5

ビルド環境

- Intel Compiler 2018.2.199
- Intel MKL 2018 Update 2
- Intel MPI 2017.3.196
- cmake 2.8.12.2

ビルドに必要なファイル

- gromacs-2016.5.tar.gz
- (regressiontests-2016.5.tar.gz; テストセット)

ビルド手順

```
#!/bin/sh

VERSION=2016.5
INSTALL_PREFIX=/local/apl/lx/gromacs2016.5

BASEDIR=/home/users/${USER}
GROMACS_TARBALL=${BASEDIR}/gromacs-${VERSION}.tar.gz
#REGRESSION=${BASEDIR}/regressiontests-${VERSION} # unpacked

WORKDIR=/work/users/${USER}
#export OMP_NUM_THREADS=1

#-----
umask 0022

cd ${WORKDIR}
if [ -d gromacs-${VERSION} ]; then
  mv gromacs-${VERSION} gromacs_erase
  rm -rf gromacs_erase &
fi

tar xzf ${GROMACS_TARBALL}
cd gromacs-${VERSION}

# compiler setting
export CC=icc
export CXX=icpc
export F77=ifort
export F90=ifort
export FC=ifort

# single precision, no MPI
mkdir rccs-s
cd rccs-s
cmake .. \
  -DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \
  -DCMAKE_VERBOSE_MAKEFILE=ON \
  -DGMX_MPI=OFF \
  -DGMX_GPU=OFF \
  -DGMX_DOUBLE=OFF \
  -DGMX_THREAD_MPI=ON \
```

```
-DGMX_FFT_LIBRARY=mkl \  
-DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=OFF  
make -j12 && make install  
cd ..  
  
# double precision, no MPI  
mkdir rccs-d  
cd rccs-d  
cmake .. \  
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \  
-DCMAKE_VERBOSE_MAKEFILE=ON \  
-DGMX_MPI=OFF \  
-DGMX_GPU=OFF \  
-DGMX_DOUBLE=ON \  
-DGMX_THREAD_MPI=ON \  
-DGMX_FFT_LIBRARY=mkl \  
-DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=OFF  
make -j12 && make install  
cd ..  
  
# compiler setting for MPI versions  
export CC=mpiicc  
export CXX=mpiicpc  
export F77=mpiifort  
export F90=mpiifort  
export FC=mpiifort  
  
# single precision, with MPI  
mkdir rccs-mpi-s  
cd rccs-mpi-s  
cmake .. \  
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \  
-DCMAKE_VERBOSE_MAKEFILE=ON \  
-DGMX_MPI=ON \  
-DGMX_GPU=OFF \  
-DGMX_DOUBLE=OFF \  
-DGMX_THREAD_MPI=OFF \  
-DGMX_FFT_LIBRARY=mkl \  
-DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=OFF  
make -j12 && make install  
cd ..  
  
# double precision, with MPI  
mkdir rccs-mpi-d  
cd rccs-mpi-d  
cmake .. \  
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=${INSTALL_PREFIX} \  
-DCMAKE_VERBOSE_MAKEFILE=ON \  
-DGMX_MPI=ON \  
-DGMX_GPU=OFF \  
-DGMX_DOUBLE=ON \  
-DGMX_THREAD_MPI=OFF \  
-DGMX_FFT_LIBRARY=mkl \  
-DREGRESSIONTEST_DOWNLOAD=OFF  
make -j12 && make install  
cd ..
```

注意

- gcc版の方が高速な場合も有り得るため、一度ご自身の計算条件で速度比較を行うことをお勧めします。