Suporte (GridUNESP) - Problema #366
Instalação de software: Dacapo

23 Sep 2011 15:22 - Gabriel Winckler

Status:	Resolvida	**Start date:**	23 Sep 2011
Priority:	Normal	**Due date:**	
Assignee:	Gabriel Winckler	**% Done:**	90%
Category:		**Estimated time:**	0.00 hour
Target version:			

Description

Leandro:

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.

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)

History

#1 - 29 Sep 2011 12:03 - Gabriel Winckler

- Assignee set to Gabriel Winckler

#2 - 29 Sep 2011 12:04 - Gabriel Winckler

- Status changed from Nova to Em andamento

#3 - 07 Oct 2011 15:29 - Gabriel Winckler

- % Done changed from 0 to 90

Instalado com a ajuda do Leandro.

Aguardando um binário MPI funcionando.

#4 - 20 Oct 2011 13:44 - Gabriel Winckler

Finalmente obtivemos uma versão paralela funcional.

Os executáveis forma compilados pelo Leandro.
Seguem as informações dele:

> As opcoes basicas, que eu alterei no arquivo ~/dacapo/src/Makefile
> foram as seguintes:
>
> Usei BLAS e LAPACK padroes:
> BLASLAPACK='-L/usr/lib64/ -llapack -lblas'
>
> Exportei os caminhos para o Intel MPI:
> MPIDIR = /opt/intel/impi/3.2.1.009

MPI_LIBDIR = ${MPIDIR}/lib64
MPI_BINDIR = ${MPIDIR}/bin64
MPI_INCLUDEDIR = ${MPIDIR}/include64

INTELLINUX_MPIDIR=${MPI_LIBDIR}
INTELLINUX_MPI_INCLUDE=${MPI_INCLUDEDIR}
INTELLINUX_MPI_BINDIR=${MPI_BINDIR}

Essas 2 bibliotecas abaixo eu usei as que estavam na minha pasta,
contudo deve funcionar tambem se voce exportar os caminhos onde voce
as compilou. Acho que a compilacao deve funcionar tambem usando o FFTW
padrao, que esta nesta pasta /usr/lib64. Ja o NetCDF e um pouco mais
complicado e sempre tive problemas com a versao padrao, as versoes que
eu conheco que dao certo sao: 3.6.1, 3.6.2 e 4.0.1.
NETCDF =/
NETCDFINC =/
FFTW=/

Exportando os caminhos acima com as bibliotecas a serem utilizadas:
LIBS_intellinux= ${BLASLAPACK} ${NETCDF}/libnetcdf.a ${FFTW}/libfftw.a

E por fim as Flags que estavam dando problema. TEM que usar o
big_endian para converter os pseudo-potenciais no momento dos
calculos, caso contrario ele nao pode ler os arquivos. E a primeira
opcao, -O3, foi a que eu acabei modificando antes e estava dando o
ultimo erro, eu tinha alterado para uma opcao mais geral, que
resultava numa compilacao mais rapida.
INTELLINUX_OPT = -O3
INTELLINUX_FFLAGS = -cm -w -convert big_endian

#5 - 20 Oct 2011 14:03 - Gabriel Winckler

- Status changed from Em andamento to Resolvida