

به نام خدا

راهنمای ارسال جاب برای نرم افزار AnsysFluent-2022R1 با استفاده از دستور subfluent22.1

قبل از شروع توضیحات به این نکات توجه فرمایید:

- ❖ سیستم عامل لینوکس به حروف بزرگ و کوچک حساس می باشد.
- ❖ در نام گذاری فایل ها و پوشه ها از کاراکترهای خاص مانند @&#&\$ و فاصله استفاده نکنید.
- ❖ فایل های ورودی را در پوشه wrkdir قرار داده و دستور فوق را از جایی که فایل ورودی قرار دارد، اجرا کنید.

در صورتیکه این دستور را بدون هیچ گزینه ای اجرا کنید، توضیحات کلی را مشاهده خواهید کرد:

```
u111112@master-tyan: ~ → subfluent22.1
Create and submit job for Ansys Fluent 2022.1

Usage: subfluent22.1 <version> [OPTIONS]
OPTIONS:

-n <np>          Number of processors.
-m <mem>         Memory required for job (GB).
-t <time>        run time of the job. Valid format: M, H:M:S, D-H, D-H:M
-p <part>        Partition name to submit the job. (use 'sinfo -s')
-c <case-file>   case file name
-d <data-file>   data file name, or 'si': Standard initialization. 'hi': hybrid i
-i <NI[:NIPT]>   Number of Iteration. For unsteady case: <Number_of_time_step:It
-a <df:Mf:cf>    AutoSave parameters. data_frequency:max_files:case_frequency
-j <journal>     The name of the journal file. If this option is used, all the ab
-N <n1[:n2]>     Number of nodes and number of tasks per node.
-l <disk>        Disk space required for output files (GB)
-f <I/O format> Output file format. 1 → CFF , 2 → Legacy
-pm <part-method> Partitioning method in parallel mode
-so <sopt>       Additional slurm options if needed.
-no             Only write job file.
-h | --help     Print this message and exit.

Example: subfluent22.1 2ddp -n 12 -m 8 -t 2-0 -c Q25.cas.h5 -i 1000:20 -a 100:5:1
```

عبارت version که از بین 2d, 2ddp, 3d, 3ddp انتخاب می شود، ابعاد مساله و دقت محاسبات را مشخص می کند.

منابع درخواستی و ورودی های نرم افزار نیز به کمک گزینه های جدول زیر مشخص می شوند:

-n	تعداد هسته های مورد نیاز برای اجرای برنامه.
-N	تعداد نودهای محاسباتی مورد نیاز (و حداکثر تعداد هسته مورد استفاده از هر نود).
-m	مقدار حافظه (RAM) مورد نیاز برحسب گیگا بایت. این مقدار برای هر نود محاسباتی می باشد.
-t	زمان تقریبی اجرای برنامه. در صورت نیاز می توان آنرا تغییر داد. در فرمت های مورد استفاده حروف D, H, M و S به ترتیب بیانگر روز، ساعت، دقیقه و ثانیه می باشند.
-p	پارتیشن مورد استفاده برای انتخاب منابع درخواستی، به کمک این گزینه مشخص می شود. لیست پارتیشن ها را با دستور sinfo می توان مشاهده کرد. در این مورد با ادمین مشورت کنید.

-c	نام فایل case توسط این گزینه مشخص می‌شود.
-d	اگر نام فایل data با نام فایل cas متفاوت است، به کمک این گزینه آنرا مشخص کنید. همچنین در صورت نیاز به مقداردهی اولیه یکی از عبارات si (برای روش استاندارد) یا hi (برای روش هیبرید) را وارد کنید. در صورت یکسان بودن نام فایل cas و data نیازی به استفاده از این گزینه نیست.
-i	برای تعیین تعداد تکرار در حالت دائم و یا تعداد گام زمانی و تعداد تکرار در هر گام زمانی در حالت گذرا، از این گزینه استفاده می‌شود. در حالت گذرا، دو عدد با عبارت ":" جدا می‌شوند. به عنوان مثال 1000:20 بیانگر ۱۰۰۰ گام زمانی و ۲۰ تکرار در هر گام زمانی می‌باشد.
-a	در صورت نیاز به فعال کردن حالت auto-save می‌توانید از این گزینه استفاده کنید. عدد اول از چپ، تعداد تکراری را که بعد از آن فایل data ذخیره می‌شود، عدد دوم حداکثر تعداد فایل data خروجی و عدد سوم زمان ذخیره فایل cas می‌باشد. زمان ذخیره فایل cas با یکی از اعداد 1-3 بیان می‌شود: 1: each-time 2: if-case-is-modified 3: if-mesh-is-modified در صورت عدم ورود عدد سوم، عدد 2 به عنوان گزینه پیش فرض انتخاب می‌شود. نکته مهم: اگر این تنظیمات را در هنگام تهیه فایل cas مشخص کرده‌اید، در قسمت نام فایل، مسیر ذخیره آنرا حذف کرده و تنها نام فایل را وارد نمایید.
-j	در صورت داشتن فایل ژورنال، نام آنرا به کمک این گزینه وارد نمایید. در این صورت چهار گزینه قبلی هیچ تاثیری نداشته و نیازی به استفاده از آنها نیست.
-l	حجم فایل‌های خروجی بر حسب گیگا بایت.
-f	فرمت فایل‌های خروجی. عدد 2 بیانگر فرمت استاندارد و عدد 1 بیانگر فرمت جدید CFF (با پسوند h5) می‌باشد. حالت پیش فرض، استفاده از فرمت فایل‌های ورودی می‌باشد.
-pm	روش (متفاوت از روش پیش فرض) تقسیم‌بندی دامنه حل در حالت موازی. معمولاً نیازی به این گزینه نیست. در صورت استفاده از فایل ژورنال، این گزینه تاثیری ندارد.
-so	گزینه‌های اضافی مورد نیاز برای دستور sbatch
-no	در صورت استفاده از این گزینه، یک فایل ژورنال با پسوند jou و یک فایل جاب با پسوند job ایجاد می‌شود. در صورت نیاز می‌توانید آنها را تغییر داده و سپس با استفاده از دستور sbatch فایل جاب را برای اجرا ارسال نمایید.

در ادامه استفاده از این دستور برای چند حالت مختلف، به عنوان مثال بیان شده است.

اجرای نرم‌افزار فلونتت برای انجام ۲۰۰۰۰ تکرار از یک هندسه ۳ بعدی در حالت پایا، test3d.cas، به کمک ۲۴ هسته محاسباتی، ۲۰ گیگ فضای رم و زمان تقریبی ۳ روز:

الف- اگر فایل test3d.dat وجود داشته باشد:

```
subfluent22.1 3d -n 24 -m 20 -t 3-0 -c test3d.cas -i 20000
```

ب- اگر نام فایل دیتا مشابه فایل کیس نباشد به عنوان مثال test3d-100.dat:

```
subfluent22.1 3d -n 24 -m 20 -t 3-0 -c test3d.cas -d test3d-100.dat -i 20000
```

ج- اگر فایل دیتا وجود نداشته باشد و بخواهیم با استفاده از روش هیبرید مقداردهی اولیه انجام شود:

```
subfluent22.1 3d -n 24 -m 20 -t 3-0 -c test3d.cas -d hi -i 20000
```

د- ذخیره کردن فایل نتایج هر ۲۰۰ تکرار و نگهداری ۴ فایل برای حالت ج:

```
subfluent22.1 3d -n 24 -m 20 -t 3-0 -c test3d.cas -d hi -i 20000 -a 200:4
```

در صورتیکه بخواهیم در مثال‌های فوق محاسبات با دقت مضاعف انجام شود، به جای 3d از 3ddp استفاده می‌کنیم.

در هر کدام از حالت‌های فوق اگر دستور به درستی اجرا شود، پیامی مشابه این پیام مشاهده خواهید کرد:

```
Submitted batch job 5981
```

این پیام به این معنی است که جاب شما توسط سیستم پذیرفته شده است و به محض وجود منابع درخواستی، اجرا خواهد شد. عدد نمایش داده شده، شماره جاب یا همان JobID می‌باشد. با اجرای برنامه پیام‌های خروجی برنامه و همچنین پیام‌های slurm در فایلی با نام FL<name>_<JobID>.out ذخیره می‌شوند که نام فایل ورودی می‌باشد.

با استفاده از دستور **sq** یا **squeue** می‌توانید از وضعیت جاب خود مطلع شوید:

```
u111112@login2:~/wrkdir/qe> sq
JOBID PARTITION NAME ST NODE CPUS MEMORY (SUBMIT_)TIME TIME_LEFT NODELIST(REASON)
5984 amd48 atom R 2 66 80G 0:02 2:58 cn-13-[8-9]
5983 amd48 atom PD 2 64 80G 15:37:53 30-00:00:00 (AssocGrpBillingMinutes)
u111112@login2:~/wrkdir/qe>
```

عبارت نمایش داده شده در ستون چهارم از سمت چپ، بیانگر وضعیت جاب می‌باشد. حرف R به معنی در حال اجرا و عبارت PD به معنی انتظار می‌باشد. در صورتی که جاب در وضعیت انتظار باشد، ستون آخر علت آنرا نشان می‌دهد، عبارت Resource در ستون آخر به معنی فراهم نبودن منابع درخواستی و عبارت AssocGrpBilling به معنی کم بودن مبلغ شارژ برای اتمام جاب با منابع درخواستی می‌باشد. برای جاب‌هایی که در حالت اجرا هستند، ستون هشتم زمانی که جاب در حال اجرا بوده را نشان می‌دهد و ستون نهم بیانگر زمان باقیمانده تا اتمام اجرا می‌باشد. در صورتی که عبارت Invalid در این ستون ظاهر شود، به این معنی است که اجرای برنامه از زمان پیش بینی شده بیشتر طول کشیده است، و بهتر است قبل از قطع شدن اجرا، با استفاده از دستور [update-job-time](#) زمان اجرای برنامه را اصلاح کنید.

برای قطع کردن یک یا چند اجرا، از دستور scancel <JobID> استفاده می‌شود، به عنوان مثال:

```
scancel 5894,5983
```

اگر بخواهید تمام جاب‌های خود را کنسل کنید از دستور `scancel -u $USER` استفاده کنید.

همانطور که گفته شد به کمک دستور `sinfo` می‌توانید لیست پارتیشن‌ها را مشاهده کنید.

```
u111112@login1: ~ → sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
amd128      up         infinite   2      mix  en-7-[1-2]
amd128      up         infinite   2      idle en-7-6,master-tyan
amd48*     up         infinite   1      mix  cn-12-3
amd48*     up         infinite   4      alloc cn-12-[1-2,4],cn-13-1
amd48*     up         infinite  12      idle  cn-12-[5-8],cn-13-[2-9]
u111112@login1: ~ →
```

با توجه به خروجی فوق، دو پارتیشن `amd128` و `amd48` در حال حاضر وجود دارند. پارتیشنی که با علامت * مشخص شده (`amd48`) پارتیشن پیشفرض می‌باشد. در ستون `STATE` وضعیت هر پارتیشن مشخص شده است. در این ستون `idle` به معنی موجود و آماده به کار، عبارت `mix` به معنی آزاد بودن قسمتی از منابع و عبارت `alloc` به معنی رزرو شده می‌باشند. جزئیات بیشتر هر پارتیشن را می‌توان با دستور زیر مشاهده کرد:

`scontrol show partition <partition_name>`

به عنوان مثال:

```
u111112@login2: ~ → scontrol show partition amd48
PartitionName=amd48
AllowGroups=ALL AllowAccounts=ALL AllowQos=ALL
AllocNodes=ALL Default=YES QoS=N/A
DefaultTime=NONE DisableRootJobs=NO ExclusiveUser=NO GraceTime=0 Hidden=NO
MaxNodes=UNLIMITED MaxTime=90-00:00:00 MinNodes=0 LLN=NO MaxCPUsPerNode=UNLIMITED
Nodes=cn-12-[1-8],cn-13-[1-9]
PriorityJobFactor=1 PriorityTier=1 RootOnly=NO ReqResv=NO OverSubscribe=NO
OverTimeLimit=NONE PreemptMode=OFF
State=UP TotalCPUs=816 TotalNodes=17 SelectTypeParameters=NONE
JobDefaults=(null)
DefMemPerNode=UNLIMITED MaxMemPerNode=90500
TRES=cpu=816,mem=1643050M,node=17,billing=85782
TRESBillingWeights=CPU=54,Mem=26G,GRES/gpu=3900
u111112@login2: ~ →
```

عبارت `TRESBillingWeights` که در سطر آخر نمایش داده شده است، برای محاسبه هزینه اجرا استفاده می‌شوند به عبارتی در پارتیشن فوق هزینه هر اجرا به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\{(N_{cpu} \times 54) + (Mem(GB) \times 26) + (GPU \times 3900)\} \times Time(Hours)$$

نکته مهم: منابع و زمان درخواستی در هنگام ثبت درخواست سرویس صرفاً برای برآورد هزینه می‌باشند و در هنگام استفاده از کلاستر به عنوان محدودیت اعمال نمی‌شوند. به عنوان مثال اگر شما درخواست یک سرویس ۳۰ روزه داده باشید و اکانت کلاستر در اختیار شما قرار گیرد، تا هنگامی که کل اعتبار شما مصرف شود می‌توانید از کلاستر استفاده نمایید. با استفاده از دستور `my_usage` می‌توانید از کل اعتبار و میزان مصرف خود آگاه شوید.