# QuantumEspresso

## 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 quantum-espresso
goo-job-nanny pw.x -inp quantum-espresso-serial.in
```

### MPI

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

module load quantum-espresso
goo-job-nanny srun -n 4 pw.x -npool 1 -inp quantum-espresso-mpi.in
```

## Submissão Simplificada

{{include(SubmissaoSimplificadaCabecalho)}}

Exemplo:

```
APP=quantum-espresso
CASE=case
NPOOL=1
NIMAGE=4
HOSTS=4
QUEUE=short
```

Defaults do template:
- INPUT=$CASE.in
- PROGRESS=(stdout)
- BIN=pw.x

Parâmetros:
- CASE - Nome do caso. Define o nome de arquivos de entrada, log e saida. **Padrão:** (nome do arquivo de parâmetros, sem a extensão)
- BIN - Executável a ser chamado. **Padrão:** pw.x
- HOSTS - Número de hosts (processos) para a execução. **Padrão:** 1 (modo serial)
- NPOOL - parâmetros da linha de comando para a execução paralela
- NIMAGE - parâmetros da linha de comando para a execução paralela

{{include(SubmissaoSimplificadaRodape)}}