

به نام خدا

راهنمای ارسال جاب برای نرم افزار QuantumEspresso با استفاده از دستور subqe

قبل از شروع توضیحات به این نکات توجه فرمایید:

- ❖ فولدری به نام pseudo در مسیر اولیه (\$HOME) ایجاد و فایل های شبه پتانسیل خود را در این فولدر کپی کنید. در این صورت نیازی به وارد کردن مسیر pseudo_dir در فایل ورودی ندارید.
- ❖ مسیر پوشه خروجی در فایل ورودی را به صورت نسبی یا محلی (به عنوان مثال: ./output/) وارد کنید.
- ❖ 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:

```
Create and submit job for QuantumEspresso
```

```
Usage: subqe <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')
-v <ver>         Software version. Available: 7.2, 7.1, 6.8, 6.7, 6.5, 6.3, 5.3
-x <exe>         Name of exec file. Default: pw.x
-o <opt>         Option of exec file.
-j <jobname>     Default: name of input file.
-l <disk>        Disk space required for scratch (GB). Run on local hard disk.
-t <time>        run time of the job. Valid format: M, H:M:S, D-H, D-H:M
-so <sopt>       Additional slurm options if needed.
-no             Only write job file.
-h | --help     Print this message and exit.
```

```
Example: subqe input.in -n 16 -m 10 -v 6.8 -x ph.x -o '-nk 1 -nd 1' -t 4-0 -l 30
```

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

-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 بر حسب گیگا بایت. این مقدار برای هر نود محاسباتی می باشد.
-v	نسخه مورد نظر. در حال حاضر سه نسخه 7.1i, 7.1, 6.5i, 5.3i قابل استفاده هستند. نسخه پیش فرض 7.1 می باشد. حرف i به معنی کمپایل و نصب با استفاده از کمپایلر intel می باشد.
-p	پارتیشن مورد استفاده. لیست پارتیشن ها را با دستور sinfo می توان مشاهده کرد. در این مورد با ادمین مشورت کنید.
-x	نام فایل اجرایی مورد استفاده. مقدار پیش فرض pw.x می باشد.
-o	گزینه هایی که در صورت نیاز برای فایل اجرایی استفاده می شوند. حتما باید داخل "" قرار گیرند.
-j	نام انتخابی برای جاب. اگر استفاده نشود نام فایل ورودی برای جاب در نظر گرفته می شود. *

-l	مقدار فضای لازم برای فایل‌های خروجی برحسب گیگا بایت. در صورتیکه برای اجرای برنامه بیش از یک نود استفاده کنید، نیازی به این گزینه نیست.
-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.
-so	گزینه‌های اضافی مرود 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 فایلی با نام `<JobID>_<jobname>.out` ذخیره می‌شوند.

در صورت استفاده از گزینه -l 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 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>`

مثال ۱: اجرای برنامه `pw.x` از نسخه `7.1-gnu` با فایل ورودی `atom.in` و با اختصاص 20 هسته محاسباتی، 12 گیگ فضای رم، 40 گیگ فضای هارد با زمان تقریبی دو روز:

`subq atom.in -n 20 -m 12 -l 40 -t 2-0`

مثال ۲: اجرای مثال ۱ با نسخه 5.3 و استفاده از پارتیشن amd128:

```
subqe atom.in -n 20 -m 12 -l 40 -t 2-0 -v 5.3-intel -p amd128
```

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