

C7800

Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

Referenční manuál - Infinity

Petr Kulháněk

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

Infinity

<https://lcc.ncbr.muni.cz/whitezone/development/infinity/>

Přehled příkazů

Správa software:

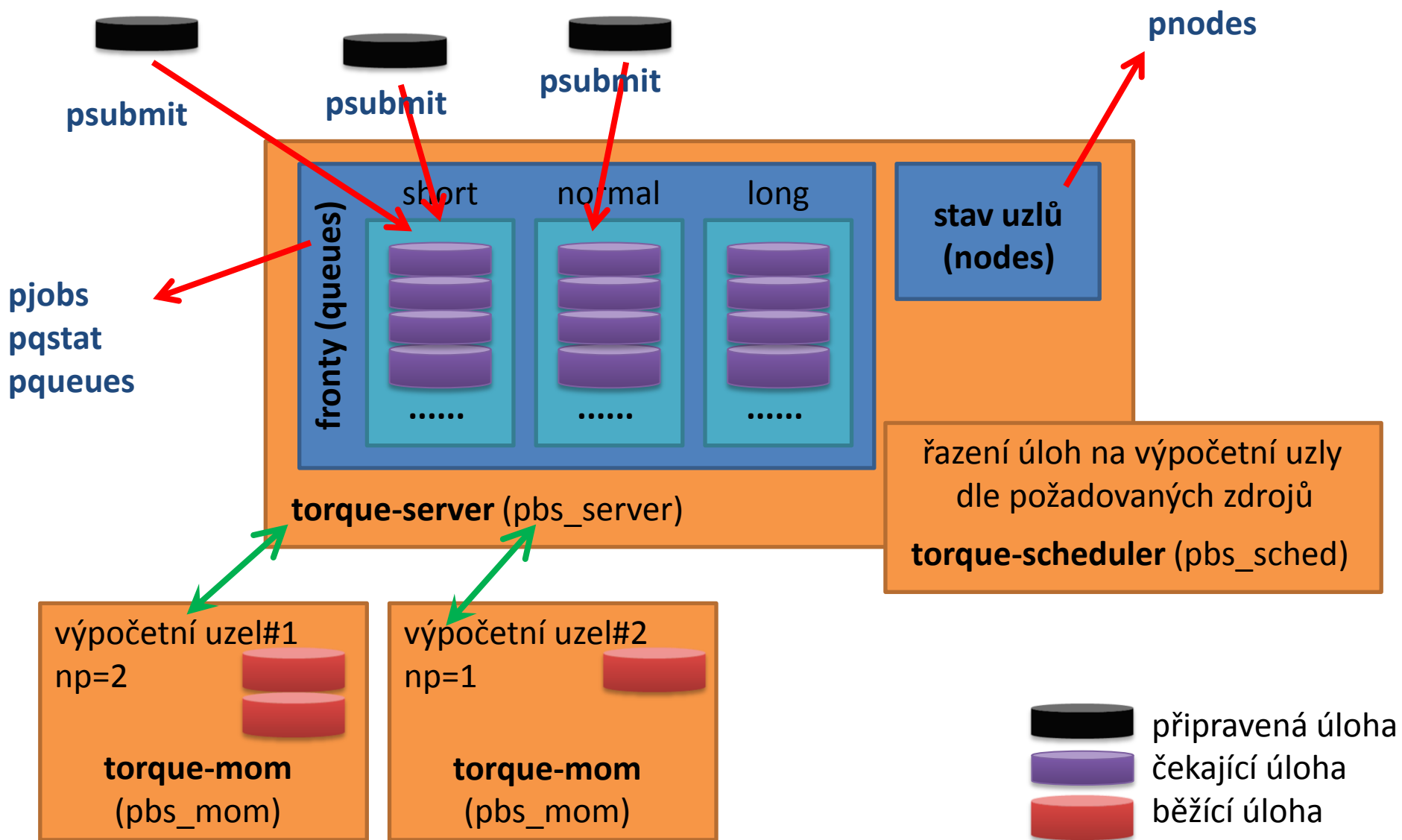
- **module** aktivace/deaktivace software

Správa úloh:

- **psubmit** zadání úlohy do dávkového systému
- **pinfo** informace o úloze
- **pgo** přihlásí uživatele na výpočetní uzel, kde se úloha vykonává
- **pjobs** přehled úloh uživatele zadaných do dávkového systému

Další užitečné příkazy: pqueues, pnodes, pqstat

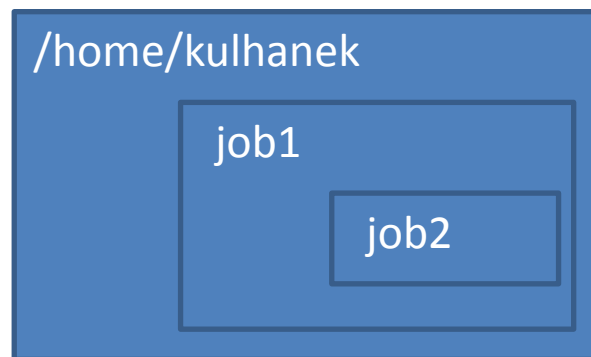
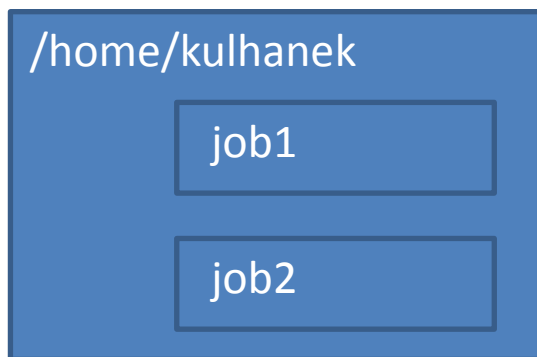
Životní cyklus úlohy



Úloha

Úloha **musí splňovat** následující podmínky:

- každá úloha se spouští v samostatném adresáři
- všechny vstupní data úlohy musí být v adresáři úlohy
- adresáře úloh nesmí být do sebe zanořené
- průběh úlohy je řízen skriptem nebo vstupním souborem (u automaticky detekovaných úloh)
- skript úlohy musí být v bashi
- ve skriptu úlohy se nesmí používat absolutní cesty, všechny cesty musí být uvedeny relativně k adresáři úlohy



Spuštění úlohy v gaussianu

Úlohy v programu Gaussian budeme spouštět vždy přes rozhraní Infinity. Úlohy budeme spouštět na 1 CPU ve frontě normal, kde výpočetní uzel bude vaše pracovní stanice.

```
$ module add gaussian
$ psubmit localhost@normal soubor.com
```

aktivace modulu gaussian
pouze jednou v daném terminálu

úloha bude zařazena do fronty normal
(max imální doba běhu úlohy 12 hodin)
běh úlohy je omezen pouze na vaší
pracovní stanici

vstupní soubor pro program gaussian

Po doběhnutí úlohy bude **výsledek výpočtu** uložen v souboru **soubor.log**

K monitorování průběhu úlohy lze použít příkaz **pinfo**, který se spouští v adresáři úlohy. Dalšími možnostmi jsou příkazy **pjobs** a **pqstat**.

Pokud je úloha spuštěna, je možné použít příkaz **pgo**, který vás přihlásí na výpočetní uzel a změní aktuální adresář do pracovního adresáře úlohy. Lze tak kontrolovat průběh výpočtu za běhu úlohy.

Servisní soubory

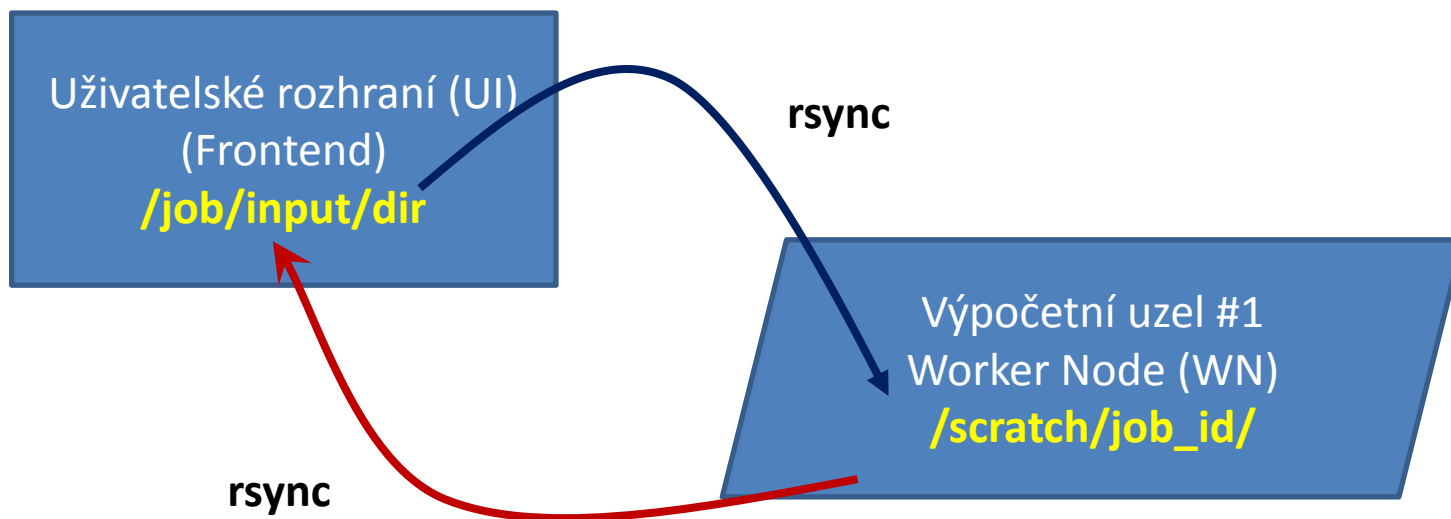
V adresáři úlohy vznikají při zadání úlohy do dávkového systému a dále v průběhu života úlohy a po jejím ukončení servisní soubory. Jedná se o textové soubory, které je možné analyzovat pomocí libovolného textového prohlížeče (příkazy less, more) či editoru (vi, kwrite, gedit). **Pro účely cvičení je možné obsah souborů ignorovat, kromě případů, kdy úloha nedoběhne v pořádku.**

Význam souborů je následující:

- *.info kontrolní soubor s informacemi o průběhu úlohy
- *.infex vlastní skript (wrapper), který se spouští dávkovým systémem
- *.infout standardní výstup z běhu *.infex skriptu, **nutno analyzovat při nestandardním ukončení úlohy**
- *.nodes seznam uzlů vyhrazených pro úlohu
- *.gpus seznam GPU karet vyhrazených pro úlohu
- *.key unikátní identifikátor úlohy
- *.stdout **standardní výstup z běhu skriptu úlohy, nutno analyzovat při nestandardním ukončení úlohy**

Přenos dat

Typ synchronizace	Význam
sync	Data úlohy jsou při spuštění úlohy zkopírována ze vstupního adresáře do pracovního adresáře. Pak je spuštěn vlastní výpočet. Po jeho doběhnutí jsou všechna data z pracovního adresáře zkopírována zpět do vstupního adresáře úlohy.



Poznámky:

- výchozí synchronizační mód
- při použití `localhost@normal` je výpočetní uzel a uživatelské rozhraní identický stroj