Suporte (GridUNESP) - Problema #617
Atualizar o ASE

15 May 2012 11:48 - Gabriel Winckler

Status:	Resolvida	**Start date:**	15 May 2012
Priority:	Alta	**Due date:**	
Assignee:	Gabriel Winckler	**% Done:**	0%
Category:		**Estimated time:**	0.00 hour
Target version:			

Description

Do Leandro <lmoreira@fc.unesp.br>

> em Fevereiro desse ano foi lançada uma nova versão do ASE (3.6.0),
> você poderia atualizar para essa nova versão? Tem algumas ferramentas
> mais interessantes agora, que eu tentei rodar com a versão antiga e
> deu erro.

History

#1 - 25 Jul 2012 16:55 - Gabriel Winckler

- Status changed from Nova to Em andamento

- Priority changed from Normal to Alta

Foi feita a atualização.

Para isso foi necessário atualizar o numpy (1.6.2), o ase (3.6.0) e gpaw (0.9.0).

O caso de teste da versão serial funcionou, mas da paralela não. Estou revendo isso.

#2 - 25 Jul 2012 18:32 - Gabriel Winckler

- Status changed from Em andamento to Resolvida

Utilizando um dos testes distribuídos com o GPAW, o processamento paralelo funcionou.

Assim, substitui a rotina padrão pela parallel/ut_hsops.py