

## به نام خدا

راهنمای ارسال جاب برای برنامه [exciting fluorine code](#) با استفاده از دستور `subexciting`

قبل از شروع توضیحات به این نکات توجه فرمایید:

- ❖ فایل‌های ورودی خود را در پوشه `wrkdir` قرار دهید.
- ❖ قبل از اجرای دستور، به مسیری که فایل ورودی را قرار داده‌اید، بروید.
- ❖ سیستم عامل لینوکس به حروف بزرگ و کوچک حساس می‌باشد.

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

```
u111112@login2: → subexciting
Create and submit job for exciting FP-LAPW Code

Usage: subexciting [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).
  -t <time>        run time of the job. Valid format: M, H:M:S, D-H, D-H:M
  -j <jobname>     Default: Exciting
  -p <part>        Partition name to submit the job. (use 'sinfo')
  -so <sopt>       Additional slurm options if needed.
  -no              Only write job file.
  -h | --help     Print this message and exit.

Example: subexciting -n 16 -m 4 -t 4:30:00
```

توضیحات کامل گزینه‌های این دستور در جدول زیر آمده است:

-n	تعداد هسته‌های مورد نیاز برای اجرای برنامه.
-m	مقدار حافظه (RAM) مورد نیاز بر حسب گیگا بایت. ا
-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.
-j	نام انتخابی برای جاب. مقدار پیش فرض Exciting می‌باشد.*
-p	پارتیشن مورد استفاده. گزینه پیش فرض amd48 می‌باشد.
-so	گزینه‌های اضافی مورد 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.

\*بعد از ارسال جاب یک شماره به آن اختصاص داده می‌شود. پیام‌های خروجی برنامه و همچنین پیام‌های `slurm`

در فایل با نام `<jobname>_<JobID>.out` ذخیره می‌شوند.

به 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  40-00:00:00  2/1/0/3 en-7-[1-2,6]
amd48*    up  60-00:00:00  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.

این برنامه به دو صورت (OpenMP) shared memory و (OpenMPI) distributed memory نصب شده است. برای استفاده از نسخه OpenMP که تنها از هسته‌های یک سیستم استفاده می‌کند تعداد هسته مورد نیاز (N) را به صورت 1:N وارد کنید. (در این حالت تعداد نود، ۱ در نظر گرفته می‌شود) به عنوان مثال برای اجرای برنامه با استفاده از ۸ هسته openmp و ۴ گیگ حافظه Ram با زمان تقریبی یک روز:

```
subexciting -n 1:8 -m 4 -t 1-0
```

و برای استفاده از ۸ هسته mpi از دستور زیر استفاده کنید:

```
subexciting -n 8 -m 4 -t 1-0
```

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](https://ble.ir/join/M2M4ZTI3Nz)

موفق باشید.