Suporte (GridUNESP) - Implantação #281
Instalação de software: ASE-GPAW

13 Jun 2011 15:33 - Gabriel Winckler

Status:	Resolvida	**Start date:**	13 Jun 2011
Priority:	Alta	**Due date:**	08 Jul 2011
Assignee:	Gabriel Winckler	**% Done:**	90%
Category:		**Estimated time:**	0.00 hour
Target version:			

Description

Instalar o conjunto de software ASE-GPAW para o grupo hcofases (prof. Antonio Carlos Dias Angelo <acangelo@fc.unesp.br>)

History

#1 - 05 Jul 2011 13:26 - Gabriel Winckler

- Due date set to 08 Jul 2011

#2 - 21 Sep 2011 13:01 - Gabriel Winckler

Colaboração do Leandro:

eu estive acompanhando o processo de instalação do ASE/GPAW por meio dos e-mail que voces trocaram nesses últimos tempos. Vi que estava tendo um problema de link com o mpi. Hoje eu consegui instalar na minha área de usuário do Grid o programa ASE/GPAW, e não obtive nenhum erro, claro que fiz algumas tentativas também frustadas desde a última sexta-feira (tentei usar a biblioteca acml ao invés da atlas, tentei linkar direto ao mkl, todos esses processos sem sucesso), mas finalmente rodou sem problemas a parte em paralelo. O que eu basicamente fiz foi alterar o meu arquivo gpaw/customize.py, alterando as seguintes linhas:

compiler = 'ifort'
libraries = ['gfortran','lapack','f77blas','cblas','atlas','mpi']
library_dirs = ['/opt/GridUNESP/gpaw/201107/lib']

Fiz o download do seguinte arquivo para testar se o blas/lapack estava funcionando correto (como sugerido pelos desenvolvedores do programa): https://svn.fysik.dtu.dk/projects/gpaw/trunk/gpaw/test/numpy_zdotc_graphite.py . Funcionou sem problemas. Depois, fiz os testes sugeridos na página para testar o mpi, e rodou tudo ok.

Espero que isso possa ajudar a dar prosseguimento na instalação desse programa para colocar nos outros nós do Grid.

Gostaria de aproveitar essa oportunidade para solicitar, se possível, que instale juntamente com o GPAW um outro programa que usamos que é o Dacapo (https://wiki.fysik.dtu.dk/dacapo/Installation), ele é desenvolvido no mesmo grupo de pesquisa do GPAW, portanto também roda a partir do ambiente ASE. Esse programa eu fiz a instalação dele no nosso laboratório, no entanto eu não obtive sucesso tentando instalar na minha área do Grid, ele funciona com algumas especificações exclusivas como FFTW versão 2.1.5 ou mkl (mas não consegui linkar ao mkl). Continuarei tentando por aqui. Mas se possível você dar uma ajuda, agradeço.

#3 - 21 Sep 2011 13:01 - Gabriel Winckler

Olá Gabriel,

consegui agora instalar o Dacapo também. O problema era na versão que eu estava tentando do netcdf, foi preciso instalar com uma versão mais antiga, netcdf-3.6.1, nas mais recentes deu erro (no laboratório temos instalado com a versão netcdf-4.0.1, que talvez funcione também no Grid). Você pode dar uma olhada agora para ver como passar esses programas para os demais nós do Grid para que a gente possa utilizar em paralelo?

Agradeço desde já a ajuda,

Leandro

#4 - 22 Sep 2011 20:03 - Gabriel Winckler

- Status changed from Execução to Teste

- % Done changed from 0 to 90

Instalação básica executada.
Manual incluído no Guia do Usuário.

Usuário está testando.

#5 - 07 Oct 2011 15:28 - Gabriel Winckler

- Status changed from Teste to Resolvida