Suporte (GridUNESP) - Problema #867
Instalação de software: Gromacs 5.0.4

30 Mar 2015 13:24 - Gabriel Winckler

Status:	Resolvida	**Start date:**	30 Mar 2015
Priority:	Alta	**Due date:**	
Assignee:	Gabriel Winckler	**% Done:**	0%
Category:		**Estimated time:**	0.00 hour
Target version:			

Description

De Antoniel Augusto:

> Como solicitado no e-mail sobre o fim da manutenção do grid, venho reforçar meu pedido para que atualizem o Gromacs para a versão mais recente: 5.0.4.
> As duas versões encontradas no grid não suportam arquivos de versões > 5.0.

History

#1 - 01 Apr 2015 16:10 - Gabriel Winckler

```
cd /opt/gridunesp/gromacs/src/
wget ftp://ftp.gromacs.org/pub/gromacs/gromacs-5.0.4.tar.gz
tar xvzf gromacs-5.0.4.tar.gz

module load intel/compilers/2013.1
module load intel/mpi/4.1.3

mkdir build
cd build
cmake28 .. -DGMX_FFT_LIBRARY=mkl -DGMX_MPI=on -DCMAKE_C_COMPILER=mpiicc -DCMAKE_CXX_COMPILER=mpiicpc
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/opt/gridunesp/gromacs/5.0.4 -DGMX_SIMD=SSE4.1
make -j 8
make -j 8 check
make install

cmake28 .. -DGMX_FFT_LIBRARY=mkl -DGMX_MPI=on -DCMAKE_C_COMPILER=mpiicc -DCMAKE_CXX_COMPILER=mpiicpc
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/opt/gridunesp/gromacs/5.0.4 -DGMX_SIMD=SSE4.1 -DGMX_DOUBLE=on
make -j 8
make -j 8 check
make install

cmake28 .. -DGMX_FFT_LIBRARY=mkl -DCMAKE_C_COMPILER=icc -DCMAKE_CXX_COMPILER=icpc
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/opt/gridunesp/gromacs/5.0.4 -DGMX_SIMD=SSE4.1
make -j 8
make -j 8 check
make install

cmake28 .. -DGMX_FFT_LIBRARY=mkl -DCMAKE_C_COMPILER=icc -DCMAKE_CXX_COMPILER=icpc
-DCMAKE_INSTALL_PREFIX=/opt/gridunesp/gromacs/5.0.4 -DGMX_SIMD=SSE4.1 -DGMX_DOUBLE=on
make -j 8
make -j 8 check
```

make install

#2 - 01 Apr 2015 16:11 - Gabriel Winckler

- Status changed from Nova to Em andamento

#3 - 30 Apr 2015 15:19 - Gabriel Winckler

Atualizado. Testado com envio direto (via SLURM) e documentação atualizada na WIKI.

A versão mpi com erro, está executando múltiplas simulações.

#4 - 30 Apr 2015 15:34 - Gabriel Winckler

- Status changed from Em andamento to Resolvida

Resolvido. O problema estavam nos testes, que não estavam incluindo o env module com a última versão.