

به نام خدا

راهنمای ارسال جاب برای نرم افزار AIMAll با استفاده از دستور **subaim**

قبل از شروع توضیحات به این نکات توجه فرمایید:

- ❖ فایل های ورودی خود را در پوشه wrkdir قرار دهید.
- ❖ قبل از اجرای دستور، به مسیری که فایل ورودی را قرار داده اید، بروید.
- ❖ سیستم عامل لینوکس به حروف بزرگ و کوچک حساس می باشد.

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

```
u111112@login2: → subaim
Create and submit job for AIMAll

Usage: subaim <input> [OPTION]

    -n <nproc>      Number of processors. Default: 1
    -m <mem>        Memory required for job (GB).
    -p <part>        Partition name to submit the job. (use 'sinfo')
    -x <exe>         Name of exec file. Default: aimqb
    -o <options>     Program options.
    -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: subaim B38.FChk -n 4 -m 10 -t 4-0 -o '-source=1 -encump=4'
```

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

-n	تعداد هسته های مورد نیاز برای اجرای برنامه.
-m	مقدار حافظه (RAM) مورد نیاز بر حسب گیگا بایت. ا
-x	نام فایل اجرایی. گزینه پیش فرض aimqb.exe بوده و نیاز به استفاده از این گزینه نیست
-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.
-j	نام انتخابی برای جاب. اگر استفاده نشود نام فایل ورودی برای جاب در نظر گرفته می شود. *
-o	گزینه هایی که برای فایل اجرایی لازم است. حتما باید در کوتیشن قرار گیرند. به مثال توجه کنید.
-p	پارتیشن مورد استفاده. گزینه پیش فرض amd48 می باشد.
-so	گزینه های اضافی مرسوم برای دستور sbatch
-no	در صورت استفاده از این گزینه، تنها فایل جاب ایجاد می شود. که می توانید در صورت نیاز آنرا تغییر داده و سپس با استفاده از دستور sbatch ارسال نمایید.

*بعد از ارسال جاب یک شماره به آن اختصاص داده می شود. پیام های خروجی برنامه و همچنین پیام های slurm در فایلی با نام <jobname>_<JobID>.out ذخیره می شوند.

کمک دستور `sinfo -s` می‌توانید لیست پارتیشن‌ها را مشاهده کنید.

```
u111112@login2: ~ → sinfo -s
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES(A/I/O/T) NODELIST
short      up        2:00:00    0/1/0/1 master-tyan
amd128     up        40-00:00:0 2/1/0/3 en-7-[1-2,6]
amd48*    up        60-00:00:0 5/12/0/17 cn-12-[1-8],cn-13-[1-9]
u111112@login2: ~ →
```

با توجه به خروجی فوق، سه پارتیشن `short` و `amd128` و `amd48` در حال حاضر وجود دارند. پارتیشنی که با علامت * مشخص شده (`amd48`) پارتیشن پیشفرض می‌باشد. `TIMELIMIT` حداکثر زمان اجرای برنامه را نشان می‌دهد. به عنوان مثال برای استفاده از پارتیشن `short` زمان اجرای برنامه شما باید کمتر از دو ساعت باشد.

```
scontrol show partition <partition_name>
```

نودهای پارتیشن `amd48`، دارای ۴۸ هسته محاسباتی و ۸۸ گیگابایت حافظه رم هستند. در حالیکه نودهای پارتیشن `amd128` دارای ۱۲۸ هسته محاسباتی و ۱ ترا بایت حافظه رم می‌باشند. نودهای این پارتیشن برای اجرا سریع‌تر بوده و هزینه آنها نیز بیشتر است. پارتیشن `short` دارای یک نود محاسباتی بوده و این نود از نوع نودهای پارتیشن `amd128` می‌باشد.

با توجه به اینکه نرم‌افزار `AIMAll` برای اجرا از هسته‌های یک ماشین استفاده می‌کند، روی پارتیشن پیش‌فرض حداکثر ۴۸ هسته و روی پارتیشن `amd128` حداکثر ۱۲۸ هسته برای یک اجرا می‌توانند مورد استفاده قرار گیرند. مثال ۱: اجرای برنامه `AIMAll` با فایل ورودی `h2o.wfn` و با اختصاص ۴ هسته محاسباتی، ۴ گیگ فضای رم، و با زمان تقریبی دو روز:

```
subaim h2o.wfn -n 4 -m 4 -t 2-0
```

با اجرای صحیح دستور فوق، پیغامی مبنی بر ارسال جاب، مشابه زیر دریافت می‌کنید:

```
Submitted batch job 3037
```

این پیغام به این معنی است که جاب شما به درستی توسط سیستم دریافت و به محض موجود بودن منابع درخواستی اجرا می‌شود. عدد 3037 شماره جاب (JobID) شما می‌باشد.

با کمک دستور `sq` می‌توانید وضعیت جاب خود را مشاهده کنید. در خروجی این دستور، عبارت زیر ستون `ST` (ستون چهارم) وضعیت جاب را نشان می‌دهد. حرف `R` به معنی در حال اجرا و عبارت `PD` به معنی در صف انتظار می‌باشد. در ستون `TIME` مدت زمانی که برنامه در حال اجرا بوده و یا زمان ارسال جاب (برای جاب‌هایی که در صف هستند) نمایش داده می‌شود. ستون `TIME_LEFT` زمان باقیمانده تا اتمام برنامه را نشان می‌دهد. در صورتیکه عبارت `INVALID` در این ستون نمایش داده شود به این معنی است که زمان اجرای از زمان پیش‌بینی شده بیشتر شده و ممکن است برنامه قطع شود. در این صورت لازم است زمان اجرا را اصلاح کنید. در صورتی که

شماره جاب موردنظر در خروجی دستور sq نباشد به معنی اتمام آن جاب می باشد. بعد از اتمام هر جاب فایلی در مسیر ~/JobSummery~ و با نام JobID.out ایجاد می شود که جزئیات بیشتری از وضعیت برنامه مانند مقدار مصرف حافظه رم و همچنین مقدار هزینه جاب در آن مشخص شده است.

در صورت نیاز به اصلاح زمان اجرای برنامه، می توانید از دستور [update-job-time](#) استفاده کنید.

در صورت داشتن سوال، عضو گروه زیر در اپلیکیشن bale شده و سوال خود را مطرح فرمایید:

ble.ir/join/M2M4ZTI3Nz

موفق باشید.