محمود نادران طحان

۹۵/۱۰/۱۹

نسخه ۳

اجرای برنامه LAMMPS با استفاده از برنامه مدیر کار

قبلاً درباره ضرورت استفاده از برنامه مدیر کار و نحوه ارسال یک کار (اجرای یک برنامه) به آن توضیح داده شد. در این راهنما نحوه تعامل برنامه مدیر کار را با برنامه LAMMPS که یک برنامه تحلیل مولکولی است، فرا خواهیم گرفت. در ادامه فرض می‌شود که خواننده با مفاهیم اصلی برنامه مدیر کار (فرمت اسکریپت و ارسال آن) آشنایی دارد[۱]. برای ارسال برنامه به مدیر کار، مراحل زیر را طی کنید.

مرحله ۱) ابتدا یک اسکریپت که شامل راهنماهای PBS و دستور اجرایی است، آماده کنید. توجه کنید که قسمت‌هایی که با رنگ قرمز نوشته شده‌اند، ثابت هستند و قسمت‌هایی که با رنگ آبی نوشته شده‌اند، بسته به نیاز کاربر می‌توانند تغییر کنند. همچنین عدد نوشته شده در جلوی پارامتر ppn، مشخص کننده حداکثر تعداد هسته‌های اختصاص یافته است که توسط مدیر سیستم اعلام می‌شود. همان طور که مشاهده می‌کنید، نیازی به استفاده از سوئیچ np- در دستور lmp_mpi نیست.

```
#!/bin/bash
#PBS -V
#PBS -q default
#PBS -j oe
#PBS -l nodes=1:ppn=4
#PBS -N job1
#PBS -o /path/to/log/file
cd $PBS_O_WORKDIR
/share/apps/computer/openmpi-2.0.1/bin/mpirun     /share/apps/mechanics/lammps-17Nov16/src/lmp_mpi < file.input
```

مرحله ۲) با استفاده از دستور qsub می‌توانید اسکریپت خود را به مدیر کار ارسال کنید و در ادامه از دستور qstat استفاده کنید تا اجرای آن را مشاهده کنید.

```
mahmood@cluster:~$ qsub tor.sh
mahmood@cluster:~$ qstat
Job id                    Name             User            Time Use S Queue
------------------------- ---------------- --------------- -------- - -----
145.cluster                job1               Mahmood        229:25:4 R default
```

نکته:

۱- برای حذف برنامه از صف اجرا (به هر دلیل) می‌توانید از دستور qdel استفاده کنید. این دستور شماره کار را نیاز دارد (به عنوان مثال ۱۴۵ در مثال بالا)

۲- بعد از اجرای برنامه، وضعیت آن از R به C تغییر می‌یابد.

[۱] برای یادآوری، به راهنمای مربوطه به آدرس http://scuhpcc.blog.ir/1395/04/16 مراجعه کنید.