Siesta

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 siesta
goo-job-nanny siesta < 32_h2o.fdf
```

MPI

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

module load siesta

# If compiled with Intel MPI >= 4
#goo-job-nanny srun -n 16 siesta.mpi < ch4.fdf
# If compiled with Intel MPI < 4
goo-job-nanny mpirun -np 16 siesta.mpi < ch4.fdf
```

Submissa Simplificada

{{include(SubmissaoSimplificadaCabecalho)}}

Exemplo:

```
APP=siesta
CASE=case
QUEUE=short
```

Defaults do template:
- INPUT=$CASE.fdf
- PROGRESS=(stdout)
- OUTPUT=$CASE.*

{{include(SubmissaoSimplificadaRodape)}}