

به نام خدا

توضیحات کلی در مورد تعدادی از دستورات مورد نیاز هنگام اجرای برنامه بر روی کلاستر دانشگاه صنعتی اصفهان نکته مهم: در محیط لینوکس حروف بزرگ و کوچک متفاوت هستند. تمام دستورات با حروف کوچک می‌باشند. لذا در اجرای دستورات به این نکته توجه کنید.

دستور	مثال	توضیحات
ls	ls	مشاهده لیست فایل‌ها و فولدرها
pwd	pwd	نشان دادن مسیر جاری
mkdir	mkdir run1	ایجاد فولدر جدید
cd	cd wrkdir/run1	تغییر مسیر
cp	cp input.txt wrkdir/	کپی کردن فایل یا فولدر
mv	mv run1 wrkdir	انتقال فایل یا فولدر (معادل cut & past)
rm	rm input.txt	حذف یا پاک کردن فایل یا فولدر
tar	tar cfz run1.tar.gz run1/	فشرده‌سازی یک فولدر
gzip	gzip input.txt	فشرده سازی یک یا چند فایل
extract	extract examples.tar.gz	خارج کردن فایل یا فولدر از حالت فشرده
nano	nano input.txt	ایجاد و اصلاح فایل
sq	sq	مشاهده لیست و وضعیت جاب‌های ارسالی
scancel	scancel <JobID>	حذف یک یا چند جاب (قطع یک برنامه در حال اجرا)
cdw	cdw <JobID>	تغییر مسیر به مسیر ارسال جاب
cdtmp	cdtmp <JobID>	تغییر مسیر به مسیر اجرای برنامه

کاربرد چهار دستور اول در شکل زیر مشخص است:

```
u111112@login1: ~ → ls
bin wrkdir
u111112@login1: ~ → pwd
/home/u111112
u111112@login1: ~ → cd wrkdir/
u111112@login1: ~/wrkdir> pwd
/home/u111112/wrkdir
u111112@login1: ~/wrkdir> mkdir run1
u111112@login1: ~/wrkdir> ls
run1
u111112@login1: ~/wrkdir> cd run1/
u111112@login1: ~/wrkdir/run1> ..
u111112@login1: ~/wrkdir> █
```

اگر بخواهیم فولدرهای تودرتو ایجاد کنیم از گزینه -p به همراه دستور mkdir استفاده می‌کنیم:

```
mkdir -p f1/f2/f3
```

از دستور md به جای دستور mkdir می‌توان استفاده کرد.

نکته: گزینه --help برای دستورات لینوکس، لیست تمام گزینه‌های مورد استفاده دستور مورد نظر را نشان می‌دهد.

```
u111112@login1:~$ mkdir --help
Usage: mkdir [OPTION]... DIRECTORY...
Create the DIRECTORY(ies), if they do not already exist.

Mandatory arguments to long options are mandatory for short options too.
-m, --mode=MODE  set file mode (as in chmod), not a=rwx - umask
-p, --parents    no error if existing, make parent directories as needed
-v, --verbose    print a message for each created directory
-Z              set SELinux security context of each created directory
               to the default type
--context[=CTX] like -Z, or if CTX is specified then set the SELinux
               or SMACK security context to CTX
--help          display this help and exit
--version       output version information and exit
```

دستور cd اگر به تنهایی اجرا شود، خط فرمان به مسیر ابتدایی منتقل می‌شود. دستور cd .. یا .. خط فرمان را یک مسیر به عقب بر می‌گرداند.

نکته: مسیره‌ی در تمام دستورات لینوکس به دو صورت موضعی و از جایی که قرار داریم و یا سراسری، از مسیر ابتدایی (~) انجام می‌شود. به عنوان مثال اگر در مسیر فولدر run1 باشیم و بخواهیم به مسیر فولدر run2 که در کنار run1 قرار دارد برویم از دو دستور زیر می‌توانیم استفاده کنیم:

```
cd ../run2
cd ~/wrkdir/run2
```

### دستور cp:

```
cp [OPTION] SOURCE DEST
```

فرم کلی این دستور به صورت فوق بوده و برای کپی کردن یک یا چند فایل یا فولدر از یک مسیر به مسیر دیگر یا همان مسیر استفاده می‌شود. برای کپی کردن فولدر از گزینه -a استفاده می‌شود. چند مثال:

cp file1 file2	تهیه یک کپی از فایل file1 با نام file2
cp file1 ~/wrkdir/run1/	کپی کردن فایل file1 به فولدر run1 بدون تغییر نام
cp -a dir1 ~/wrkdir/run1/dir2	کپی کردن فولدر dir1 در فولدر run1 با تغییر نام آن به dir2

### دستور mv:

این دستور برای انتقال یک یا چند فایل یا فولدر استفاده می‌شود. فرم کلی آن مانند دستور cp بوده و برای انتقال فولدر نیاز به گزینه‌ای نیست. برای تغییر نام یک فایل یا فولدر از این دستور استفاده می‌شود.

mv file1 file2	تغییر نام فایل file1 به file2
mv file1 ~/wrkdir/run1/	انتقال فایل file1 به فولدر run1 بدون تغییر نام
mv dir1 ~/wrkdir/run1/dir2	انتقال فولدر dir1 به فولدر run1 با تغییر نام آن به dir2

### دستور rm:

برای پاک کردن یک یا چند فایل یا فولدر استفاده می‌شود. برای پاک کردن یک فولدر باید از گزینه r- استفاده کرد.

rm file1 file2	حذف دو فایل file1 و file2
rm *.out	حذف تمام فایل‌ها با پسوند .out
rm -r dir*	حذف تمام فایل‌ها و فولدرهایی که نام آنها با dir شروع می‌شود.

### فشرده‌سازی فایل و فولدر:

برای فشرده‌سازی یک یا چند فایل بهتر است از دستور gzip استفاده کنید. در هنگام استفاده از این دستور، فایل اولیه حذف می‌شود. با دستور zip می‌توان همزمان چند فایل را فشرده و در یک آرشیو خروجی قرار داد.

```
u111112@login1:~/wrkdir/qe> ls
1 atom.in pwsfc.save pwsfc.wfc1 pwsfc.wfc2 pwsfc.wfc3 pwsfc.wfc4 pwsfc.xml
u111112@login1:~/wrkdir/qe> gzip pwsfc.xml
u111112@login1:~/wrkdir/qe> ls
1 atom.in pwsfc.save pwsfc.wfc1 pwsfc.wfc2 pwsfc.wfc3 pwsfc.wfc4 pwsfc.xml.gz
u111112@login1:~/wrkdir/qe> zip final.zip pwsfc.wfc*
adding: pwsfc.wfc1 (deflated 5%)
adding: pwsfc.wfc2 (deflated 5%)
adding: pwsfc.wfc3 (deflated 5%)
adding: pwsfc.wfc4 (deflated 5%)
u111112@login1:~/wrkdir/qe> ls
1 atom.in final.zip pwsfc.save pwsfc.wfc1 pwsfc.wfc2 pwsfc.wfc3 pwsfc.wfc4 pwsfc.xml.gz
```

در مثال فوق ابتدا با دستور ls لیست فایل و فولدرها نمایش داده شده است. با دستور gzip یک فایل فشرده و سپس با دستور zip final.zip pwsfc.wfc\* چهار فایل موردنظر فشرده و خروجی final.zip ایجاد شده است.

با دستور tar می‌توانیم یک فولدر را فشرده کنیم. در مثال زیر این دستور برای فشرده‌سازی پوشه qe استفاده شده است:

```
u111112@login1:~/wrkdir> ls
lammps qe
u111112@login1:~/wrkdir> tar cfz qe.tgz qe/
u111112@login1:~/wrkdir> ls
lammps qe qe.tgz
u111112@login1:~/wrkdir> █
```

برای اصلاح یک فایل و یا ایجاد یک فایل متنی جدید از دستور nano استفاده می‌شود. به عنوان مثال برای ایجاد فایل input ابتدا دستور nano input را اجرا کنید. در محیطی که ایجاد می‌شود، محتویات موردنظر را وارد کنید سپس Ctrl + x در ادامه کلید y و در نهایت کلید Enter را بزنید.

### دستور sq

```
u111112@login1:~/wrkdir/qe> sq
JOBID  NAME      ST  NODES  CPUS  TIME      SUBMIT_TIME  NODELIST(REASON)
1801   1.in     R   2      48   3:56     15:08:44     cn-12-[1-2]
1802   atom    R   1      4    0:03     15:12:37     cn-12-1
```

این دستور وضعیت جاب‌های ارسالی را نشان می‌دهد. ستون‌های خروجی عبارتند از:

JOBID	شماره جاب. هر جاب یک شماره منحصر به فرد دارد.
NAME	نامی که برای جاب انتخاب شده است. معمولاً نام فایل ورودی
ST	وضعیت جاب. R بیانگر حالت اجرا و PD بیانگر حالت در صف منتظر بودن است.
NODES	تعداد نودهای محاسباتی که برای این جاب درخواست شده است.
CPUS	تعداد کل هسته درخواستی
TIME	مدت زمانی که برنامه در حال اجرا می‌باشد.
SUBMIT_TIME	تاریخ و زمانی که جاب ارسال شده است.
NODELIST	در حالت اجرا نام نودهای مورد استفاده و در حالت PD علت اجرا نشدن را نشان می‌دهد.

برای حذف یک جاب از دستور scancel یا qdel به همراه شماره آن استفاده کنید. برای چند جاب شماره‌ها را با کاما از هم جدا کنید.

```
u111112@login1:~> sq
JOBID  NAME      ST  NODES  CPUS  TIME      SUBMIT_TIME  NODELIST(REASON)
1801   1.in     R   2      48   16:45     15:08:44     cn-12-[1-2]
u111112@login1:~> scancel 1801
u111112@login1:~> sq
JOBID  NAME      ST  NODES  CPUS  TIME      SUBMIT_TIME  NODELIST(REASON)
1801   1.in     CG  1      48   19:08     15:08:44     cn-12-1
u111112@login1:~>
```

برای حذف تمام جاب‌های خود می‌توانید از دستور scancel -u \$USER استفاده کنید.

### دستور cdw

از هر جایی که این دستور را به همراه شماره جاب اجرا کنید به مسیری که جاب را ارسال کرده‌اید منتقل می‌شوید:

```
u111112@login1:~> cdw 1801
u111112@login1:~/wrkdir/lammps> cdw 1802
u111112@login1:~/wrkdir/qe>
```

پس از اتمام هر جاب، فایل JobID.out در مسیر ~/JobSummary ایجاد می‌شود که حاوی جزئیات کامل جاب از جمله مقدار درصد استفاده شده از منابع رزروی و هزینه نهایی جاب می‌باشد.

از دستورات head و tail به ترتیب می‌توان برای مشاهده ابتدا و انتهای فایل استفاده کرد. شکل کلی این دستورات مشابه یکدیگر است. به عنوان مثال برای مشاهده ۱۰ خط اول فایلی با نام input.dat:

```
head -10 input.dat
```

و برای مشاهده ۵ خط انتهای آن:

```
tail -5 input.dat
```