



Dipartimento di Scienze Chimiche Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale

Antonino Polimeno
tel. (+39) 049 8275146 - fax (+39) 049 8275239
e-mail: antonino.polimeno@unipd.it
web: <http://www.chimica.unipd.it/licc>

A tutti gli utenti:

il nuovo sistema di gestione dei job tramite code, preparato dall'Ing. Sella che ringrazio per il suo lavoro, è entrato in funzione. Si tratta di una modalità di gestione del sistema robusta e versatile, che ci consentirà di meglio controllare le nostre risorse e di distribuire i carichi di lavoro in maniera omogenea sui due cluster, permettendo nel contempo di contare le risorse impiegate da ciascun utente.

Accludo a questo messaggio alcune note di base, le istruzioni generali per sottoporre job tramite interfaccia web e le modalità d'uso del sistema di monitoraggio.

Antonino Polimeno



Dipartimento di Scienze Chimiche Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale

Antonino Polimeno
tel. (+39) 049 8275146 - fax (+39) 049 8275239
e-mail: antonino.polimeno@unipd.it
web: <http://www.chimica.unipd.it/licc>

Note generali d'impiego

1. La sottomissione di job in modo interattivo è disabilitata
2. Il sistema di gestione delle code (SGC) prevede l'impiego di due strumenti web rispettivamente per la **sottomissione** ed il **monitoraggio** dei job. Il sistema è per ora funzionante solo con AVOGADRO e nei prossimi giorni sarà esteso anche ad ARRHENIUS.
3. Le password degli utenti sono state resettate con l'avvio del SGC; ad ogni utente sarà inviata la nuova password in un messaggio separato e privato; la modifica della password avviene tramite interfaccia web
4. Ogni utente può sottomettere un numero massimo di job (5 per account avanzati e 2 per account di base); se la tipologia di coda richiesta dall'utente risulta impegnata il job viene mantenuta in standby sino alla liberazione delle risorse, ma sempre entro il limite massimo concesso all'utente (per esempio un utente con account avanzato può avere 2 job in esecuzione e 3 in coda etc.)
5. La tipologia delle code è indicata nella seguente tabella. Per esempio, la coda medium-normal permette di sottomettere job che impiegano fino a 4 nodi (cioè fino a 16 processori) per un tempo massimo di 100 ore (corrispondenti quindi, idealmente, ad un consumo massimo di ore CPU pari a 1600).

	1 nodo	4 nodi	8 nodi
10 minuti	short-small	//	//
100 ore	medium-small	medium-normal	//
500 ore	long-smal	long-normal	long-large

6. I file input/output etc. sono contenuti in sotto-cartelle della cartella PBSWEB, nella home di ciascun utente; al momento sono state create le cartelle GAUSSIAN, ADF, GROMACS, AMBER e DEVELOPMENT.

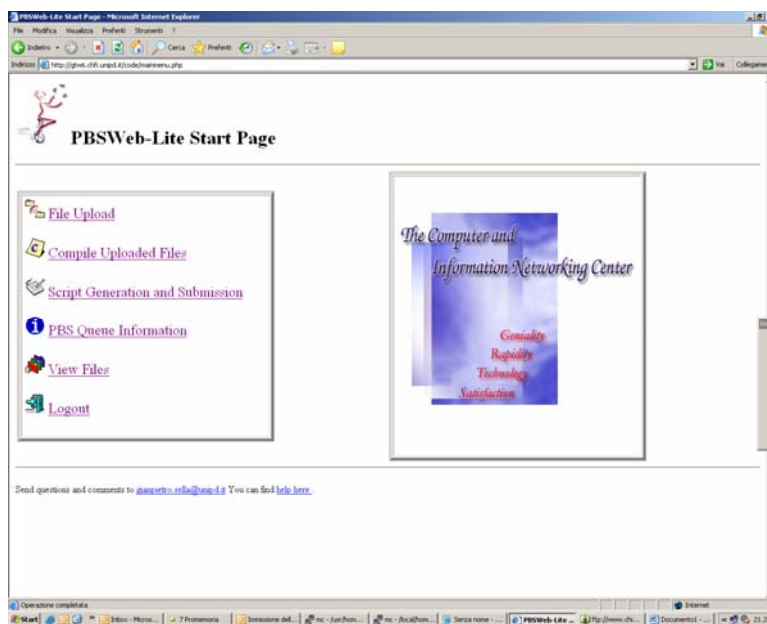


Dipartimento di Scienze Chimiche Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale

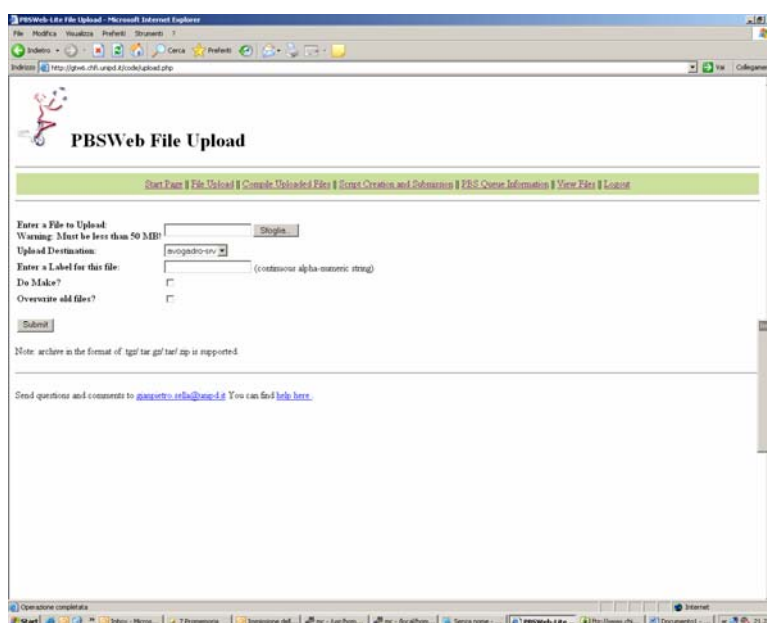
Antonino Polimeno
tel. (+39) 049 8275146 - fax (+39) 049 8275239
e-mail: antonino.polimeno@unipd.it
web: <http://www.chimica.unipd.it/licc>

Sottomissione dei job - a cura dell'Ing. Gianpietro Sella

- Con un browser di vostra scelta accedete all'URL <http://gtw6.chfi.unipd.it/code>
- Eseguite il login con la propria utenza



- Con il comando "File upload" è possibile trasferire dei file nella propria home all'interno di una determinata cartella utile per l'esecuzione di un job.



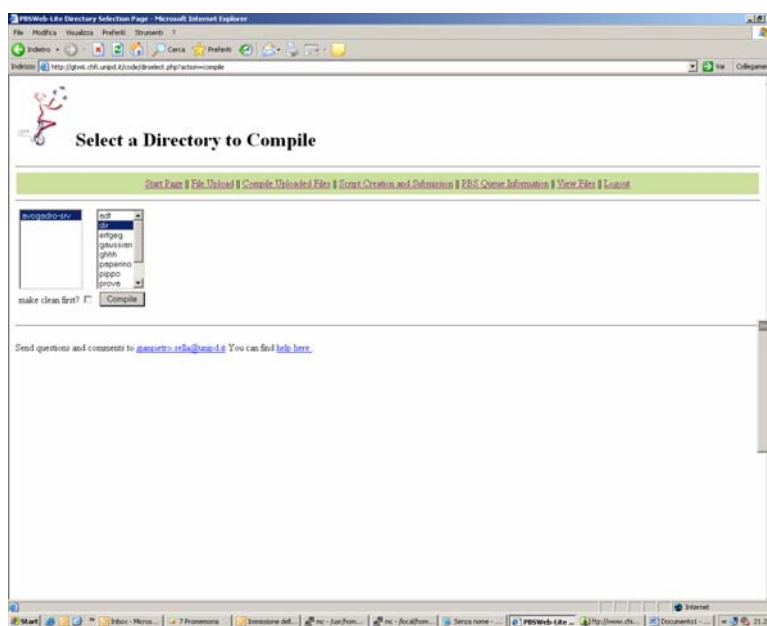
- Nella terza riga 'Enter a label...' si deve inserire il nome della cartella, che se non è già presente viene creata.
- Nella prima riga si inserisce il nome del file da trasferire dal proprio pc.



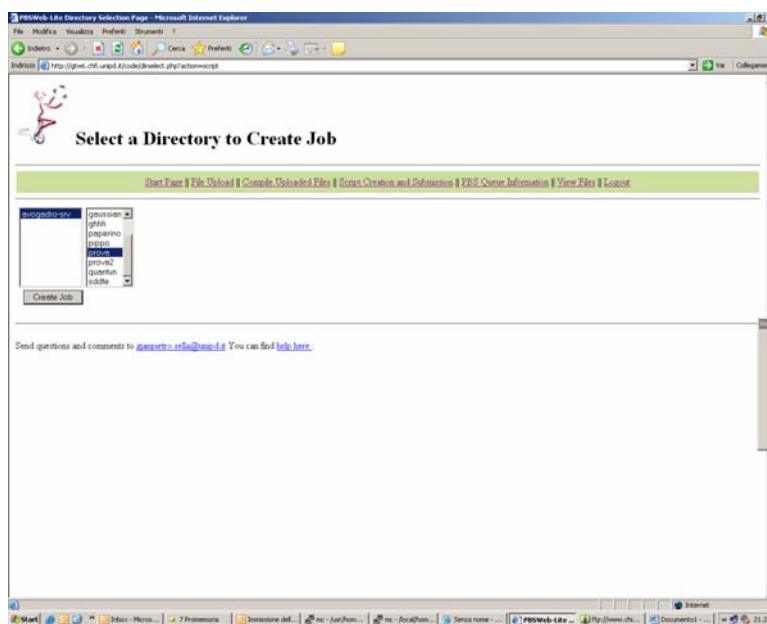
Dipartimento di Scienze Chimiche Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale

Antonino Polimeno
tel. (+39) 049 8275146 - fax (+39) 049 8275239
e-mail: antonino.polimeno@unipd.it
web: <http://www.chimica.unipd.it/licc>

- Se tale riga viene lasciata vuota viene creata una cartella vuota (ignorare i messaggi di errore).
- Se la cartella esiste già è necessario selezionare 'Overwrite...'
- Se il file è compresso, una volta trasferito viene decompresso automaticamente.
- Nel caso si stia trasferendo un codice da compilare
 - o selezionando 'Do make' alla fine del trasferimento e dell'eventuale decompressione viene eseguito un comando di 'Make' per la compilazione dei file trasferiti (fra questi deve essere presente un file Makefile opportunamente configurato).
 - o Il menù 'Compile upload file' permette di compilare i file trasferiti in precedenza



- Il menù 'Script creation and ...' permette di creare ed eseguire i job:

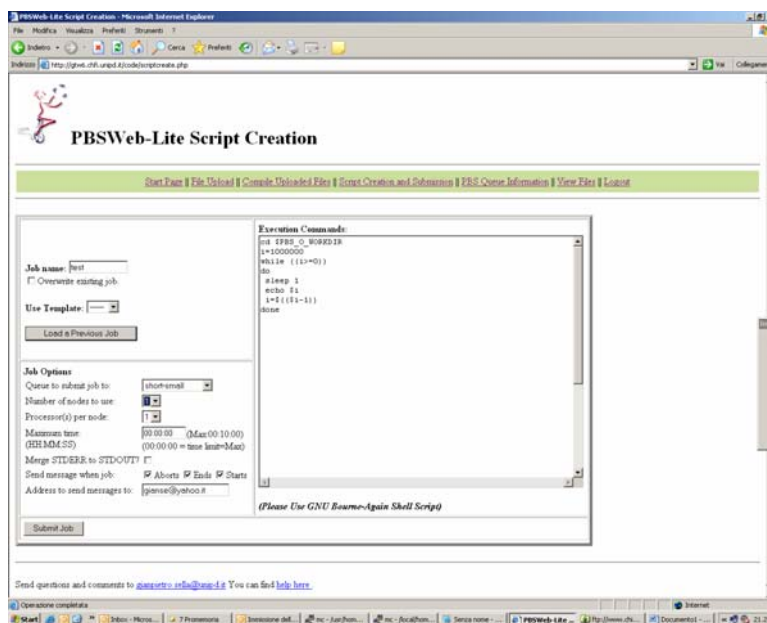




Dipartimento di Scienze Chimiche Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale

Antonino Polimeno
tel. (+39) 049 8275146 - fax (+39) 049 8275239
e-mail: antonino.polimeno@unipd.it
web: <http://www.chimica.unipd.it/licc>

- Per procedere con la sottomissione di un job, selezionate una cartella già creata in precedenza e che eventualmente contiene dei file necessari all'esecuzione del job.



- È necessario assegnare un nome al job, selezionare la coda, il numero di nodi, il numero di processori per nodo, il tempo massimo di esecuzione del job.
- In *execution command* si possono inserire i comandi che il job deve eseguire: si può trattare di un semplice script bash come nell'esempio o dell'esecuzione di un programma compilato in precedenza. In particolare se si intende eseguire il programma ADF sarà necessario il seguente codice:

```
cd $PBS_O_WORKDIR  
NODE_FILE=$PBS_NODEFILE  
NSCM=`wc -l < $PBS_NODEFILE`  
echo $NSCM
```

```
$ADFBIN/adf -n1 < 01.j > basi.log  
mv TAPE21 O.t21  
$ADFBIN/adf -n1 < 02.j >> basi.log  
mv TAPE21 C.t21  
$ADFBIN/adf -n1 < 03.j >> basi.log  
mv TAPE21 H.t21  
$ADFBIN/adf < run.j > run.out
```

Se invece si tratta di Gaussian il codice sarà:

```
cd $PBS_O_WORKDIR  
DATADIR=$PBS_O_WORKDIR  
export HOMEDIR=$PBS_O_WORKDIR  
g03run ./benzene.com
```

Se infine si intende eseguire un programma precedentemente compilato con le librerie parallele il codice sarà:

```
cd $PBS_O_WORKDIR  
NP=`wc -l < $PBS_NODEFILE`
```



Dipartimento di Scienze Chimiche Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale

Antonino Polimeno
tel. (+39) 049 8275146 - fax (+39) 049 8275239
e-mail: antonino.polimeno@unipd.it
web: <http://www.chimica.unipd.it/licc>

Mpirun -machinefile \$PBS_NODEFILE -np \$NP ./nome_programma

- Tramite 'Load a previous job' si possono caricare job eseguiti in precedenza.
- Tramite 'PBS queue information' si può visualizzare lo stato dei job lanciati

Job-id	Username	Queue	Jobname	SeqID	HEG	TSK	Memory	Time	S	Time
604	fabre	short-sm	test	25348	1	--	--	00:10	R	--

Queue	Max	Tot	Enq	Str	Que	Run	Mid	Wet	Trn	Ext	T
batch	0	0	yes	yes	0	0	0	0	0	0	E
queue	0	0	yes	yes	0	0	0	0	0	0	E
short-small	0	1	yes	yes	0	1	0	0	0	0	E
medium-small	0	0	yes	yes	0	0	0	0	0	0	E
long-small	0	0	yes	yes	0	0	0	0	0	0	E
medium-normal	0	0	yes	yes	0	0	0	0	0	0	E
long-normal	0	0	yes	yes	0	0	0	0	0	0	E
long-large	0	0	yes	yes	0	0	0	0	0	0	E

Server	Max	Tot	Que	Run	Mid	Wet	Trn	Ext	Status
avogadro-srv	0	1	0	1	0	0	0	0	Active

- Infine con 'View file' si possono vedere, scaricare e cancellare i file presenti nelle cartelle:

Name	Permission	Size	Time
drwarsawicz	drwxr-xr-x	4096	Jan 26 10:31
drax	drwxr-xr-x	4096	Jan 26 18:49
draxia	drwxr-xr-x	4096	Jan 26 20:42
draxman	drwxr-xr-x	4096	Jan 25 17:55
draxhh	drwxr-xr-x	4096	Jan 26 20:45
draxpaco	drwxr-xr-x	4096	Jan 25 19:46
draxpa	drwxr-xr-x	4096	Jan 25 11:44
draxura	drwxr-xr-x	4096	Jan 26 18:38
draxvra	drwxr-xr-x	4096	Jan 25 18:55
draxvra	drwxr-xr-x	4096	Jan 25 13:16
draxvra	drwxr-xr-x	4096	Jan 26 21:20



Dipartimento di Scienze Chimiche Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale

Antonino Polimeno
tel. (+39) 049 8275146 - fax (+39) 049 8275239
e-mail: antonino.polimeno@unipd.it
web: <http://www.chimica.unipd.it/licc>

Monitoraggio dei job - a cura dell'Ing. Gianpietro Sella

- Con un browser di vostra scelta accedete all'URL <http://gtw6.chfi.unipd.it/monitor>
- Dopo il login nella pagina di ingresso si ha un riepilogo delle statistiche

The screenshot shows the MyPBS web interface in a Microsoft Internet Explorer browser. The page is titled "MyPBS" and has a "Logged in as: feltre" status. The main content area is titled "Welcome feltre" and "Admin Access Granted". It displays "Active projects" for "Project: feltre" with the following statistics:

Project SSI: 999.73	User Jobs Run: 3
Project SSI Used: 0.10	User SSI Used: 0.10
Project Jobs Run: 3	Avg SSI per job: 0.03
Percentage of Project SSI Used by User: 100 %	
Efficiency: 0.00 %	

Below this, there is a "Summary" section with the following data:

Last Login:	2007-06-26 20:49:34
Total Jobs Run:	3
Total SSI Used:	0.1
Total Avg SSI Used:	0.03

Finally, there is a "Last three jobs" table:

Date	run_start	pbs_jobname	user	projc	job_status	actual_ssi	req_ssi	hostname
2007-06-26	2007-06-26 21:40:25	604	angad@rs-01	1	00:05:55	0.10	0.17	angad@rs-01
2007-06-26	2007-06-26 21:40:22	606	angad@rs-01	1	00:00:12	0.00	0.17	angad@rs-01
null	2007-06-26 21:44:22	605	angad@rs-01	1	null	0.00	0.17	angad@rs-01

- Con il menù 'Project' si visualizzano i progetti in corso (in genere 1)

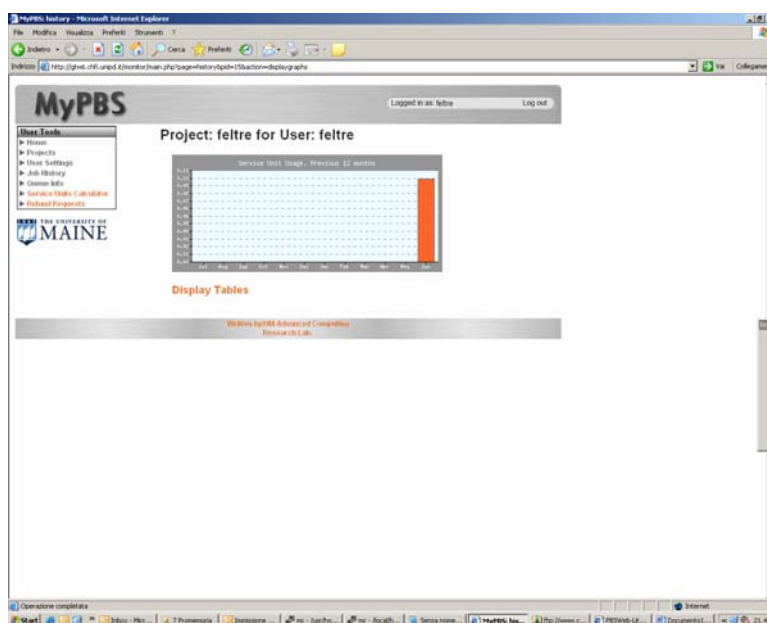
The screenshot shows the MyPBS web interface with the "Project" menu selected. The page displays details for "Project: 999.73" with the user "admin" and "Statistics" tab selected. The main content area is mostly blank, indicating that the project details are not fully rendered or are hidden.

- E selezionando 'Statistics' si vede il tempo consumato come grafico:

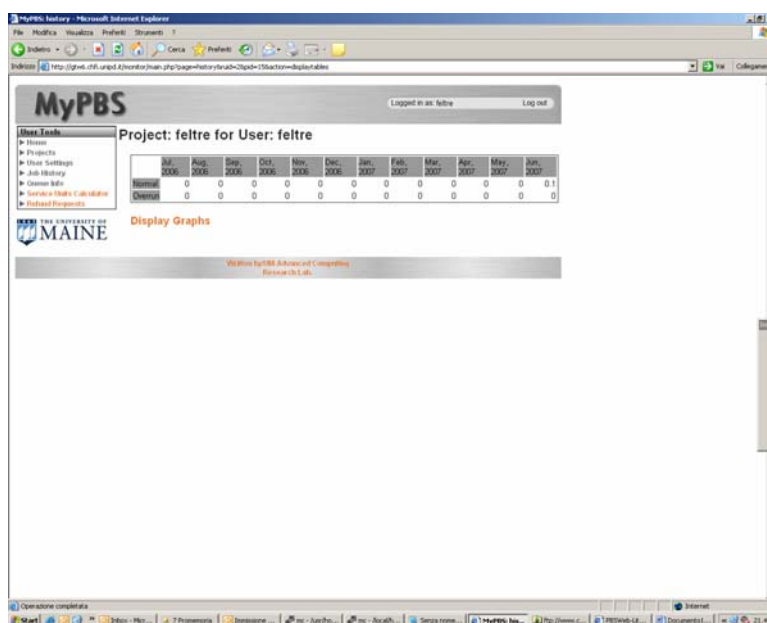


Dipartimento di Scienze Chimiche Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale

Antonino Polimeno
tel. (+39) 049 8275146 - fax (+39) 049 8275239
e-mail: antonino.polimeno@unipd.it
web: <http://www.chimica.unipd.it/licc>



E come tabella:

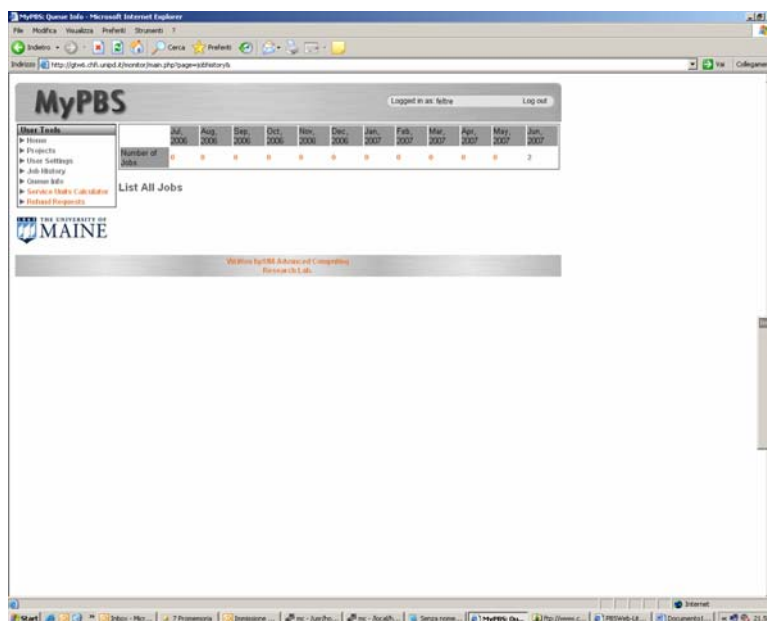


- Tramite il menu 'Job history' si può vedere il numero di job conclusi:

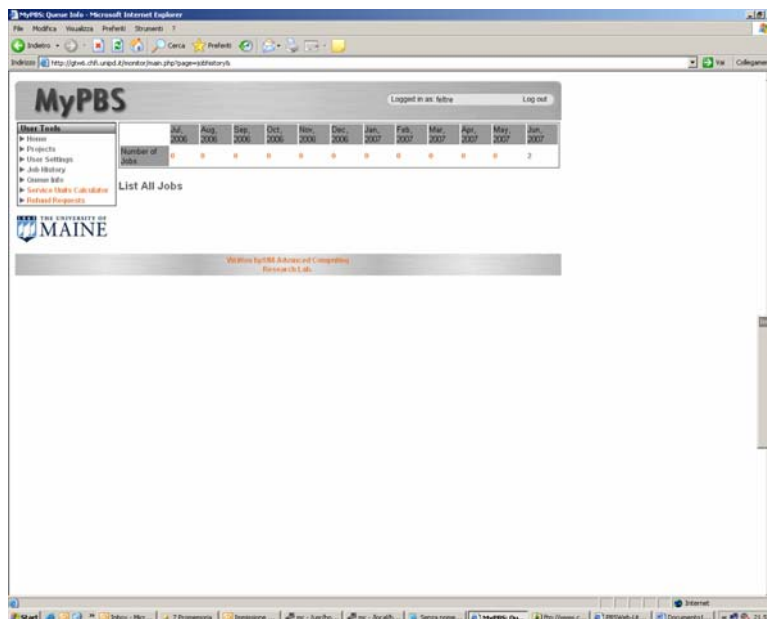


Dipartimento di Scienze Chimiche Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale

Antonino Polimeno
tel. (+39) 049 8275146 - fax (+39) 049 8275239
e-mail: antonino.polimeno@unipd.it
web: <http://www.chimica.unipd.it/licc>



oppure il totale dei job:



– Con 'Queue info' si ha l'elenco delle code a disposizione:



Dipartimento di Scienze Chimiche Laboratorio Interdipartimentale di Chimica Computazionale

Antonino Polimeno
tel. (+39) 049 8275146 - fax (+39) 049 8275239
e-mail: antonino.polimeno@unipd.it
web: <http://www.chimica.unipd.it/licc>

MyPBS

Logged in as: feltre Log out

Menu Tools

- Home
- Projects
- User Settings
- Job History
- Queue Info
- Service Node Calculator
- Project Requests

THE UNIVERSITY OF MAINE

Queue ID	PBS Queue Name	MyPBS queue Weight
short-small	short-small	1.000
medium-small	medium-small	1.000
long-small	long-small	1.000
medium-normal	medium-normal	1.000
long-normal	long-normal	1.000
long-large	long-large	1.000

Website by IBM Advanced Computing Research Lab.

– Con ‘User settings’ si ottengono i dati della propria utenza:

MyPBS

Logged in as: feltre Log out

Menu Tools

- Home
- Projects
- User Settings
- Job History
- Queue Info
- Service Node Calculator
- Project Requests

THE UNIVERSITY OF MAINE

User Settings for feltre

Email Address: feltre@icehost

Change Password

Firstname: feltre

Lastname: feltre

New Password:

Repeat Password:

Update

Website by IBM Advanced Computing Research Lab.