

Torque (PBS) バッチシステム取扱い説明

- ・ 現在製品にプレインストールされている Torque について使用方法およびカスタマイズ方法を紹介いたします。
- ・ 基本スクリプトのテンプレートを解説いたします。
mpi を使用したジョブの例

```
-----  
#!/bin/sh  
#PBS -l ncpus = 4 ←コア数の指定 (使用したい全ノードのコア数の指定 : 必須ではない)  
#PBS -l nodes=1:ppn = 8 ←ノード数の指定 : ノード内のコア数 (必須)  
cd $PBS_0_WORKDIR ←PBS に渡す変数 (必須)  
mpirun -np 4 ./himeM4 ←実行ファイルの指定 (必須)  
-----
```

1. Torque ノードを指定してジョブを投入する方法

- ・ Torque の設定変更なしで、ノードを指定してジョブを投入する方法をご案内いたします。

用途等 : 計算ノードが複数あるが、ある特定ノードに対し

ジョブを割り当てたくない、もしくはジョブを割り当てたい
と言う場合に有効です。

変更箇所 : ユーザーのジョブ投入スクリプト変更で対応

```
-----  
#!/bin/sh  
#PBS -l ncpus = 4 ←コア数の指定 (使用したい全ノードのコア数の指定 : 必須ではない)  
#PBS -l nodes=1:ppn = 8:vt02.localdomain←ノード数の指定 : ノードの指定 (必須)  
cd $PBS_0_WORKDIR ←PBS に渡す変数 (必須)  
mpirun -np 4 ./himeM4 ←実行ファイルの指定 (必須)  
-----
```

2. Torque グループの作成方法

- ・グループを設定し

用途等 : Torque に参加しているマシンが複数台ある状態で
所属グループ等を分けて特定グループに所属する
特定のノードにジョブをスポットで割り当てる
ことができます。

*設定については root (スーパーユーザー) で作業

変更必要ノード : 管理ノードのみ

変更箇所 : /var/spool/torque/server_priv/nodes

- * 下記変更例は 4 ノードのクラスターに各 A、B というグループを割り当てて
グループを作成しています。

書き方は np=8 の後にスペースを空け文字を入れます。

変更例 : 変更前

vt001.localdomain np=8

vt002.localdomain np=8

vt003.localdomain np=8

vt004.localdomain np=8

変更例 : 変更後

vt001.localdomain np=8 A

vt002.localdomain np=8 A

vt003.localdomain np=8 B

vt004.localdomain np=8 B

変更後リブートもしくは /etc/init.d/pbs stop
/etc/init.d/pbs start を実行してください。

```
#pbsnodes -a
vt001.localdomain
state = free
np = 8
properties = A
```

```
        ntype = cluster
        status = . . . . 省略
vt002.localdomain
        state = free
        np = 8
        properties = A
        ntype = cluster
        status = . . . . 省略
vt003.localdomain
        state = free
        np = 8
        properties = B
        ntype = cluster
        status = . . . . 省略
vt004.localdomain
        state = free
        np = 8
        properties = B
        ntype = cluster
        status = . . . . 省略
```

作成したグループを指定してジョブを投入する方法です

```
#!/bin/sh
#PBS -l ncpus=8
#PBS -l nodes=1:ppn=8:B      ←ノードの後ろに : で区切ってグループを指定
cd $PBS_O_WORKDIR
mpirun -np 8 ./himeM8
```

3. Torque の queue 作成方法

root(スーパーユーザー)でログインして作業します。

下記は 16CPU を使用して流す queue を batch16 とし 8CPU を使用して流す queue を batch8 と名前をつけて作成する時のパラメータのリストです。

(batch8 は batch16 よりもジョブ投入時のプライオリティを上げてあります。)

- * 例ですので、クラスターの計算ノードや環境により適宜変更してください。

```
#
# Create and define queue batch16
#
create queue batch16
set queue batch16 queue_type = Execution
set queue batch16 Priority = 70
set queue batch16 max_running = 2
set queue batch16 resources_max.ncpus = 16
set queue batch16 resources_max.nodes = 2
set queue batch16 resources_min.ncpus = 8
set queue batch16 resources_min.neednodes = 2:ppn=8
set queue batch16 resources_min.nodes = 2:ppn=8
set queue batch16 resources_default.ncpus = 16
set queue batch16 resources_default.neednodes = 2:ppn=16
set queue batch16 resources_default.nodes = 2:ppn=16
set queue batch16 max_user_run = 2
set queue batch16 enabled = True
set queue batch16 started = True
#
# Create and define queue batch8
#
create queue batch8
set queue batch8 queue_type = Execution
```

```

set queue batch8 Priority = 60
set queue batch8 max_running = 4
set queue batch8 resources_max.ncpus = 8
set queue batch8 resources_max.nodes = 1
set queue batch8 resources_min.ncpus = 8
set queue batch8 resources_min.neednodes = 1:ppn=8
set queue batch8 resources_min.nodes = 1:ppn=8
set queue batch8 resources_default.ncpus = 8
set queue batch8 resources_default.neednodes = 1:ppn=8
set queue batch8 resources_default.nodes = 1:ppn=8
set queue batch8 max_user_run = 2
set queue batch8 enabled = True
set queue batch8 started = True

```

上記キューをテキストファイル等にし適当な場所に置き、キューマネージャに読み込むコマンドを実行します。(管理ノード)

例： ↓キーボードの¥マークの上のパイプです

```
cat queue.txt | qmgr
```

作成後クラスターを再起動します。

作成したキューが有効かどうか確認します。

```
qstat -q
```

作成したキューを使いジョブを投入します。

```

#!/bin/sh
#PBS -l ncpus=8
#PBS -l nodes=1:ppn=8
#PBS -q batch8                ←ここを追加してキューを指定
cd $PBS_O_WORKDIR
NPROCS=`wc -l < $PBS_NODEFILE`
mpirun -np 8 ./himeM8

```

4. Torque (PBS) コマンド集

Torque で主に使用するコマンドの解説

コマンド名	内容
qsub	ジョブを投入する
qdel	ジョブを削除する
qstat	キュー、ジョブの状態を表示する
pbsnodes	計算ノードのステータスを確認する

qstat コマンドのオプションの解説

qstat	-q	システムの全ての queue を表示
qstat	-B	PBS Server のサマリー情報を表示
qstat	-a	システムの全てのジョブを表示
qstat	-Q	全ての queue のリミット値を表示
qstat	-s	全てのジョブをステータスコメント付きで表示
qstat	-r	実行中の全てのジョブを表示
qstat	-f [jobid]	指定したジョブの詳細な情報を表示
qstat	-Qf [queue]	指定したキューの詳細な情報を表示

ジョブ投入時のスクリプトのオプション

-N	jobname	ジョブの名前を指定
-q	queue_name	ジョブを投入するキューを指定
-o	output_file	標準出力をファイルに出力
-e	error_file	エラー出力をファイルに出力
-l	ncpus	1 つのジョブに必要な CPU 数を指定
-l	nodes	1 つのジョブに必要なノード数

MPI ジョブ用スクリプト例

```
#!/bin/bash
#PBS -N himeM8.out
#PBS -j oe
#PBS -l ncpus=8
#PBS -l nodes=2:ppn=4
#PBS -q default
cd $PBS_0_WORKDIR
mpirun -n 8 ./himeM8
```

シングルコア用スクリプトの例

```
#!/bin/sh
#PBS -j oe
#PBS -l nodes=1
cd $PBS_0_WORKDIR
./a.out
```
