

به نام خدا

راهنمای ارسال جاب برای نرم افزار COMSOL Multiphysics با استفاده از دستور `subcomsol`

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 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: → subcomsol
Create and submit job for COMSOL Multiphysics

Usage: subcomsol <INPUT> [OPTION]

  -n <np>           Number of cores.
  -N <nn[:nt]>      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: 5.6, 6.1 Default: 5.6
  -o <output>       Name of output file. Default: <input>_out.
  -j <jobname>      Name of job file. Default: name of input file.
  -l <disk>         Disk space required for scratch (GB). Default: 5
  -t <time>         run time of the job. Valid format: M, H:M:S, D-H, D-H:M
  -s <study>        The study to compute.
  -co <opt>         Additional options for comsol batch command.
  -so <sopt>        Additional slurm options if needed.
  -no               Only write job file.
  -h | --help      Print this message and exit.

Example: subcomsol test.mph -n 4 -m 4 -t 1-0 -s std1
```

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. * |
| -v | نسخه مورد نظر. در حال حاضر نسخه 5.6 و 6.1 موجود می باشد. نسخه پیش فرض 5.6 است. |
| -p | پارتیشن مورد استفاده. لیست پارتیشن ها را با دستور <code>sinfo</code> می توان مشاهده کرد. در این مورد با ادمین مشورت کنید. |
| -o | نام فایل خروجی. عبارت پیش فرض <code><input>_out.mph</code> می باشد که نام فایل ورودی است. |
| -j | نام انتخابی برای جاب. اگر استفاده نشود نام فایل ورودی برای جاب در نظر گرفته می شود. |
| -l | مقدار فضای لازم برای فایل های اسکرچ خروجی بر حسب گیگا بایت. (در حال حاضر بدون استفاده) |
| -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. * |

| | |
|-----|---|
| -s | نام شبیه‌سازی مورد نظر در فایل ورودی. |
| -co | گزینه‌های اضافه مورد نظر برای دستور <code>comsol</code> . حتما باید داخل "" قرار گیرند |
| -so | گزینه‌های اضافی مورد نیاز برای دستور <code>sbatch</code> . حتما باید داخل "" قرار گیرند. |
| -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 <code>sbatch</code> ارسال نمایید. |

گزینه‌هایی که با علامت * مشخص شده‌اند، حتما باید مورد استفاده قرار گیرند.

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 پیش فرض نام فایل ورودی و در غیر این صورت نامی است که با گزینه `-j` وارد کرده‌اید. به عنوان مثال اگر نام فایل ورودی `test.mph` باشد و از گزینه‌های `-o` و `-j` استفاده نشود، (با فرض اینکه شماره جاب 5891 باشد) پیام‌های خروجی در حین اجرا و پیام‌های خطای احتمالی در فایل `Test_5891.out` ذخیره می‌شوند. با استفاده از دستور `cat` و `tail` می‌توانید کل محتوای این فایل و یا انتهای این فایل را مشاهده کنید:

`tail Test_5891.out`

با اتمام اجرا، خروجی نرم‌افزار در فایل `test_out.mph` ذخیره می‌شود.

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 `<JobID> scancel` 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@login2: ~ → sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
short      up          30:00     1    idle master-tyan
gpu        up 40-00:00:0  1    down* en-7-1
gpu        up 40-00:00:0  1    mix   en-7-2
amd128     up 40-00:00:0  2    mix   en-7-[6-7]
amd48*    up 120-00:00:  8    down* cn-11-[1-8]
amd48*    up 120-00:00:  5    mix   cn-12-[1-3,6],cn-13-2
amd48*    up 120-00:00:  1    alloc cn-13-1
amd48*    up 120-00:00: 11    idle  cn-12-[4-5,7-8],cn-13-[3-9]
```

با توجه به خروجی فوق، در حال حاضر، چهار پارتیشن `short`، `gpu`، `amd128`، `amd48` 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.