

# Referenční manuály

Infinity

Petr Kulhánek

[kulhanek@chemi.muni.cz](mailto: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:

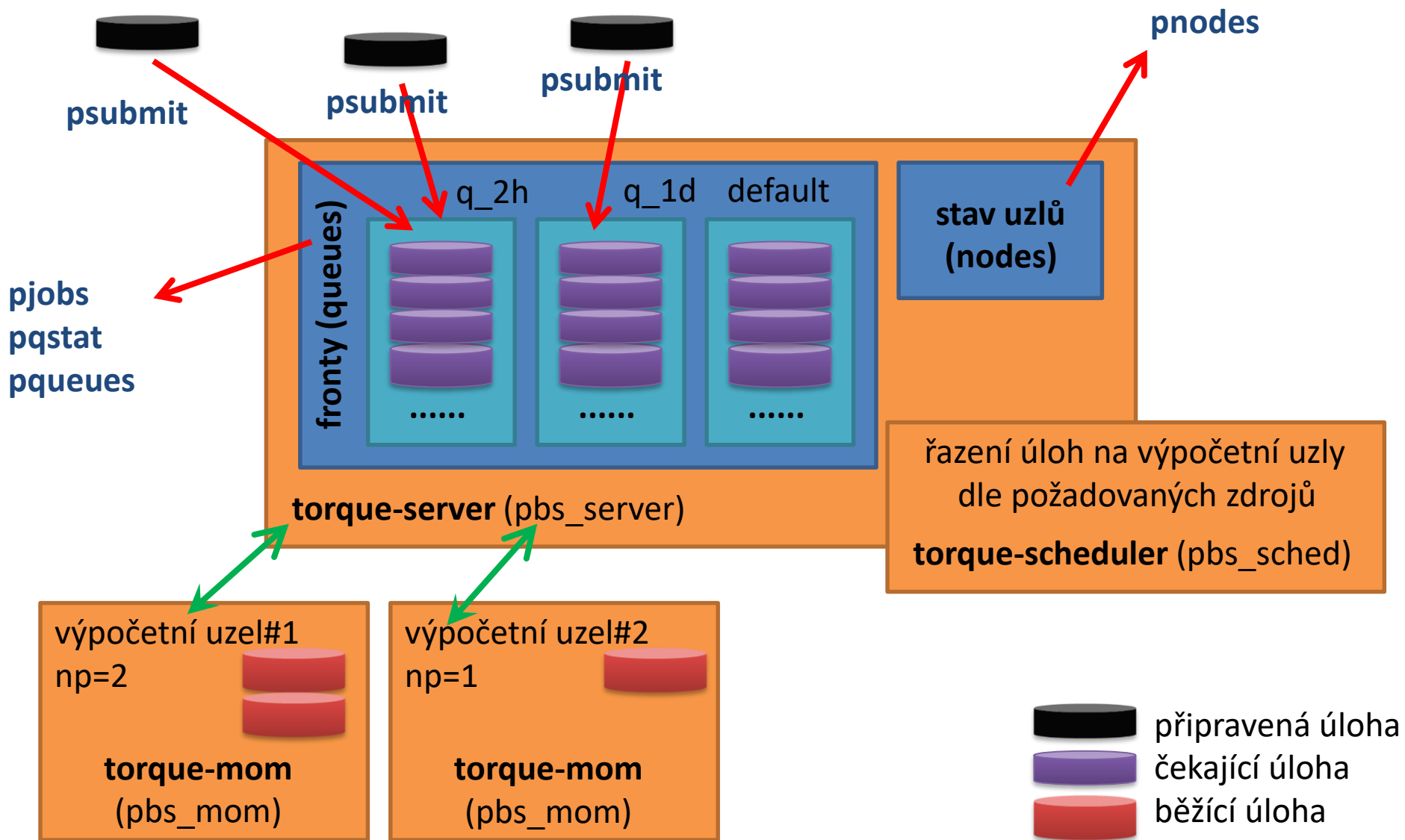
- **module**      aktivace/deaktivace software

## 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

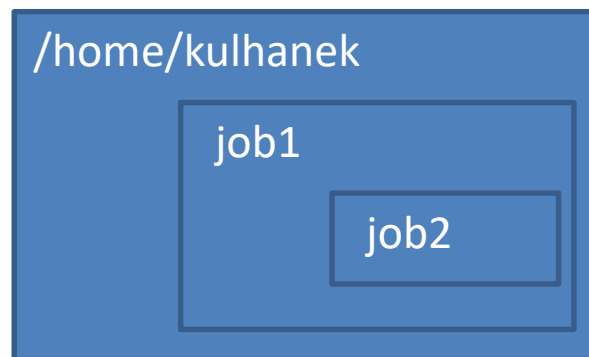
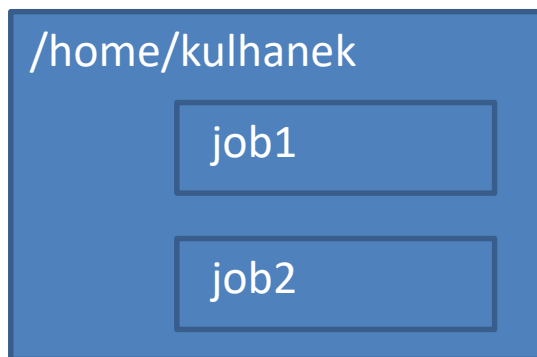
# Životní cyklus úlohy



# 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

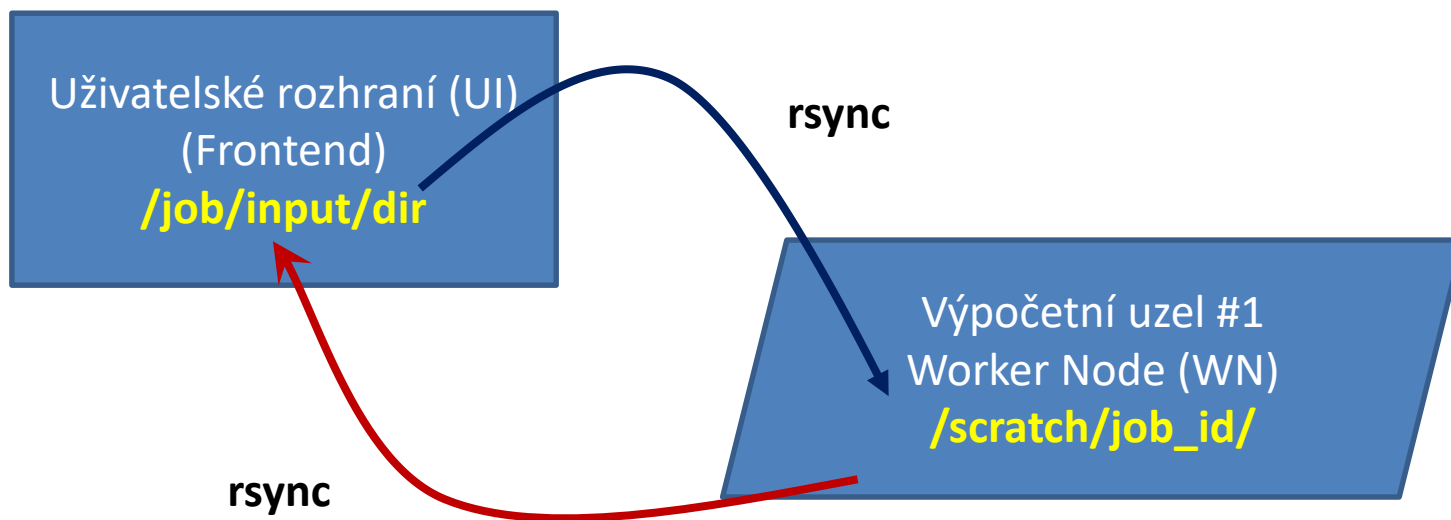
V adresáři úlohy vznikají při zadání úlohy do dávkového systému a dále v průběhu života úlohy a po jejím ukončení servisní soubory. Jedná se o textové soubory, které je možné analyzovat pomocí libovolného textového prohlížeče (příkazy less, more) či editoru (vi, kwrite, gedit). **Pro účely cvičení je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