

به نام خدا

راهنمای ارسال جاب برای نرم افزار LAMMPS با استفاده از دستور `sublammps`

نکته مهم: 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: → sublammps
Create and submit job for LAMMPS

Usage: sublammps <INPUT> [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).
-p <part>        Partition name to submit the job. (use 'sinfo')
-l <disk>        Disk space required for scratch (GB). Run on local hard disk.
-v <ver>         Lamps Version. Default: 23Jun2022
-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
-o <lopt>        lmp options.
-so <sopt>       Additional slurm options if needed.
-no             Only write job file.
-h | --help     Print this message and exit.

Example: sublammps in.flow -n 16 -m 10 -t 10-0 -l 60
```

-n	تعداد هسته های مورد نیاز برای اجرای برنامه. در صورت استفاده از دو عدد (مثلا 12:2) عدد اول به عنوان تعداد هسته MPI و عدد دوم به عنوان تعداد thread در نظر گرفته می شود.
-N	تعداد نودهای محاسباتی مورد نیاز (و حداکثر تعداد هسته مورد استفاده از هر نود)
-m	مقدار حافظه (RAM) مورد نیاز برحسب گیگا بایت. این مقدار برای هر نود محاسباتی می باشد.
-p	پارتیشن مورد استفاده. لیست پارتیشن ها را با دستور <code>sinfo</code> می توان مشاهده کرد. در این مورد با ادمین مشورت کنید.
-l	مقدار فضای لازم برای فایل های خروجی برحسب گیگا بایت. در صورتیکه برای اجرای برنامه بیش از یک نود استفاده کنید، نیازی به این گزینه نیست.
-v	نسخه برنامه. هم اکنون تنها نسخه 23Jun2022 موجود بوده و به صورت پیش فرض انتخاب می شود.
-j	نام انتخابی برای جاب. اگر استفاده نشود نام فایل ورودی برای جاب در نظر گرفته می شود. *
-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.
-o	گزینه هایی که در صورت نیاز برای دستور <code>lmp</code> استفاده می شوند. حتما باید داخل "" قرار گیرند.
-so	گزینه های اضافی مرود نیاز برای دستور <code>sbatch</code>
-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 <code>sbatch</code> ارسال نمایید.

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

در صورت استفاده از گزینه 1- فایل‌های خروجی برنامه روی نودی که برنامه را اجرا می‌کند ایجاد شده و بعد از اتمام اجرا به محل ارسال جاب کپی 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 محل قبلی از دستور exit استفاده نمایید. در صورتیکه حجم فایل‌های خروجی برنامه 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>
```

مثال ۱: اجرای برنامه با فایل ورودی input و با اختصاص 20 هسته محاسباتی، 12 گیگ فضای رم

```
sublammps input -n 20 -m 12
```

مثال ۲: اجرای مثال ۱ با 4 گیگ حجم فایل خروجی، زمان اجرای ۲ روز و استفاده از پارتیشن amd128

```
sublammps input -n 20 -m 12 -l 4 -p amd128
```

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