

اجرای پکیج لمپس روی خوشه محاسباتی سَفران

نحوه اجرای برنامه های مربوط به پکیجهای محاسباتی نیز کم و بیش مانند اجرای کدهای معمولی است. برای مثال در اینجا کاربر reza قصد دارد یک شبیه سازی آزمایشی را با استفاده از نرم افزار LAMMPS، روی خوشه اجرا کند. کاربر قبلا نرم افزار را در دایرکتوری home خود نصب کرده و فایل اجرایی با نام lmp_mpi را نیز با موفقیت تولید کرده است. کاربر همچنین اسکریپت شبیه سازی (in.lj) و اسکریپت صف (in - lj.sh) را آماده کرده و در پوشه test-lammps قرار داده است.

```
[reza@saffron test-lammps]$ ls
in.lj  in-lj.sh
[reza@saffron test-lammps]$ nano in-lj.sh
```

با نگاه به اسکریپت صف مشاهده می کنید که پس از دستور mpirun، ابتدا آدرس فایل اجرایی و سپس آدرس اسکریپت شبیه سازی (که حاوی داده های ورودی شبیه سازی است) آورده شده است.

```
GNU nano 2.0.9      File: in-lj.sh
#!/bin/bash
#
#$ -cwd
#$ -j y
#$ -S /bin/bash
#
mpirun $HOME/lammps-29Aug14/src/lmp_mpi <in.lj

[ Read 8 lines ]
^G Get He^O WriteO^R Read E^Y Prev E^K Cut Te^C Cur Pos
^X Exit  ^J Justif^W Where ^V Next E^U UnCut ^T To Spell
```

ارسال اسکریپت صف روی خوشه چنین است:

```
mpi za@smpi on test-lammps]$ qsub -pe orte 16 -q rack-1.q in-lj.sh
Your job 44 ("in-lj.sh") has been submitted
[reza@saffron test-lammps]$
```

پس از پایان اجرا، علاوه بر فایل های خروجی SGE، فایل های خروجی نرم افزار LAMMPS نیز تولید خواهند شد (مثل فایل log.lammps)

```
[reza@saffron test-lammps]$ ls
in.lj  in-lj.sh  in-lj.sh.o44  in-lj.sh.po44  log.lammps
[reza@saffron test-lammps]$
```

در اینجا محتوای فایل خروجی in - lj.sh.o44 را می توانید مشاهده کنید:

```

[reza@saffron test-lammps]$ cat in-lj.sh.o44
LAMMPS (29 Aug 2014)
Lattice spacing in x,y,z = 1.6796 1.6796 1.6796
Created orthogonal box = (0 0 0) to (167.96 167.96 167.96)
  2 by 2 by 4 MPI processor grid
Created 4000000 atoms
Setting up run ...
Memory usage per processor = 42.3553 Mbytes
Step Temp E_pair E_mol TotEng Press
   0          1.44 -6.7733681          0 -4.6133686 -5.0196696
 100  0.75932016 -5.7612878          0 -4.6223079  0.19054797
Loop time of 35.0282 on 16 procs for 100 steps with 4000000 atoms

Pair time (%) = 17.8894 (51.0714)
Neigh time (%) = 2.15841 (6.16192)
Comm time (%) = 13.7326 (39.2043)
Outpt time (%) = 0.0305565 (0.087234)
Other time (%) = 1.21726 (3.4751)

Nlocal:      250000 ave 250200 max 249824 min
Histogram:  2 3 1 1 1 1 2 3 1 1
Nghost:      75318.5 ave 75475 max 75140 min
Histogram:  2 3 1 0 2 1 0 1 1 5
Neighs:      9.38904e+06 ave 9.42544e+06 max 9.36203e+06 min
Histogram:  1 5 0 1 4 1 1 0 1 2

Total # of neighbors = 150224627
Ave neighs/atom = 37.5562
Neighbor list builds = 5
Dangerous builds = 0
[reza@saffron test-lammps]$ █

```

بعضی از نسخه‌های LAMMPS کامپایل شده و فایل‌های اجرایی حاصل برای استفاده همه کاربرها در پوشه اشتراکی قرار گرفته است. برای اطلاعات بیشتر می‌توانید لیست بگیرید:

```

[reza@saffron test]$ ls /share/apps/LAMMPS/
11Aug17          14Feb15          31Mar17          31Mar17_rigid
11Aug17_gpu     29Aug14          31Mar17_granular
[reza@saffron test]$ ls /share/apps/LAMMPS/

```

برای استفاده از این فایل‌های اجرایی باید در اسکریپت صف، از آدرس پوشه اشتراکی استفاده کنید:

```

[reza@saffron test]$ cat in-lj.sh
#!/bin/bash
#
#$ -cwd
#$ -j y
#$ -S /bin/bash
#
mpirun /share/apps/LAMMPS/31Mar17 <in.lj

[reza@saffron test]$

```