

به نام خدا

راهنمای ارسال جاب برای نرم افزار Abaqus با استفاده از دستور subabq

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 subabq 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@login2: ~ → subabq
Create and submit job for Abaqus

Usage: subabq <INPUT> [OPTION]

  -n <n1[:n2]>      Number of MPI and OpenMP processors.
  -N <n3[:n4]>      Number of nodes and number of tasks per node.
  -m <mem>         Memory required for job (GB).
  -p <part>        Partition name to submit the job. (use 'sinfo')
  -v <ver>         Software version. Available: 2022
  -f <file>        The name of the input Fortran file.
  -o <opt>         The desired options of the abq command.
  -j <jobname>     Default: name of input file.
  -l <disk>        Disk space required for scratch (GB). Default: 10
  -t <time>        run time of the job. Valid format: M, H:M:S, D-H, D-H:M
  -so <sopt>       Additional slurm options if needed.
  -no              Only write job file.
  -h | --help     Print this message and exit.

Example: subabq pipe.inp -n 4 -m 4 -f umat.f -t 4-0 -j Job1 -o 'double=both' -l 150

u111112@login2: ~ → █
```

توضیحات کامل گزینه های این دستور در جدول زیر آمده است:

-n	تعداد هسته های مورد نیاز برای اجرای برنامه. در صورت استفاده از دو عدد (مثلا 2:12) عدد اول به عنوان تعداد هسته MPI و عدد دوم به عنوان تعداد thread در نظر گرفته می شود. در این حالت، تعداد هسته مورد استفاده حاصل ضرب دو عدد خواهد بود.
-N	تعداد نودهای محاسباتی مورد نیاز (و حداکثر تعداد هسته مورد استفاده از هر نود). کاربردی ندارد.
-m	مقدار حافظه (RAM) مورد نیاز بر حسب گیگا بایت. این مقدار برای هر نود محاسباتی می باشد.
-v	نسخه مورد نظر. در حال حاضر تنها نسخه موجود و پیش فرض 2022 می باشد.
-p	پارتیشن مورد استفاده. لیست پارتیشن ها را با دستور sinfo می توان مشاهده کرد. در این مورد با ادمین مشورت کنید.
-f	در صورت استفاده از سابروتین فورترن، نام فایل مربوطه را با این گزینه وارد کنید.
-o	گزینه هایی که در صورت نیاز برای دستور abq استفاده می شوند. حتما باید داخل "" قرار گیرند.

-j	نام انتخابی برای جاب. اگر استفاده نشود نام فایل ورودی برای جاب در نظر گرفته می‌شود.
-l	مقدار فضای لازم برای فایل‌های اسکرچ خروجی بر حسب گیگا بایت.
-t	زمان تقریبی اجرای برنامه. در صورت نیاز می‌توان آنرا تغییر داد. در فرمت‌های مورد استفاده حروف D، H، M و S به ترتیب بیانگر روز، ساعت، دقیقه و ثانیه می‌باشند.
-so	گزینه‌های اضافی مرود نیاز برای دستور sbatch
-no	در صورت استفاده از این گزینه، تنها فایل جاب ایجاد می‌شود. که می‌توانید در صورت نیاز آنرا تغییر داده و سپس با استفاده از دستور sbatch ارسال نمایید.

در صورتی که از گزینه -no استفاده نکرده باشید، با اجرای صحیح دستور فوق، 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 <JobID>_<jobname>.out ذخیره می‌شوند. Jobname نام جاب است که در حالت پیش‌فرض نام فایل ورودی و در غیر این صورت نامی است که با گزینه -j وارد کرده‌اید. 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.

مقدار فضای پیش‌فرض برای ذخیره فایل‌های اسکرچ 10GB می‌باشد، اگر برنامه شما به فضای بیشتری نیاز دارد، حتماً با استفاده از گزینه 1- مقدار مورد نظر را وارد کنید. این فایل‌های رو هارد نودی که برنامه را اجرا می‌کند، ایجاد می‌شوند. در صورت تمایل به مشاهده این فایل‌ها در حین اجرا با استفاده از دستور `<JobID> cdtmp` به محل ایجاد آنها منتقل می‌شوید. لازم است بعد از استفاده از این دستور برای برگشت به مسیر قبلی از دستور `exit` استفاده نمایید.

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

```
u11112@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]
u11112@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:

```
u11112@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
u11112@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.