Dalton

Envio local, exemplos de scripts

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

SMP

```
#!/bin/bash
#SBATCH -t 3:00 -c 8 -o dalton-smp.out -e dalton-smp.err

module load dalton
dalton -omp 8 dalton-smp.dal dalton-smp.mol
```

MPI

```
#!/bin/bash
#SBATCH -t 3:00 -n 16 -o dalton-mpi.out -e dalton-mpi.err

module load dalton/mpi
dalton -N 16 dalton-mpi.dal dalton-mpi.mol
```

Submissão Simplificada

{{include(SubmissaoSimplificadaCabecalho)}}

Exemplo:

```
APP=dalton
CASE=energy_nosymm
ARGS="energy_nosymm"
QUEUE=short
```

Defaults do template:
- INPUT=$CASE.dal $CASE.mol
- OUTPUT=$CASE.*
- PROGRESS=$CASE.stdout

Parâmetros:
- CASE - Nome do caso. Define o nome de arquivos de entrada, log e saida. **Padrão:** (nome do arquivo de parâmetros, sem a extensão)
- HOSTS - Número de hosts (processos) para a execução. **Padrão:** 1 (modo serial)

{{include(SubmissaoSimplificadaRodape)}}