

به نام خدا

راهنمای ارسال جاب برای نرم افزار Gaussian16 با استفاده از دستور subg16

استفاده از دستور subg16 کاملاً مشابه دستور subg09 می باشد. تنها نکته لازم به ذکر این است که Gaussian16 تنها بر روی سرورهای جدید نصب شده است و لذا پارتیشن مورد استفاده برای این نرم افزار در حال حاضر amd128 می باشد که به صورت پیش فرض انتخاب می شود. تنها نسخه نصب شده این نرم افزار نسخه C1 می باشد. 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: → subg16
Create and submit job for Gaussian-16

Usage: subg16 <INPUT> [OPTION]

-n <n1>          Number of processors.
-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: g16C1
-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: subg16 test.com -n 16 -m 10 -t 3-0 -d 100
```

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. این مقدار برای هر نود محاسباتی می باشد.
-d	مقدار فضای لازم برای فایل های اسکرچ بر حسب گیگابایت.
-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. *
-v	نسخه مورد نظر. در حال حاضر تنها نسخه C1 موجود است که به صورت پیش فرض انتخاب می شود
-p	پارتیشن مورد استفاده. مقدار پیش فرض amd128. (فقط روی سرورهای جدید قابل اجراست)

-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.

تنها استفاده از گزینه‌های n,m,d و t برای ارسال جاب اجباری می‌باشد.

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:

```
subg16 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 NODLIST(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 می‌توانید از دستور [update-job-time](#) استفاده کنید.