Suporte (GridUNESP) - Suporte #225
Instalação do NAMD

18 Nov 2010 11:05 - Gabriel Winckler

Status:	Resolvida	**Start date:**	18 Nov 2010
Priority:	Baixa	**Due date:**	
Assignee:	Gabriel Winckler	**% Done:**	0%
Category:		**Estimated time:**	0.00 hour
Target version:			

Description

de *asaraujo*:

"Eu gostaria de perguntar algumas coisas referentes ao uso do grid para
simulações de Dinâmica Molecular (DM).

Eu gostaria de usar o NAMD (outro programa free para DM)"

Ney: Como você avalia a demanda desse programa por outros usuários e grupos de pesquisa? Devemos instala-lo globalmente?

History

#1 - 30 Nov 2010 11:01 - Gabriel Winckler

- Status changed from Nova to Em andamento

- Assignee changed from Ney Lemke to Gabriel Winckler

- Priority changed from Normal to Baixa

Em conversa com o Ney, ele concorda com a instalação global do software.

#2 - 17 Dec 2010 14:24 - Gabriel Winckler

Realizei a instalação da versão 2.7 para sistemas IB no diretório /opt/NAMD/2.7.

Estou realizando alguns testes, utilizando os inputs encontrados em: http://www.psc.edu/general/software/packages/namd/examples/index.php

alanin.go

```
CASE="alanin"
HOSTS=12
QUEUE="short"

EXEC="/opt/NAMD/2.7/charmrun"
TRANSFER_EXEC=false
ARGS="+p $HOSTS ++mpiexec /opt/NAMD/2.7/namd2 $CASE.namd"
MPI=true
LARGE_FILES=true

INPUT="$CASE.namd $CASE.pdb $CASE.psf $CASE.params"
OUTPUT="$CASE.coor $CASE.vel $CASE.xsc"
```

#3 - 07 Apr 2011 11:20 - Gabriel Winckler

- Status changed from Em andamento to Resolvida

Os testes com o NAMD funcionaram.

Ele foi incorporado ao go.