

Guia rápido de execução do SIESTA 5.4.2 no Slurm

Ambiente compartilhado com OpenMPI, PMix e execução nos nós CPU do cluster

1. Carregamento do ambiente

O ambiente do SIESTA já está configurado de forma centralizada. Em todo job Slurm, inclua a linha abaixo antes de executar o programa:

```
source /st00/programs/siesta-5.4.2/siesta-env.sh
```

O que o arquivo siesta-env.sh faz: configura automaticamente o caminho do SIESTA, o OpenMPI, as bibliotecas científicas necessárias e as variáveis de execução. Não é necessário adicionar manualmente PATH ou LD_LIBRARY_PATH.

2. Exemplo com 1 processo (modo serial prático)

Embora o executável tenha sido compilado com MPI, ao usar somente 1 tarefa ele executa com um único processo, atendendo ao uso serial do ponto de vista computacional.

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=siesta
#SBATCH --partition=filaCPU
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks=1
#SBATCH --time=01:00:00
#SBATCH --output=siesta-%j.out
#SBATCH --error=siesta-%j.err

source /st00/programs/siesta-5.4.2/siesta-env.sh

srun --mpi=pmix_v3 -n1 \
    siesta < RUN.fdf > siesta.out
```

3. Exemplo com 2 nós e 8 processos por nó

Neste exemplo são usados 16 processos MPI no total, distribuídos igualmente entre dois nós.

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=siesta
#SBATCH --partition=filaCPU
#SBATCH --nodes=2
#SBATCH --ntasks-per-node=8
#SBATCH --time=04:00:00
#SBATCH --output=siesta-%j.out
#SBATCH --error=siesta-%j.err

source /st00/programs/siesta-5.4.2/siesta-env.sh

srun --mpi=pmix_v3 \
    --cpu-bind=cores \
    siesta < RUN.fdf > siesta.out
```

4. Parâmetros que o usuário deve ajustar

Parâmetro	Finalidade
--nodes	Quantidade de nós físicos solicitados.
--ntasks	Total de processos MPI, normalmente usado em execução com 1 nó.
--ntasks-per-node	Quantidade de processos MPI em cada nó.
--time	Tempo máximo solicitado para o job.
--job-name	Nome do job mostrado na fila do Slurm.
--output / --error	Arquivos de saída e erro do Slurm.

5. Arquivos necessários no diretório de execução

O usuário deve manter no diretório do job o arquivo de entrada RUN.fdf, os pseudopotenciais exigidos pelo cálculo e qualquer arquivo adicional referenciado por meio de %include.

6. Envio e acompanhamento

```
sbatch nome-do-job.slurm  
squeue -u $USER
```

7. Observações importantes

Execução serial	Use --nodes=1, --ntasks=1 e srun -n1.
Execução paralela	Aumente o número de tarefas de acordo com o tamanho do cálculo.
Mais de um nó	Use --nodes e --ntasks-per-node para definir a distribuição.
OpenMPI	Não é necessário chamar mpirun; use srun --mpi=pmix_v3.
Ambiente	Sempre carregue siesta-env.sh dentro do script Slurm.

Ambiente instalado: SIESTA 5.4.2 com OpenMPI 4.1.8, Slurm/PMix, Munge e bibliotecas científicas compartilhadas em /st00/programs.