Suporte (GridUNESP) - Suporte #165
Gromacs

22 Sep 2010 16:48 - Fernando Filho

Status:	Resolvida	**Start date:**	22 Sep 2010
Priority:	Normal	**Due date:**	
Assignee:	Gabriel Winckler	**% Done:**	0%
Category:		**Estimated time:**	0.00 hour
Target version:			

Description

Eu preciso rodar simulações usando Gromacs compilado com suporte mpi (portanto não precisa de suporte threads) e precisão simples. Já submeti três jobs no sistema, entretanto nenhum deles devolve os arquivos de saída, mesmo indicando a variável WhenToTransferOutput = ON_EXIT_OR_EVICT em meus scripts. Houve alguma mudança de variáveis que são "chamadas" na execução do executável do Gromacs? Ou devo usar algum outro executável que não /opt/gromacs/bin/mdrun_mpi ? O que devo fazer? Obrigado desde já.

History

#1 - 07 Apr 2011 11:25 - Gabriel Winckler

- Status changed from Nova to Em andamento

Fernando,

Esse é um ticket bastante antigo que infelizmente ficou "esquecido".
O suporte ao Gromacs mudou bastante, em especial com o suporte ao go.

Você ainda está com problemas para enviar as suas simulações?

Gabriel

#2 - 13 May 2011 18:20 - Gabriel Winckler

- Status changed from Em andamento to Resolvida

O suporte foi incluído a bastante tempo.

Foi testado e está funcionando na versão 4.5.4.