Suporte (GridUNESP) - Suporte #224
Atualização do Gromacs

18 Nov 2010 11:03 - Gabriel Winckler

Status:	Resolvida	**Start date:**	18 Nov 2010
Priority:	Baixa	**Due date:**	
Assignee:	Gabriel Winckler	**% Done:**	90%
Category:		**Estimated time:**	0.00 hour
Target version:			

Description

De *asaraujo*:

"Vi na documentação de vocês que a versão atual do Gromacs instalado no grid é a 4.0.7. Existe a possibilidade ou previsão do upgrade desse programa para a versão mais atual que é a 4.5.3?"

Ney: Podemos atualizar? (caso sim, transfira o bug para mim)

History

#1 - 30 Nov 2010 11:03 - Gabriel Winckler

- Status changed from Nova to Em andamento

- Assignee changed from Ney Lemke to Carlos Moreira

- Priority changed from Normal to Baixa

Em conversa com o Ney, ele concorda com a atualização do Gromacs, desde que seja em paralelo (mantendo a versão anterior).

Lembrara de compilar as 2 versões (precisão simples e dupla).

Cadu, estou te encaminhando o ticket. No ITS tem a instalação da versão anterior do Gromacs.

#2 - 13 May 2011 15:43 - Gabriel Winckler

- Assignee changed from Carlos Moreira to Gabriel Winckler

- % Done changed from 0 to 90

Acabei de compilar a nova versão 4.5.4 e testar.
Também alterei o go para suportar o modo SMP.

Estou aguardando para tornar a versão padrão.

As instruções de compilação estão no applications.txt, mas reproduzo aqui:

```
export CC=icc
export F77=ifort
export MPICC=mpiicc

./configure --enable-threads --enable-float --without-x
--prefix=/opt/GridUNESP/gromacs/gromacs-4.5.4
make -j6
```

```
make install

./configure --enable-threads --enable-float --without-x
--prefix=/opt/GridUNESP/gromacs/gromacs-4.5.4 --enable-mpi
--program-suffix=_mpi
make -j6 mdrun
make install-mdrun

make distclean

./configure --enable-threads --enable-double --without-x
--prefix=/opt/GridUNESP/gromacs/gromacs-4.5.4
make -j6
make install

./configure --enable-threads --enable-double --without-x
--prefix=/opt/GridUNESP/gromacs/gromacs-4.5.4 --enable-mpi
--program-suffix=_mpi_d
make -j6 mdrun
```

#3 - 13 May 2011 18:18 - Gabriel Winckler

- Status changed from Em andamento to Resolvida

Atualização liberada.