Suporte (GridUNESP) - Problema #699
DIRAC-11.0.1 se faz necessário mesmo

10 Oct 2012 11:42 - Andre Fassone Canova

Status:	Fechada	**Start date:**	10 Oct 2012
Priority:	Alta	**Due date:**	
Assignee:	Gabriel Winckler	**% Done:**	0%
Category:		**Estimated time:**	0.00 hour
Target version:			

Description

Bom dia Gabriel,

Acredito que teremos de fazer a instalação da nova versão do DIRAC mesmo, disponível em /home/alfcanova/DIRAC-11.0.1.tar.bz2.

Do mesmo modo recomendo o seguinte:

- Linkar com a MKL 64 bits da intel ---> Não usar blas, lapack ou atlas do sistema (pois endereçam apenas 32 bits).
  export MATH_ROOT=/opt/intel/mkl/10.2.2.025

- Seguintes diretivas de compilação
  ./setup --int64 -D ENABLE_LARGE_MOLECULES=1 --fc=mpiifort --cc=mpiicc --cpp=icpc
--install=????????????????????????????????

- Arquivo .diracrc, para definir reserva de memória, arquivo temporário, ambiente MPI e executáveis e arquivos de conjunto de bases.
  --mb=512
  --scratch=/tmp
  --mpiarg="-envall"
  --dirac=/opt/dirac/share/dirac/dirac.x
  --basis='/opt/dirac/share/dirac/basis:/opt/dirac/share/dirac/basis_dalton'

- Alteração no código fonte
  Encontrei um problema na hora de rodar moléculas grandes e preciso que seja feita uma alteração no arquivo e então compilado
  Arquivo: DIRAC-11.0.1/include/maxorb.h
  MXSHEL = 950, MXPRIM = 2000, MXCORB = 5000 para MXSHEL = 950, MXPRIM = 2000, MXCORB = 10000

Deste modo se puder providenciar estas alterações eu agradeço.

Grato

Related issues:

Duplicated by Suporte (GridUNESP) - Implantação # 691: DIRAC-11.0.1	**Rejeitada**	**28 Sep 2012**

History

#1 - 10 Oct 2012 16:54 - Gabriel Winckler

- Status changed from Nova to Em andamento

André,

Acabei de instalar o DIRAC novo.

Da minha rotina de testes, o teste serial funcionou, porém o paralelo (mpi), não.

Mudou algum formato no arquivo de entrada? Você imagina alguma razão para esse caso não funcionar?
Você poderia testar essa versão com alguma caso seu?

Abraço,
Gabriel

#2 - 21 Dec 2012 17:47 - Gabriel Winckler

- Status changed from Em andamento to Fechada

A nova versão (12.0) foi instalada, invalidando esse bug.