

## Практическо занятие с BlueGene/P

Целта на това упражнение е стартиране на тестова задача с програмата **NAMD** на 512 изчислителни ядра на IBM BlueGene/P.

Повечето от програмните пакети на суперкомпютъра в Националния суперкомпютърен център могат удобно да се достъпват чрез променливи на обвивката и използване системата **Modules**.

Списък на съществуващите модули може да се получи чрез командата

```
module avail
```

Да разгледаме един пример за работа с програмата **NAMD**. От изхода на изпълнения команден ред се вижда, че има три достъпни версии на програмата, а именно **namd2/2.6**, **namd2/2.7b1** и **namd2/cvs20110219**

Изпълнявайки

```
module help namd2/2.6
```

можем да получим помощ за използване на модула. В конкретния случай е указано, че изпълнимия файл на програмата **NAMD2** версия 2.6 е достъпен чрез променливата на обвивката **NAMD2\_EXE**.

Нека стартираме примерна задача с тази програма. Копирайте директорията **namd\_example** в директори с избрано от вас име

```
cp -r namd_example <dir name>
```

след това сменете текущата директория с тази, чието съдържание копирахме

```
cd <dir name>
```

Както е известно съдържанието на директория може да се получи чрез командата **ls**.

Във файловете **wb.psf** и **wb.pdb** се съдържа описанието на молекулната система и началните координати, **par\_all127\_prot\_lipid.prm** – силовото поле описващо атомите и тяхното взаимодействие, **in.conf** – входните параметри за програмата **NAMD2** и **namd.jcf** е файл за стартиране на задачата с **LoadLeveler** (batch система на IBM за планиране, приоритетно изпълнение и организиране на използването на компютърните ресурси).

Зареждаме модул **namd2/2.6**

```
module load namd/2.6
```

сега пътя до програмата **namd2**, версия 2.6, е записан в променливата на обвивката **NAMD2\_EXE**.

Ако изпълним командата

```
echo $NAMD2_EXE
```

ще бъде изписана стойността на променливата на обвивката, която в конкретния случай е **/bgusr/namd2/2.6/namd2**.

За редактиране на текстови файлове можем да се използват текстовите редактори **nano**, **jpico** или **emacs** например. По-долу ще използваме текстовия редактор **nano**.

Нека разгледаме файла **namd.jcf**, отваряме файла

```
nano namd.jcf
```

примерния файл има следното съдържание:

```

#!/bin/bash
#@ job_type = bluegene
#@ class = n0128                # определя приоритета на задачата
- n0128, n0256, n0512, n1024, n2048
#@ environment = COPY_ALL
#@ wall_clock_limit = 01:00:00 #максимално време, за което може
да се изпълнява задачата
#@ error = hifng.$(jobid).err  #стандартен изход
#@ output = hifng.$(jobid).out #стандартна грешка
#@ bg_size = 128                #брой заявени процесори - 128,
256, 512, 1024, 2048
#@ queue

```

```

/bgsys/drivers/ppcfloor/bin/mpirun -exe $NAMD2_EXE -env
BG_MAPPING=TXYZ -env COREDUMPDISABLED=1 -np 512 -mode VN -args
'in.conf'

```

Трябва да се обърне внимание на следното:

- редовете започващи с #@ са директиви на **LoadLeveler**
- чрез командата **/bgsys/drivers/ppcfloor/bin/mpirun** се стартира паралелно приложение на изчислителните възли на суперкомпютъра IBM BlueGene/P.

Опции на **mpirun**:

- exe** – път до изпълнимия файл
- env** – дефиниране на променливи на обвивката видими са за изпълнимия файл
- mode** – режим на работа на процесорите на IBM BlueGene/P – VN, DUAL или SMP
- args** – лист от аргументи на изпълнимия файл
- np** – брой на използваните изчислителни ядра от 1 до 4xbg\_size(VN mode); 2xbg\_size(DUAL mode); bg\_size(SMP mode)

Необходимите команди на **LoadLeveler**, които задължително трябва да се познават са:

- **llsubmit <jcf file>** - нареждане на задачата в опашката
- **llq** – лист на задачите и техния статус
- **llcancel <job id>** - изтриване на задача от опашката

Можем да заредим задачата

```
llsubmit namd.jcf
```

да проверим статуса на задачата с

```
llq
```

и за целите на това практическо занятие да спрем изпълнението на задачата с **llcancel**.

Полезна информация може да се намери на:

<http://www.redbooks.ibm.com/redbooks/pdfs/sg247287.pdf> – BlueGene/P application development

<http://www.redbooks.ibm.com/redbooks/pdfs/sg246038.pdf> – LoadLeveler overview