Suporte (GridUNESP) - Manutenção #866
Instalação de software: NAMD 2.10

30 Mar 2015 12:56 - Gabriel Winckler

Status:	Resolvida	**Start date:**	30 Mar 2015
Priority:	Alta	**Due date:**	
Assignee:	Gabriel Winckler	**% Done:**	0%
Category:		**Estimated time:**	0.00 hour
Target version:			

Description

de Alexandre Suman de Araujo:

> Estou escrevendo para sugerir a atualização do software NAMD: http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/
>
> A última versão estável é a 2.10.
>
> Considerando que a estrutura infiniband do grid não está disponível e que os processos são executados todos em um único nó (8 núcleos), peço a atenção para que seja instalada a versão " Linux-x86_64-multicore" que é mais rápida nesses casos.

History

#1 - 30 Mar 2015 15:31 - Gabriel Winckler

- Subject changed from Instalação de software: NAMD 2.1 to Instalação de software: NAMD 2.10

#2 - 30 Apr 2015 15:18 - Gabriel Winckler

Atualizado. Testado com envio direto (via SLURM) e documentação atualizada na WIKI.

#3 - 30 Apr 2015 15:18 - Gabriel Winckler

- Status changed from Nova to Resolvida