

Przykładowe opisy zadań



QCG-SimpleClient oferuje prosty, wzorowany na poleceniach systemu kolejkowego, interfejs do infrastruktury QCG.



Wszystkie przykłady prezentowane na tej stronie mają na celu przedstawienie możliwego opisu zadania dla danej aplikacji.

Nie stanowią rekomendacji i są tylko przykładami, które można dowolnie rozszerzać i modyfikować.

W większości przypadków do uruchomienia tych zadań konieczne są pliki wejściowe, które nie są tu dostarczane.

- [Aplikacja Abaqus](#)
- [Aplikacji ABINIT](#)
- [Aplikacja GAMESS](#)
- [Aplikacja GAUSSIAN](#)
- [Aplikacja NAMD](#)
- [Aplikacja R](#)
- [Konwersja pliku tekstowego](#)
- [Własna Aplikacja MPI](#)
 - [Zadanie parametryczne](#)

Aplikacja Abaqus

```
#QCG host=bem
#wymaganie pamieci w mb
#QCG memory=2000
#liczba wezlow/rdzeni
#QCG nodes=1:4

#QCG application=abaqus
#QCG argument=design.inp
#QCG stage-in-file=design.inp

#QCG stage-out-dir= . -> abaqus-results-${JOB_ID}
#QCG output=output.${JOB_ID}
#QCG error=error.${JOB_ID}
```

Aplikacji ABINIT

```

#QCG queue=plgrid-long
#QCG note=4QLsTi+Ni_h3
#QCG output=myjob.log
#QCG error=myjob.error
#QCG stage-in-file=Bi2Se3.in
#QCG stage-in-file=Bi2Se3x.files
#QCG stage-in-file=34se.6.hgh
#QCG stage-in-file=83bi.5.hgh
#QCG stage-in-file=22ti.4.hgh
#QCG stage-in-file=28ni.10.hgh
#QCG stage-out-dir=. -> results-${JOB_ID}
#QCG nodes=1:8
#QCG memory=12000
#QCG host=hydra
#QCG walltime=P7D
#QCG application=abinit
#QCG argument=Bi2Se3x.files
#QCG grant=moj_grant

```

Aplikacja GAMESS

```

#!/bin/bash

#QCG queue=plgrid-long
#QCG walltime=P4D
#QCG note=nano3_3+hcl-gms-mp2-accd_F00_tryton
#QCG output=outputs/nano3_3+hcl-gms-mp2-accd_F00_tryton.output
#QCG error=outputs/nano3_3+hcl-gms-mp2-accd_F00_tryton.error
#QCG stage-in-file=nano3_3+hcl-gms-mp2-accd_F00_tryton.inp -> nano3_3+hcl-gms-mp2-accd_F00_tryton.inp
#QCG stage-out-file=nano3_3+hcl-gms-mp2-accd_F00_tryton.log -> outputs/nano3_3+hcl-gms-mp2-accd_F00_tryton.log
#QCG nodes=2:12
#QCG memory=16000
#QCG host=tryton
#QCG application=gamess
#QCG argument=nano3_3+hcl-gms-mp2-accd_F00_tryton.inp

```

Aplikacja GAUSSIAN

```

#QCG queue=plgrid-long
#QCG name=etanal
#QCG note=etanal Gaussian
#QCG output=${JOB_ID}.output
#QCG error=${JOB_ID}.error
#QCG stage-in-file=etanal.gjf -> etanal.gjf
#QCG stage-out-file=wynik.tar -> ${JOB_ID}.tar
#QCG nodes=1:12
#QCG host=tryton.task.gda.pl
#QCG walltime=P7D
#QCG notify=mailto:piontek@man.poznan.pl
#QCG memory=15360

#QCG preprocess=echo START
#QCG application=g09
#QCG argument=etanal.gjf
#QCG postprocess=tar cvf wynik.tar *

```

Aplikacja NAMD

```
#QCG note=NAMD apoal
#QCG name=ex_1
#QCG host=hydra.icm.edu.pl
#QCG walltime=PT10M
#QCG queue=plgrid
#QCG nodes=1:12:
12
#QCG output=apoal.output
#QCG error=apoal.error
#QCG application=NAMD
#QCG argument=apoal/apoal.namd
#QCG stage-in-file=apoal.zip
#QCG preprocess=unzip apoal.zip
#QCG stage-out-dir=. -> results
#QCG notify=xmpp:tomasz.piontek@plgrid.pl
#QCG watch-output=mailto:tp@mail,20,ENERGY
```

Aplikacja R

```
#QCG host=zeus
#QCG queue=plgrid
#QCG walltime=PT5M
#QCG application=R

#QCG output=${JOB_ID}.output
#QCG error=${JOB_ID}.error
#QCG argument=PoDA-example.R
#QCG stage-in-file=PoDA-example.R
#QCG stage-in-file=PoDA.R
#QCG stage-in-file=PoDA-example-data.RData
#QCG stage-out-file=Rplots.pdf
```

Konwersja pliku tekstowego

```
#!/bin/bash

#QCG host=zeus
#QCG queue=plgrid
#QCG walltime=PT5M

#QCG output=${JOB_ID}.output
#QCG error=${JOB_ID}.error

#QCG stage-in-file=input.txt -> lower.txt

cat lower.txt | tr "[:lower:]" "[:upper:]" > upper.txt
echo "Liczba znakow: " `wc -m upper.txt`
sleep 120
echo "Koniec: " `date`

#QCG stage-out-file=upper.txt -> ${JOB_ID}.upper
```

Własna Aplikacja MPI

```
#QCG note=CPminV04_mpi1024
#QCG host=tryton.task.gda.pl
#QCG nodes=4:12:2
#QCG queue=plgrid
#QCG stage-in-dir=->.
#QCG stage-in-file=./minV04
#QCG stage-out-dir=outdata
#QCG stage-out-file=log
module load openmpi
mpirun -machinefile $QCG_NODEFILE --cpus-per-proc 6 --bysocket ./minV04 > log
```

Zadanie parametryczne

```
#!/bin/bash

#QCG walltime=PT5M

#QCG parameter-sweep=MONTH->list:Jan,Feb
#QCG parameter-sweep=DAY->for:0..10..5

#QCG output=${JOB_ID}.output

echo ${JOB_ID} parameters: MONTH=${MONTH} DAY=${DAY}
```