

به نام خدا

راهنمای ارسال جاب برای نرم افزار VASP با استفاده از دستور subvasp

قبل از شروع توضیحات به این نکات توجه فرمایید:

- ❖ سیستم عامل لینوکس به حروف بزرگ و کوچک حساس می باشد.
 - ❖ در نام گذاری فایل ها و پوشه ها از کاراکترهای خاص مانند @&#\$\$ و فاصله استفاده نکنید.
 - ❖ فایل های ورودی را در پوشه wrkdir قرار داده و دستور را از جایی که فایل ورودی قرار دارد، اجرا کنید.
- در صورتیکه این دستور را بدون هیچ گزینه ای اجرا کنید، توضیحات کلی را مشاهده خواهید کرد:

```
u111112@master-tyan: ~ → subvasp
Create and submit job for VASP

Usage: subvasp [OPTION]

  -n <np>          Number of processors.
  -m <mem>         Memory required for job (GB).
  -p <part>        Partition name to submit the job. (use 'sinfo')
  -v <ver>         Software version. Available: 5.4.4
  -x <exe>         Name of exe file. Default: std
  -j <jobname>     Default: VASP
  -l <disk>        Disk space required for scratch (GB). Run on local hard
  -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: subvasp -n 16 -m 10 -t 4-0 -p amd128
```

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. *
-v	نسخه مورد نظر. در حال حاضر نسخه موجود و پیش فرض 5.4.4 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 که یکی از عبارات gam, ncl, std می باشد. عبارت پیش فرض std است.
-j	نام انتخابی برای جاب. عبارت پیش فرض VASP می باشد.
-l	مقدار فضای لازم برای فایل های اسکرچ خروجی بر حسب گیگا بایت. (در حال حاضر بدون استفاده)
-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. *
-s	نام شبیه سازی مورد نظر در فایل ورودی.
-so	گزینه های اضافی مورد نیاز برای دستور sbatch. حتما باید داخل "" 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.
-----	--

گزینه‌هایی که با علامت * مشخص شده‌اند، حتما باید مورد استفاده قرار گیرند.

در صورتی که از گزینه -no استفاده نکرده باشید، با اجرای صحیح دستور فوق، پیامی مشابه این پیام مشاهده خواهید کرد:

Submitted batch job 5981

این پیام به این معنی است که جاب شما توسط سیستم پذیرفته شده است و به محض وجود منابع درخواستی، اجرا خواهد شد. عدد نمایش داده شده، شماره جاب یا همان JobID می‌باشد. با اجرای برنامه پیام‌های خروجی برنامه و همچنین پیام‌های slurm در فایلی با نام <JobID>_<jobname>.out ذخیره می‌شوند. Jobname نام جاب است که در حالت پیش‌فرض VASP و در غیر این صورت نامی است که با گزینه -j وارد کرده‌اید.

به عنوان مثال اگر در هنگام ارسال جاب از گزینه -j استفاده نشود، (با فرض اینکه شماره جاب 5891 باشد) پیام‌های خروجی در حین اجرا و پیام‌های خطای احتمالی در فایل VASP_5891.out ذخیره می‌شوند. با استفاده از دستور cat و tail می‌توانید کل محتوای این فایل و یا انتهای این فایل را مشاهده کنید:

tail VASP_5891.out

با استفاده از دستور sq یا squeue می‌توانید از وضعیت جاب خود مطلع شوید:

```
u111112@login2:~/wrkdir/qe> sq
```

JOBID	PARTITION	NAME	ST	NODE	CPUS	MEMORY	(SUBMIT_)TIME	TIME_LEFT	NODELIST(REASON)
5984	amd48	atom	R	2	66	80G	0:02	2:58	cn-13-[8-9]
5983	amd48	atom	PD	2	64	80G	15:37:53	30-00:00:00	(AssocGrpBillingMinutes)

```
u111112@login2:~/wrkdir/qe>
```

عبارت نمایش داده شده در ستون چهارم از سمت چپ، بیانگر وضعیت جاب می‌باشد. حرف R به معنی در حال اجرا و عبارت PD به معنی انتظار می‌باشد. در صورتی که جاب در وضعیت انتظار باشد، ستون آخر علت آنرا نشان می‌دهد، عبارت Resource در ستون آخر به معنی فراهم نبودن منابع درخواستی و عبارت AssocGrpBilling به معنی کم بودن مبلغ شارژ برای اتمام جاب با منابع درخواستی می‌باشد. برای جاب‌هایی که در حالت اجرا هستند، ستون هشتم زمانی که جاب در حال اجرا بوده را نشان می‌دهد و ستون نهم بیانگر زمان باقیمانده تا اتمام اجرا می‌باشد. در صورتی که عبارت Invalid در این ستون ظاهر شود، به این معنی است که اجرای برنامه از زمان پیش بینی شده بیشتر طول کشیده است، و بهتر است قبل از قطع شدن اجرا، با استفاده از دستور [update-job-time](#) زمان اجرای برنامه را اصلاح کنید.

برای قطع کردن یک یا چند اجرا، از دستور scancel <JobID> استفاده می‌شود، به عنوان مثال:

scancel 5894,5983

اگر بخواهید تمام جاب‌های خود را کنسل کنید از دستور scancel -u \$USER استفاده کنید.

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

```
u111112@login2: → sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
short      up          30:00     1    idle master-tyan
gpu        up          40-00:00:0  1    down* en-7-1
gpu        up          40-00:00:0  1    mix   en-7-2
amd128     up          40-00:00:0  2    mix   en-7-[6-7]
amd48*     up          120-00:00:  8    down* cn-11-[1-8]
amd48*     up          120-00:00:  5    mix   cn-12-[1-3,6],cn-13-2
amd48*     up          120-00:00:  1    alloc cn-13-1
amd48*     up          120-00:00:  11   idle  cn-12-[4-5,7-8],cn-13-[3-9]
```

با توجه به خروجی فوق، در حال حاضر، چهار پارتیشن `short`، `gpu`، `amd128`، `amd48` 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>`

به عنوان مثال:

```
u111112@login2: → scontrol show partition amd48
PartitionName=amd48
AllowGroups=ALL AllowAccounts=ALL AllowQos=ALL
AllocNodes=ALL Default=YES QoS=N/A
DefaultTime=NONE DisableRootJobs=NO ExclusiveUser=NO GraceTime=0 Hidden=NO
MaxNodes=UNLIMITED MaxTime=90-00:00:00 MinNodes=0 LLN=NO MaxCPUsPerNode=UNLIMITED
Nodes=cn-12-[1-8],cn-13-[1-9]
PriorityJobFactor=1 PriorityTier=1 RootOnly=NO ReqResv=NO OverSubscribe=NO
OverTimeLimit=NONE PreemptMode=OFF
State=UP TotalCPUs=816 TotalNodes=17 SelectTypeParameters=NONE
JobDefaults=(null)
DefMemPerNode=UNLIMITED MaxMemPerNode=90500
TRES=cpu=816,mem=1643050M,node=17,billing=85782
TRESBillingWeights=CPU=54,Mem=26G,GRES/gpu=3900
u111112@login2: → █
```

عبارت `TRESBillingWeights` که در سطر آخر نمایش داده شده است، برای محاسبه هزینه اجرا استفاده می‌شوند به عبارتی در پارتیشن فوق هزینه هر اجرا به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\{(N_{cpu} \times 54) + (Mem(GB) \times 26) + (GPU \times 3900)\} \times Time(Hours)$$

نکته مهم: منابع و زمان درخواستی در هنگام ثبت درخواست سرویس صرفاً برای برآورد هزینه می‌باشند و در هنگام استفاده از کلاستر به عنوان محدودیت اعمال نمی‌شوند. به عنوان مثال اگر شما درخواست یک سرویس ۳۰ روزه داده باشید و اکانت کلاستر در اختیار شما قرار گیرد، تا هنگامی که کل اعتبار شما مصرف شود می‌توانید از کلاستر استفاده نمایید. با استفاده از دستور `my_usage` می‌توانید از کل اعتبار و میزان مصرف خود آگاه شوید.

نکته: با استفاده از دستور `vasp_clean` می‌توانید تمام خروجی‌های یک اجرا را پاک کنید.