Dirac

Envio local, exemplos de scripts

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

Serial

```
#!/bin/bash
#SBATCH -t 5:00

module load dirac
pam --scratch=/tmp --mol=methanol.xyz --inp=hf.inp
```

SMP

```
#!/bin/bash
#SBATCH -t 5:00 -c 4

module load dirac

export OMP_NUM_THREADS=4
pam --dirac=$DIRAC_EXEC_SMP --scratch=/tmp --mol=methanol.xyz --inp=hf.inp
```

MPI

```
#!/bin/bash
#SBATCH -t 5:00 -n 16

module load dirac
pam --dirac=$DIRAC_EXEC_MPI --mpi=16 --scratch=/tmp --mol=methanol.xyz --inp=hf.inp
```

Submissa Simplificada

{{include(SubmissaoSimplificadaCabecalho)}}

Exemplo:

```
APP=dirac
CASE=nome_do_caso
INPUT="cc.inp clf.xyz"
ARGS="--mol=clf.xyz --inp=cc.inp"
PPH=8
```

Caso OUTPUT não seja declarado, o sistema salvará arquivos no formato nome_do_caso.out e nome_do_caso.tgz

Para rodar em modo serial, omita a linha HOSTS

É possível alocar diversos processos mpi, usando HOSTS (por exemplo HOSTS=32 e omitindo PPH). Porém isso implicará a utilização de um disco compartilhado, que pode ser mais lento. A opção PPH=8 alocará todos os processos na mesma máquina.

{{include(SubmissaoSimplificadaRodape)}}