# Crystal

## Envio local, exemplos de scripts

Informações sobre o uso direto do cluster local estão em [[SLURM|aqui]].

### Serial

```
#!/bin/bash
#SBATCH -t 5

module load crystal
goo-job-nanny crystal < crystal-serial.inp
```

### MPI

```
#!/bin/bash
#SBATCH -t 5 -n 16 -N 2

module load crystal

cp crystal-mpi.inp INPUT
goo-job-nanny srun -n 16 Pcrystal
```

## Submissao Simplificada

{{include(SubmissaoSimplificadaCabecalho)}}

Exemplo:

```
APP=crystal
CASE=nome_do_caso
```

O sistema utilizará como arquivo de entrada nome_do_caso.inp.

Para rodar em paralelo, especifique o número de processos MPI, com a opção HOSTS:

```
APP=crystal
CASE=nome_do_caso
HOSTS=4
```

# Properties

Exemplo:

```
APP=crystal-properties
CASE=nome_do_caso
```

O sistema utilizará como arquivo de entrada nome_do_caso.inp e também copiará o nome_do_caso.f9.

{{include(SubmissaoSimplificadaRodape)}}