LAMMPS

Envio local, exemplos de scripts

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

MPI

```
#!/bin/bash
#SBATCH -t 5 -n 4

module load lammps

goo-job-nanny srun -n 4 lmp -in in.reaxc.rdx -log lammps-mpi.log
```

Submissao Simplificada

{{include(SubmissaoSimplificadaCabecalho)}}

Exemplo:

```
APP=lammps
CASE="lammps-parallel"
INPUT="in.reaxc.rdx data.rdx ffield.reax"
ARGS="-in in.reaxc.rdx -log ${CASE}.log"
OUTPUT="${CASE}.log"

HOSTS=4
QUEUE=short
```

Defaults do template:
- ARGS=-in $INPUT
- PROGRESS=(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)}}