Suporte (GridUNESP) - Problema #158
Compilar o Gromacs com precisão simples

15 Jul 2010 13:26 - Gabriel Winckler

Status:	Resolvida	**Start date:**	15 Jul 2010
Priority:	Normal	**Due date:**	
Assignee:	Gabriel Winckler	**% Done:**	0%
Category:		**Estimated time:**	0.00 hour
Target version:			

Description

Jorge Chahine wrote:

> *Uma outra questão, o gromacs tem um executável chamado "mdrun". Tem um outro chamado "mdrun_d" que na verdade executa o job com dupla precisão, por isso a letra "d" no final. O cluster não tem o "mdrun", só tem o mdrun_d. Ocorre que esse é muito mais lento que o mdrun.*

History

#1 - 16 Jul 2010 17:17 - Gabriel Winckler

- Status changed from Nova to Em andamento

- Assignee changed from Ney Lemke to Gabriel Winckler

Rascunho:

./configure --without-x --with-threads --prefix=/opt/gromacs-4.0.7a

./configure --without-x --with-threads --disable-float --prefix=/opt/gromacs-4.0.7a --program-suffix=_d

#2 - 01 Oct 2010 10:39 - Gabriel Winckler

- Status changed from Em andamento to Resolvida

O código foi compilado e testado.