Suporte (GridUNESP) - Problema #106
Instalação do Gromacs

24 Apr 2010 11:52 - Ney Lemke

Status:	Resolvida	**Start date:**	01 Mar 2010
Priority:	Normal	**Due date:**	30 Apr 2010
Assignee:	Ney Lemke	**% Done:**	0%
Category:		**Estimated time:**	20.00 hours
Target version:			

Description

O Gromacs deve ser instalado e configurado.

History

#1 - 24 Apr 2010 12:27 - Ney Lemke

A instalação do Gromacs seguiu basicamente os seguintes passos:

./configure --enable-threads --enable-float --with-fft=fftw2 --enable-mpi
make
make install

Além disso tivemos que instalar a biblioteca fftw2 nos nodos.
A instalação também implicou em uma reconfiguração da instalação do
Condor, pois a configuração não conseguia determinar os nodos
onde os processos mpi executavam.

Para facilitar a vida do usuário escrevemos uma página no Twiki:

https://www.ncc.unesp.br/twiki/bin/view/GuiaUsuario/GromacsSubmit

com detalhes sobre o processo de submissão.

Além disso escrevemos uma pequena digressão sobre a otimização de jobs condor mpi.

#2 - 30 Apr 2010 10:43 - Jadir da Silva

- Project changed from NCC to Suporte (GridUNESP)

#3 - 30 Apr 2010 17:19 - Ney Lemke

- Status changed from Nova to Resolvida