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 apoa1
#QCG name=ex_1
#QCG host=hydra.icm.edu.pl
#QCG walltime=PT10M
#QCG queue=plgrid
#QCG nodes=1:12:
12
#QCG output=apoa1.output
#QCG error=apoa1.error
#QCG application=NAMD
#QCG argument=apoa1/apoa1.namd
#QCG stage-in-file=apoa1.zip
#QCG preprocess=unzip apoa1.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}
```