MOPAC

Envio local, exemplos de scripts

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

```
#!/bin/bash
#SBATCH -t 5:00 -c 8

module load mopac
goo-job-nanny MOPAC2012.exe mopac.mop
```

Submissa Simplificada

{{include(SubmissaoSimplificadaCabecalho)}}

Exemplo:

```
APP=mopac
CASE=case
QUEUE=short
```

Defaults do template:
- INPUT=$CASE.moc
- OUTPUT=$CASE.*
- PROGRESS=$CASE.out

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)}}