



مرحله ۱) فایل `bashrc` موجود در خانه خود را ویرایش کنید و چند دستور به صورت زیر در آن وارد کنید. دقت کنید که در خط دوم، به جای کلمه `mahmood`، از نام کاربری خود استفاده کنید. همچنین از قرار دادن فولدر `scratch` در `home folder` خود، اجتناب کنید. مانند مثال زیر آن را در `/state/partition1` قرار دهید.

```
export g09root=/usr/local/chem/g09-64-D01/
export GAUSS_SCRDIR=/state/partition1/tmp/mahmood/Gaussian/scratch
export GAUSS_EXEDIR=/usr/local/chem/g09-64-D01/
export G09BASIS=/usr/local/chem/g09-64-D01/basis/
export GAUSS_BSDDIR=/usr/local/chem/g09-64-D01/bsd/
export PATH=$PATH:/usr/local/chem/g09-64-D01
```

مرحله ۳) دستور زیر را اجرا کنید تا تغییرات داده شده در فایل `bashrc` به سیستم اعمال شود.

```
[mahmood@rocks7: ~]$ source ~/.bashrc
```

مرحله ۴) فایل ورودی (فایل‌های با پسوند `gif` یا `inp`) را باز کنید و پارامتر تعداد هسته‌ها را با توجه به بسته‌ای که خریداری کردید، تغییر دهید. به عنوان مثال، دستورات زیر نشان می‌دهند که برای اجرای این برنامه به ۴ هسته نیاز است و حجم حافظه مورد نیاز ۵ گیگابایت است.

```
%NProcShared=4
%mem=5gb
%rwf=
```

مرحله ۵) یک اسکریپت برای برنامه مدیر کار `slurm` بنویسید (فایل `slurm_script.sh`) و محتوای آن را به صورت زیر تغییر دهید. توجه کنید که قسمت‌هایی که با رنگ قرمز نوشته شده‌اند، ثابت هستند و قسمت‌هایی که با رنگ آبی نوشته شده‌اند، بسته به نیاز کاربر می‌تواند تغییر کند. عدد نوشته شده در جلوی پارامتر `ntasks` همان عددی باید باشد که در پارامتر `%NProcShared` فایل `gif` نوشته شده است. اگر از طرح الماس استفاده می‌کنید، مقدار پارامتر `--partition` را `DIAMOND` و اگر از طرح زمرد استفاده می‌کنید، مقدار پارامتر `--partition` را `EMERALD` بنویسید.

```
#!/bin/bash
#SBATCH --output=test.out
#SBATCH --job-name=testg
#SBATCH --ntasks=4
#SBATCH --mem=8GB
#SBATCH --partition=MONTHLY1
g09 test.gjf
```

مرحله ۶) با استفاده از دستور `sbatch` می‌توانید اسکریپت خود را به مدیر کار ارسال کنید و در ادامه از دستور `squeue` استفاده کنید تا اجرای آن را مشاهده کنید. در صورتی که می‌خواهید برنامه در حال اجرا را متوقف کنید، از دستور `scancel` که مقدار `JOBID` را می‌پذیرد استفاده کنید. به مثال زیر توجه کنید:

اجرای برنامه Gaussian09 با استفاده از SLURM



```
[mahmood@cluster: ~]$ sbatch slurm_script.sh
[mahmood@cluster: ~]$ squeue
      JOBID PARTITION     NAME     USER  ST       TIME  NODES NODELIST(REASON)
       68   CLUSTER    testg    mahmood  R       0:52      1 compute-0-3
[mahmood@cluster: ~]$ scancel 68
[mahmood@cluster: ~]$ squeue
      JOBID PARTITION     NAME     USER  ST       TIME  NODES NODELIST(REASON)
[mahmood@cluster: ~]$
```