

به نام خدا

راهنمای ارسال جاب برای نرم افزار Gaussian09 با استفاده از دستور subg09

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: → subg09
Create and submit job for Gaussian-09

Usage: subg09 <INPUT> [OPTION]

-n <n1>          Number of processors.
-N <n2:n3>       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')
-d <disk>       Disk space required for scratch (GB).
-v <ver>        G09 Version. Default: g09D1
-j <name>       Slurm Job Name. Default: name of INPUT.
-t <time>       run time of the job. Valid format: M, H:M:S, D-H, D-H:M
-f             convert .chk files to .fchk
-fo <fopt>     formchk options
-so <sopt>     Additional slurm options if needed.
-no           Only write job file.
-h | --help    Print this message and exit.

Example: subg09 test.com -n 16 -m 10 -t 2-0 -d 100
```

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

-n	تعداد هسته های مورد نیاز برای اجرای برنامه.
-N	تعداد نودهای محاسباتی مورد نیاز. برای نسخه موجود 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 D1 موجود است که به صورت پیش فرض انتخاب می شود
-p	پارتیشن مورد استفاده. لیست پارتیشن ها را با دستور sinfo می توان مشاهده کرد. در این مورد با ادمین مشورت کنید.
-j	نام انتخابی برای جاب. اگر استفاده نشود نام فایل ورودی برای جاب در نظر گرفته می شود. *
-d	مقدار فضای لازم برای فایل های اسکرچ بر حسب گیگابایت. منظور فایل هایی است که در حین اجرا ایجاد شده و بعد از اتمام اجرا حذف می شوند.
-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.

-f	تبدیل فایل‌های chk به fchk با استفاده از دستور formchk
-fo	گزینه‌های مورد استفاده برای دستور formchk. (لازم است بین علامت کوتیشن قرار گیرند)
-so	گزینه‌های اضافی مرود نیاز برای دستور sbatch (لازم است بین علامت کوتیشن 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 sbatch ارسال نمایید.

*بعد از ارسال جاب یک شماره به آن اختصاص داده می‌شود. پیام‌های خروجی برنامه و همچنین پیام‌های slurm در فایلی با نام `<JobID>_<jobname>.out` ذخیره می‌شوند.

نکته: در صورتی که در فایل ورودی خود تعداد پردازنده و مقدار حافظه مورد نیاز را مشخص کرده باشید، نیازی به استفاده از گزینه‌های `-n` و `-m` نبوده و مقادیر تعیین شده در فایل ورودی برای اجرا استفاده می‌شوند. ولی در صورت استفاده از این گزینه‌ها، مقادیر وارد شده برای اجرا مورد استفاده قرار می‌گیرند.

فایل‌های خروجی برنامه روی 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. اگر حجم فایل‌های خروجی شما کمتر از یک گیگ است نیازی به استفاده از این گزینه نیست.

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

```
u111112@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]
u111112@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>`

نودهای پارتیشن `amd48`، دارای ۴۸ هسته محاسباتی و ۸۸ گیگا بایت 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.

با توجه به اینکه نرم‌افزار گوسین 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 g09 با فایل ورودی test.com و با اختصاص 20 هسته محاسباتی، 12 گیگ فضای رم، 40 گیگ فضای هارد (اسکرچ) با زمان تقریبی دو روز:

```
subg09 test.com -n 20 -m 12 -d 40 -t 2-0
```

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

```
u111112@login2:~/wrkdir/g09> subg09 test.com -n 20 -m 12 -d 40 -t 2-0  
Submitted batch job 2660
```

این پیغام به این معنی است که جاب شما به درستی توسط سیستم دریافت و به محض موجود بودن منابع درخواستی اجرا می‌شود. عدد 2660 شماره جاب (JobID) شما می‌باشد.

با کمک دستور sq می‌توانید وضعیت جاب خود را مشاهده کنید:

```
u111112@login2:~> sq  
JOBID PARTITION NAME ST NODE CPUS MEMORY (SUBMIT_)TIME NODELIST(REASON)  
2661 amd48 task R 1 4 12G 8:03 cn-12-1  
2660 amd48 test PD 1 20 12G 11:49:23 (Resources)  
u111112@login2:~>
```

در مثال فوق، 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 صورتی که شماره جاب موردنظر در خروجی دستور sq نباشد به معنی اتمام آن جاب می‌باشد. بعد از اتمام هر جاب فایلی در مسیر ~/JobSummery و با نام JobID.out ایجاد می‌شود 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 تغییر زمان اجرای برنامه از دستور زیر می‌توان استفاده کرد:

```
update-job-time <jobid> <time>
```

به عنوان مثال برای اضافه کردن دو روز به زمان اجرای جاب 2661:

```
update-job-time 2661 +2-0
```

توضیحات بیشتر را در این [قسمت](#) مطالعه فرمایید.