

PBS Betiği Hazırlama & PBS Komutları

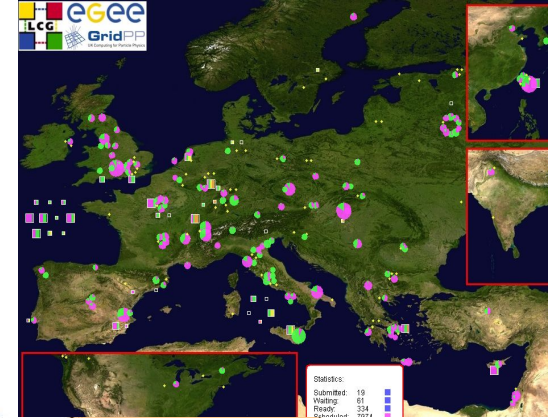
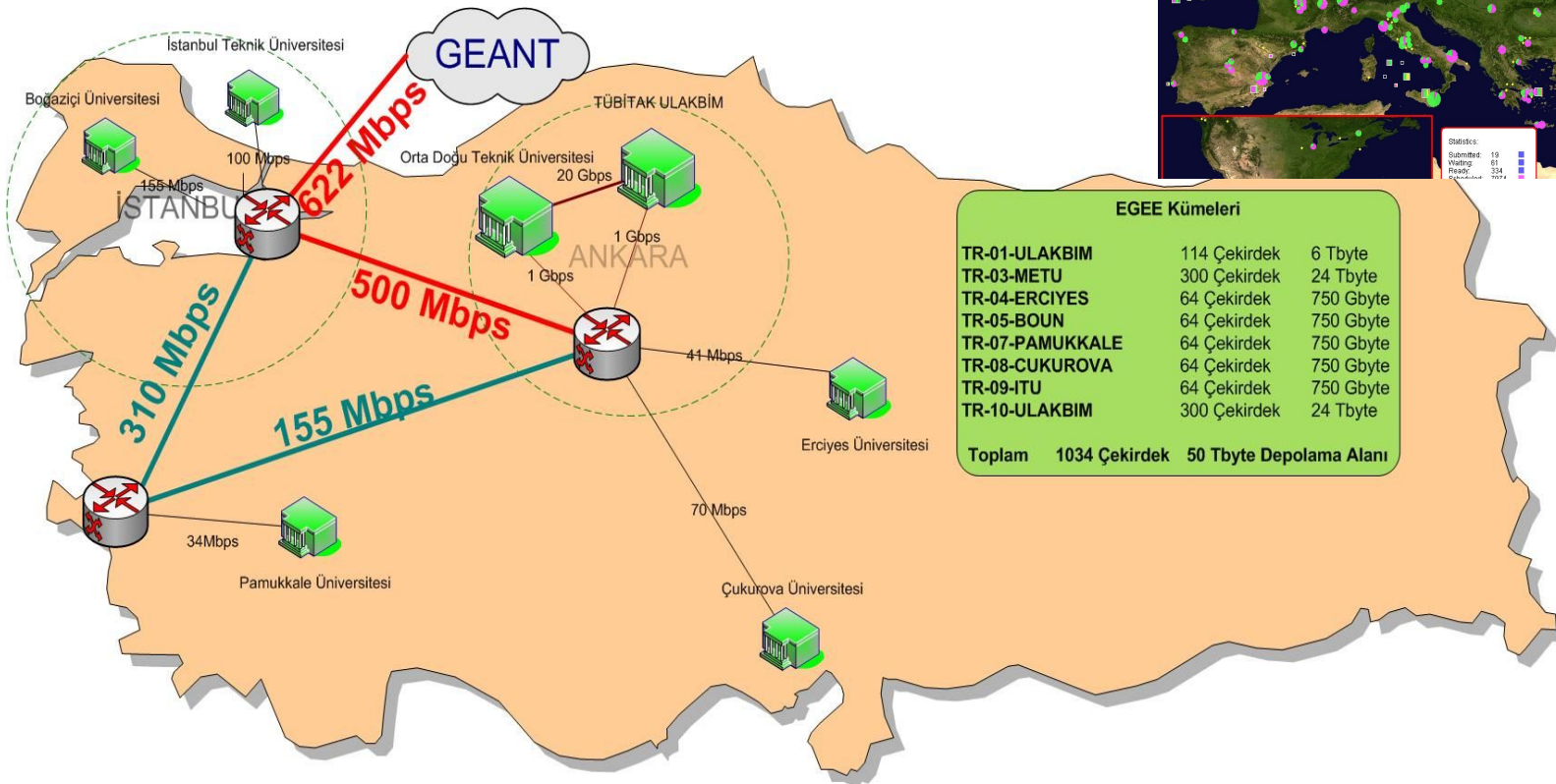
Feyza Eryol

feYZa@ulakbim.gov.tr

<http://www.grid.org.tr>

<http://wiki.grid.org.tr>

grid-teknik@ulakbim.gov.tr



EGEE Kümeleri

TR-01-ULAKBİM	114 Çekirdek	6 Tbyte
TR-03-METU	300 Çekirdek	24 Tbyte
TR-04-ERCIYES	64 Çekirdek	750 Gbyte
TR-05-BOUN	64 Çekirdek	750 Gbyte
TR-07-PAMUKKALE	64 Çekirdek	750 Gbyte
TR-08-CUKUROVA	64 Çekirdek	750 Gbyte
TR-09-ITU	64 Çekirdek	750 Gbyte
TR-10-ULAKBİM	300 Çekirdek	24 Tbyte

Toplam 1034 Çekirdek 50 Tbyte Depolama Alanı

- **Bir sitenin küme olarak kullanılabilmesi için ihtiyaç duyulanlar:**
 - Paylaştırılmış ev dizinleri
 - Her düğümde aynı işletim sisteminin bulunması
 - Her düğümde aynı kütüphane ve derleyicilerin bulunması
- **Bu yapıdaki TR-Grid Siteleri**
 - TR-01-ULAKBIM: 114 çekirdek, P4 2.66 Ghz, 1 GB Bellek
 - TR-03-METU: 312 çekirdek, Xeon 1.66Ghz, 4 GB Bellek
 - TR-10-ULAKBIM: 300 çekirdek, Xeon 1.66Ghz, 4 GB Bellek

- **TR-Grid Siteleri sistem Bileşenleri**

- İşletim Sistemi: Scientific Linux 4.5
- Orta Katman: Torque PBS, Maui
- Geliştirme Ortamları:
 - Derleyiciler: GNU, Intel
 - Kütüphaneler: MPICH, LAM/MPI, FFTW, ATLAS, Intel-MKL, TCL/TK,..
- Paket Programlar:
 - Lisanslı: Gaussian, Vasp, Amber, Gromos, CPMD, MolPRO,..
 - Lisanssız: Gamess, Siesta, Espresso, NAMD, Abinit, Exciting, PgaPack, R, Charm++, OCTA,..

- **PBS sunucusu yardımı ile hesaplama düğümlerinde çalıştırılmak istenilen uygulamanın, kullanıcının belirlediği parametreler ile gönderilmesini sağlar.**
 - İhtiyaç duyulan kaynakları tanımlar: işlemci, bellek gereksinimleri, v.b.
 - Öncelik belirtebilir,
 - Çalışma zamanı belirtebilir,
 - İşin başlama ve bitiş zamanlarında e-posta gönderebilir,
 - Diğer işler ile zamanlama uyumu sağlayabilir.

- **En basit anlamda, PBS betiği ile birlikte iş çalıştırabilmek için:**
 - Bir PBS betiği oluşturmak,
 - `qsub <betik_ismi>` komutu yardımı ile hazırlanan işi PBS sunucuya aktarmak gerekmektedir.
 - **Gönderilen iş tamamlandıktan sonra, çalışma dizininizde:**
 - `İşismi.elşNumarası`
 - `İşismi.olşNumarası`
- Olmak üzere standart hata ve çıktı dosyalarının oluşmasını sağlar.

- **PBS Betikleri herhangi bir betik dilinde hazırlanabilir: csh, bash, tcsh, sh, perl, v.b.**
- **Hazırladığınız betiğin çalıştırılabilir olması önemli değil, betik içinde göndermek istediğiniz işin çalıştırılabilir olması önemlidir.**
- **Bir PBS betiğinin ana yapısını şu şekilde özetleyebiliriz:**
 - PBS Seçenekleri
 - Shell Komutları
 - Hesaplama düğümlerine göndermek istediğiniz işiniz ve parametreleri

- **#PBS -V:** İşin gönderildiği shellden çevre değişkenlerinin taşınmasını sağlar.
- **#PBS -l:** İşin gereksinin duyduğu kaynakları listeler:
 - #PBS -l nodes=2:ppn=2
 - #PBS -l mem=4gb
- **#PBS -N:** İşin ismini belirler:
 - #PBS -N hello_world
- **#PBS -l:** İşin gönderildiği kuyruğu ve bu kuyruğun bulunduğu PBS sunucusunu tanımlar:
 - #PBS -q sgdemo@ce.ulakbim.gov.tr
- **#PBS -M:** İş ile ilgili geri bildirimlerin gönderileceği e-posta adresini belirler.
 - #PBS -M feyza@ulakbim.gov.tr
- **#PBS -m:** İş ile ilgili bilgilendirme durumlarını belirler.
 - #PBS -m bae: [b]egin, [a]bort, [e]nd


```
#!/bin/sh
```

```
#PBS -q sgdemo@ce.ulakbim.gov.tr
```

```
#PBS -n ornek_pbs
```

```
#PBS -l nodes=1:ppn=1
```

```
#PBS -V
```

```
#
```

```
#
```

```
export CALISMA_DIZINI="/home_levrek/egtim-ui/egitimxx/pbs"
if [ "x$PBS_NODEFILE" != "x" ] ; then
    echo "PBS Nodefile: $PBS_NODEFILE" HOST_NODEFILE=$PBS_NODEFILE
fi
if [ "x$LSB_HOSTS" != "x" ] ; then
    echo "LSF Hosts: $LSB_HOSTS"
    HOST_NODEFILE=`pwd`/lsf_nodefile.$$
    for host in ${LSB_HOSTS}
    do
        echo $host >> ${HOST_NODEFILE}
    done
fi
if [ "x$HOST_NODEFILE" = "x" ]; then
    echo "No hosts file defined. Exiting..."
    exit
fi
```

```
cd $CALISMA_DIZINI
```

```
cat $HOST_NODEFILE > nodes
```

```
/home_levrek/egitim-ui/egitimxx/pbs/helloworld >out 2>err
```

qsub	Yığın işleri PBS sunucuya teslim eder.
qstat -f	Bir PBS işinin ayrıntılı durumunu gösterir.
qstat -u	Belirli bir kullanıcının PBS işlerini gösterir.
qdel	Bir PBS işinin silinmesini sağlar.
*qrun	Kuyrukta bekleyen bir PBS işinin çalıştırılmasını sağlar.

qsub [seçenekler] betik_dosyası

- PBS betiği içinde yer alan, PBS seçeneklerini qsub komutu ile birlikte komut satırından da vermeniz mümkündür:

- qsub -l nodes=4:ppn=2 betik_dosyası

- asub -l mem=4gb betik dosyası

```
[egitim1@egitim-ui pbs]$ qsub ornek_pbs1.sh  
192503.ce.ulakbim.gov.tr
```

—

qstat [seçenekler]

```
[egitim1@egitim-ui pbs]$ qstat
```

Job id	Name	User	Time Use	S	Queue
192065.ce	STDIN	see001	40:56:46	R	see
192187.ce	STDIN	see001	24:07:09	R	see
192245.ce	STDIN	see001	17:57:55	R	see
192276.ce	STDIN	atlasprd005	13:34:42	R	atlas
192280.ce	STDIN	atlasprd005	13:14:14	R	atlas
192286.ce	STDIN	atlasprd005	12:28:25	R	atlas
192291.ce	STDIN	atlasprd005	13:25:47	R	atlas

- **Bir işin durumu:**
 - E: İş çalıştı ve bitti (ended)
 - H: İş beklemeye alındı (held)
 - Q: İş kuyrukta bekliyor (queued)
 - R: İş çalışıyor (running)
 - W: İş çalışma zamanını bekliyor (waiting)

qstat -u kullanıcı_adi

```
[egitiml@egitim-ui pbs]$ qstat -u egitiml
```

```
ce.ulakbim.gov.tr:
```

Job ID	Username	Queue	Jobname	SessID	NDS	TSK	Req'd Memory	Req'd Time	Elap S	Time
192500.ce.ulakbim.go	egitiml	sgdemo	ornek_pbs_	--	2	--	--	48:00	R	--
192501.ce.ulakbim.go	egitiml	sgdemo	ornek_pbs_	--	2	--	--	48:00	R	--
192502.ce.ulakbim.go	egitiml	sgdemo	ornek_pbs_	--	2	--	--	48:00	R	--

qdel [iş_numarası_listesi]

```
[egitim1@egitim-ui pbs]$ qsub ornek_pbs4.sh  
192505.ce.ulakbim.gov.tr  
[egitim1@egitim-ui pbs]$ qdel 192505
```

- **SSH istemci programı yardımı ile:**
 - TR-03-METU UI Sunucusu: rower.ulakbim.gov.tr
 - Örnek PBS betikleri ve işlerini çalıştıralım..