محمود نادران طحان

۹۵/۰۷/۰۲

نسخه ۲

اجرای برنامه Siesta 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 Siesta-4.0 فرا خواهیم گرفت. در ادامه فرض می‌شود که خواننده با مفاهیم اصلی برنامه مدیر کار (فرمت اسکریپت و ارسال آن) آشنایی دارد[۱]. نرم افزار Siesta یک برنامه تحلیل مولکولی است که در تحقیقات شیمی-فیزیک مورد استفاده قرار می‌گیرد. برای ارسال برنامه به مدیر کار، مراحل زیر را طی کنید.

مرحله ۱) یک فایل به نام hosts.txt در فولدر خانه خود (home) ایجاد کنید و نام گره‌های پردازشی را در آن بنویسید. برای این منظور دستورات زیر را وارد کنید.

```
mahmood@cluster:~$ echo "compute-0-0" >> ~/hosts.txt
mahmood@cluster:~$ echo "compute-0-1" >> ~/hosts.txt
mahmood@cluster:~$ echo "compute-0-2" >> ~/hosts.txt
mahmood@cluster:~$ echo "compute-0-3" >> ~/hosts.txt
```

مرحله ۲) یک اسکریپت برای مدیر کار بنویسید (فایل tor.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. دقت کنید که در این اسکریپت ۳ پارارمتر X، Y و Z وجود دارد که هر یک از آن ها عدد هستند. X به معنی تعداد گره‌های پردازشی مورد نیاز است که حداکثر می‌تواند عدد ۴ باشد. Y به معنی تعداد هسته‌های لازم از هر گره پردازشی است و Z به عنوان یکی از پارامترهای دستور mpirun باید برابر حاصل ضرب X در Y باشد. به عنوان مثال، nodes=2:ppn=4 به معنی آن است که از دو گره پردازشی که در فایل hosts.txt نوشته شده است استفاده شود و در هر گره پردازشی، ۴ هسته برای اجرای برنامه مورد نیاز است. در این صورت مقدار Z برابر ۸ خواهد بود. به عنوان یک مثال دیگر، اگر nodes=1:ppn=2 باشد، به معنی آن است که از دو هسته یکی از گره‌های پردازشی استفاده شود. در این صورت پارامتر Z برابر ۲ خواهد بود.

```
#!/bin/bash
#PBS -V
#PBS -q default
#PBS -j oe
#PBS -l nodes=X:ppn=Y
#PBS -N job1
#PBS -o /path/to/log/file
cd $PBS_O_WORKDIR
/share/apps/computer/openmpi-2.0.0/bin/mpirun -hostfile hosts -np Z
/share/apps/chemistry/siesta-4.0/spar/siesta < input.fdf
```

مرحله ۳) 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.

[۱] برای یادآوری، به راهنمای مربوطه به آدرس http://scuhpcc.blog.ir/1395/04/16 مراجعه 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: برای اجرای transiesta به صورت موازی، فقط کافی است از دستور `/share/apps/chemistry/siesta-4/tpar/transiesta` در فایل tor.sh استفاده کنید.