Suporte (GridUNESP) - Problema #87
Instalação Gamess MPI

25 Mar 2010 10:48 - Ney Lemke

Status:	Resolvida	**Start date:**	25 Mar 2010
Priority:	Normal	**Due date:**	
Assignee:	Gabriel Winckler	**% Done:**	100%
Category:		**Estimated time:**	4.00 hours
Target version:			

Description

Instalação MPI do Gamess MPI

History

#1 - 30 Apr 2010 15:00 - Gabriel Winckler

- File MeOH.inp added

#2 - 30 Apr 2010 17:56 - Gabriel Winckler

- Status changed from Nova to Resolvida

- Assignee set to Gabriel Winckler

- % Done changed from 0 to 100

- Estimated time set to 4.00

Compilar foi fácil.

O malabarismo foi mexer no script rungms.

Criei uma versão especial mpi: /opt/gamess/rungms-mpi

Um modelo de arquivo de submissão foi atualizado:

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

Files

MeOH.inp	34.5 KB	30 Apr 2010	Gabriel Winckler