NAMD

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

module load namd/2.10
goo-job-nanny namd2 +p4 namd-smp.namd
```

MPI

```
#!/bin/bash
#SBATCH -t 3:00 -n 16

module load namd/2.10-tcp
goo-job-nanny namd_mpi.sh namd-mpi.namd
```

Submissão Simplificada

{{include(SubmissaoSimplificadaCabecalho)}}

Exemplo:

```
APP=NAMD
CASE=nome_do_caso
HOSTS=4
```

Caso INPUT não seja declarado, o sistema utilizará nome_do_caso.namd, nome_do_caso.pdb, nome_do_caso.psf, nome_do_caso.params.

Caso OUTPUT não seja declarado, o sistema utilizará nome_do_caso.coor, nome_do_caso.vel, nome_do_caso.xsc.

{{include(SubmissaoSimplificadaRodape)}}