

TSM

Modelování molekulárních struktur

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:

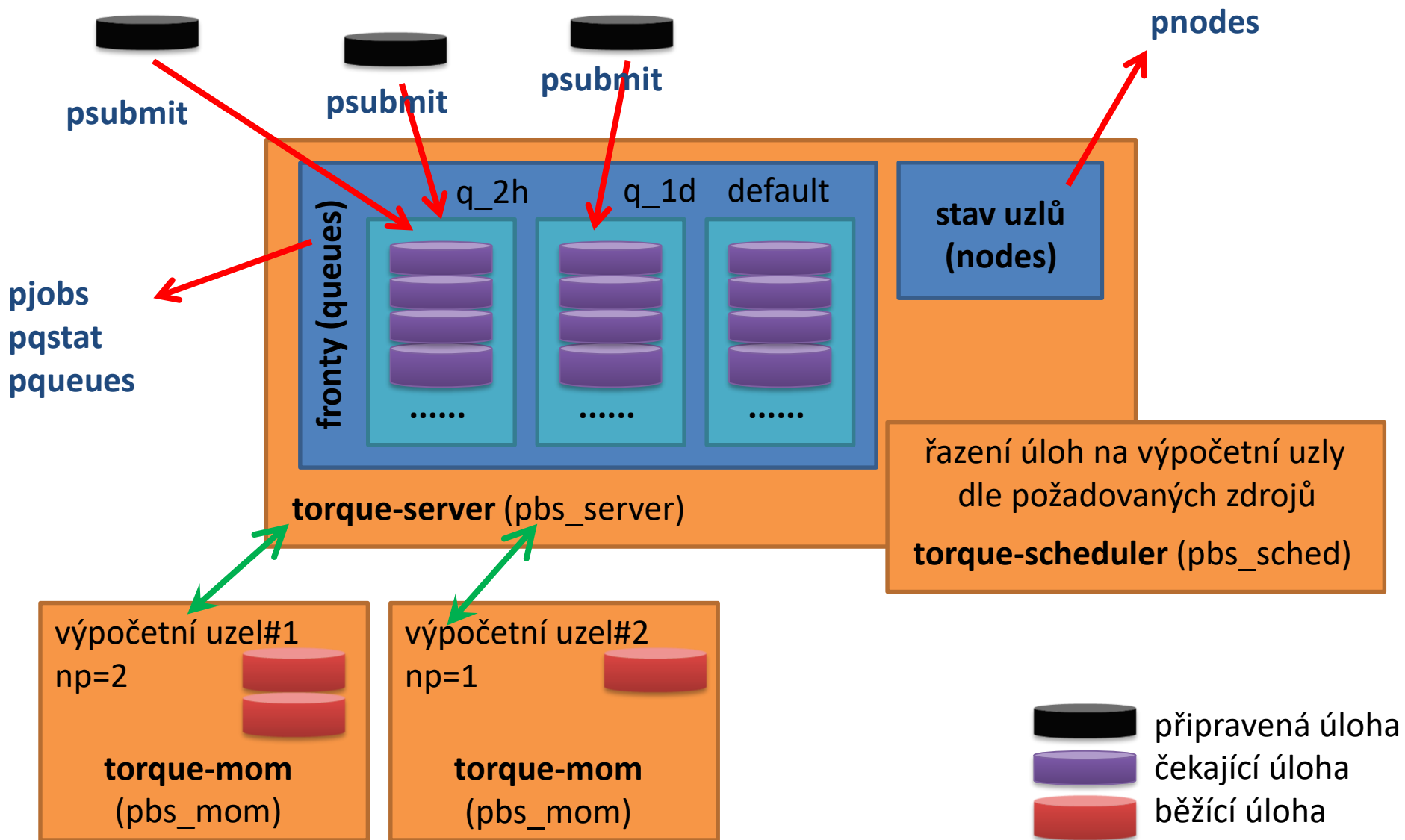
- **module** aktivace/deaktivace software

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

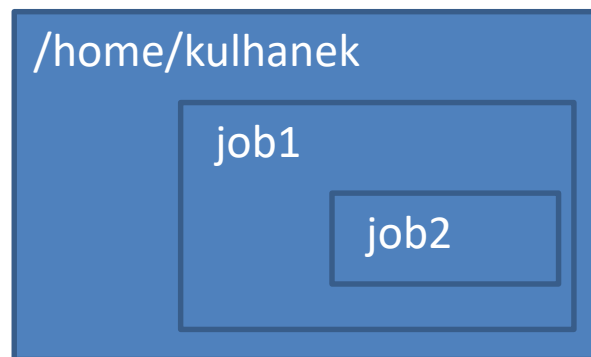
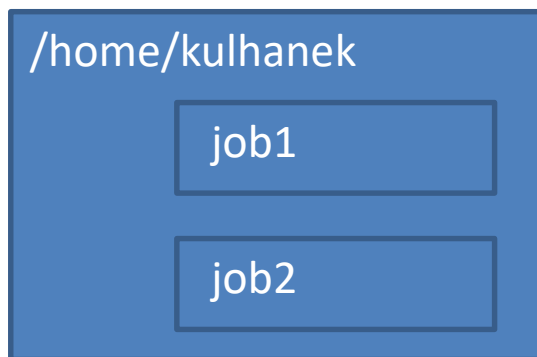
Životní cyklus úlohy



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  
$ qsub default soubor.com
```

aktivace modulu gaussian
pouze jednou v daném terminálu

úloha bude zařazena do fronty **default**

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

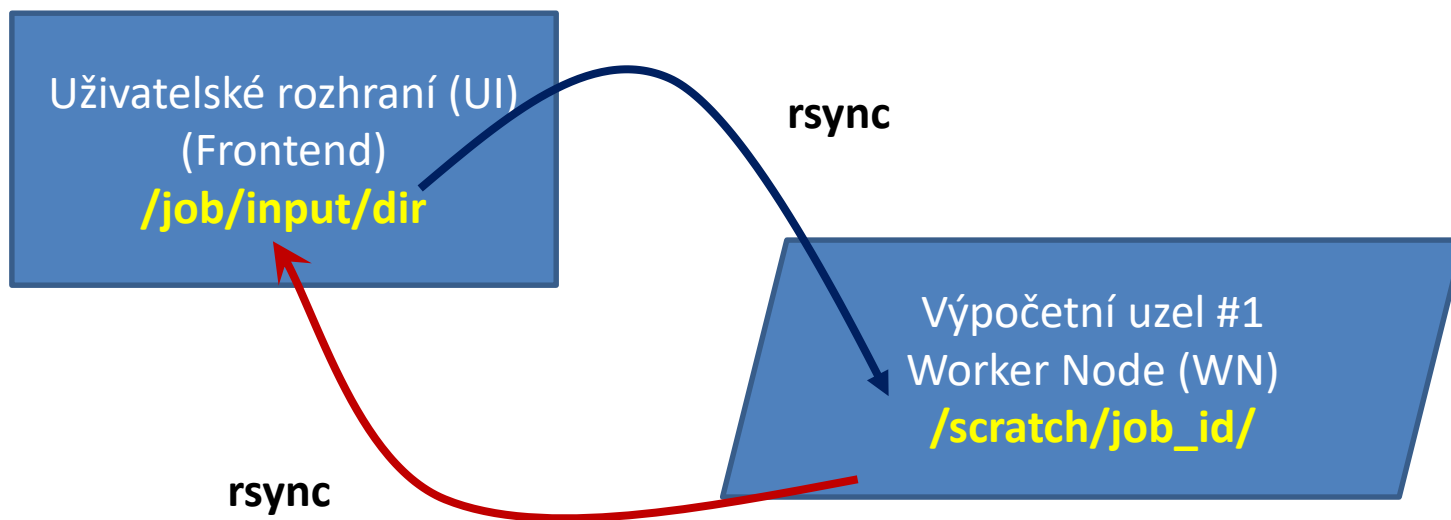
V adresáři úlohy vznikají při zadání úlohy do dávkového systému a dále v průběhu života úlohy a po jejím ukončení servisní soubory. Jedná se o textové soubory, které je možné analyzovat pomocí libovolného textového prohlížeče (příkazy less, more) či editoru (vi, kwrite, gedit). **Pro účely cvičení je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