

C2115

Praktický úvod do superpočítání

XI. lekce

Petr Kulhánek, Tomáš Bouchal

kulhanek@chemi.muni.cz

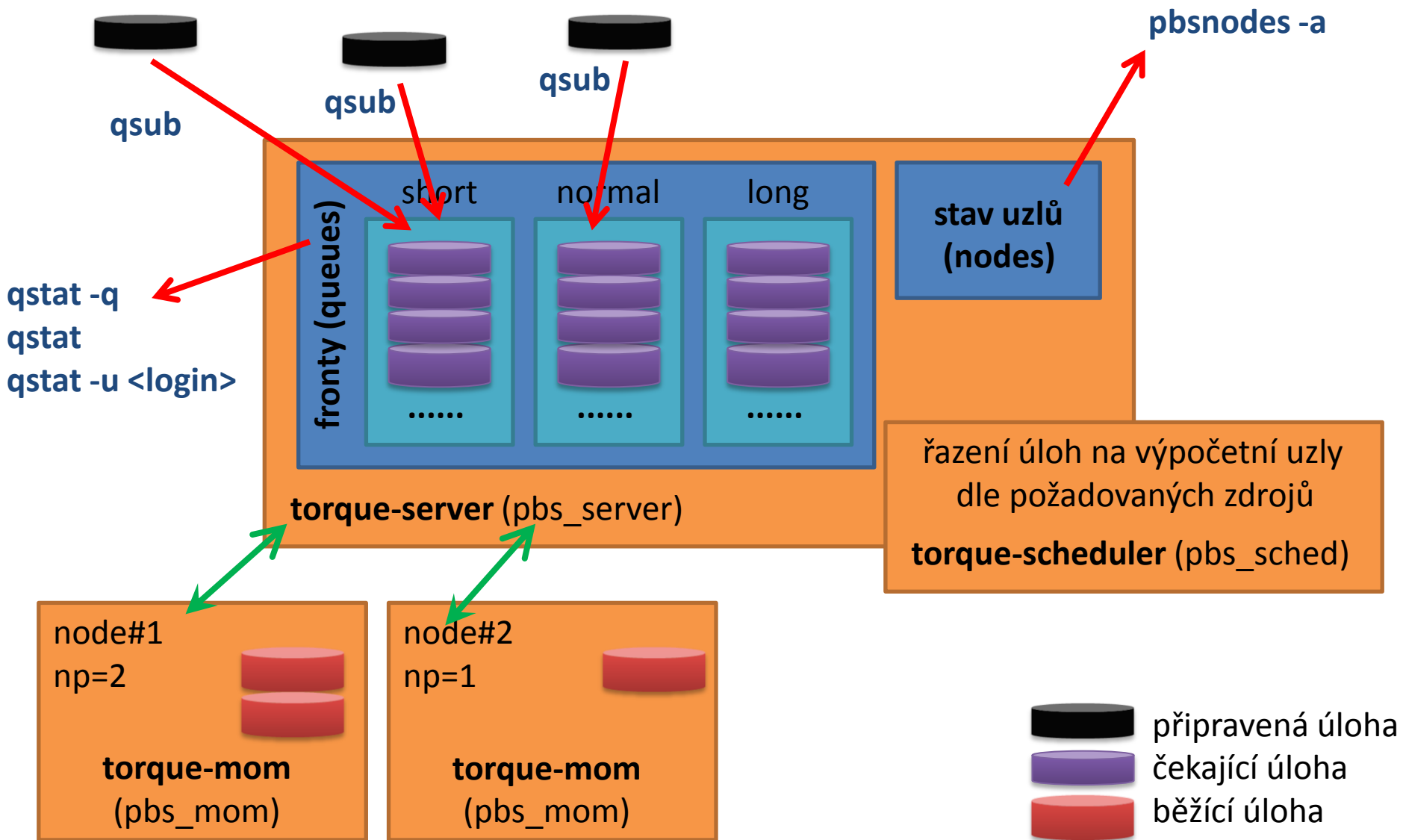
Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta,
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

- **Torque**
opakování
- **Torque (zdroje)**
aneb jak ovlivnit, kde se bude úloha počítat ...
- **Torque (kopírování souborů)**
stagein, stageout, explicitní kopírování dat
- **Torque (MetaCentrum)**
MetaCentrum, CERIT-SC, dokumentace
- **Spouštění programu gaussian v MetaCentru**
příprava dat, příprava úlohy, zařazení úlohy, monitoring úlohy, analýza dat

Torque

<http://www.adaptivecomputing.com/products/open-source/torque/>

Architektura



Torque – příkazy, stavy úlohy

qsub	zašle úlohu do dávkového systému
qstat	vypíše informace o dávkovém systému (seznam úloh, seznam front)
pbsnodes	vypíše informace o výpočetních uzlech
qrls	uvolní úlohu ze stavu holded (pokud to okolnosti dovolují)

Stavy úlohy:

Q (queued)	čeká ve frontě na spuštění na výpočetním uzlu
R (running)	běží na výpočetním uzly
C (completed)	úloha byla dokončena (informace o dokončených úloh se zobrazují jen omezenou dobu – nejčastěji 24 hodin)
H (holded)	úloha byla pozastavena, úlohu je možné uvolnit příkazem qrls
E (error)	došlo k chybě

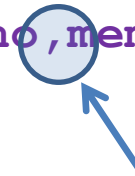
Torque (zdroje)

zdroje se zadávají pomocí volby **-l** příkazu `qsub`, lze zadat více specifikací současně
např:

```
$ qsub -q default -l nodes=1:ppn=1:brno -l mem=400mb skript.sh
```

nebo

```
$ qsub -q default -l nodes=1:ppn=1:brno,mem=400mb skript.sh
```



čárka

Počet a typ výpočetních uzlů a CPU

`nodes=N1 :ppn=M1 :properties1 [+N2 :ppn=M2 :properties2+...]`

v běžné práci se nepoužívá



Celkový počet požadovaných CPU: $N(\text{CPU})=N1 * M1 [+N2 * M2 +]$

Slouží pouze k rezervaci výpočetních zdrojů ve formě CPU. To však neznamená, že úloha na přidělených výpočetních zdrojích bude automaticky spuštěna. Toto musí zajistit skript úlohy.

Poččet a typ výpočetních uzlů a CPU, II

Seznam alokovaných CPU je dostupný jako seznam výpočetních uzlů uvedených v souboru, jehož název je uveden v systémové proměnné **PBS_NODEFILE**. Tato proměnná je dostupná v běžící úloze:

```
#!/bin/bash
echo $PBS_NODEFILE
cat $PBS_NODEFILE
```

Příklad:

```
$ qsub -q default -l nodes=1:ppn=2:brno+1:ppn=1:brno skript.sh
```

Výsledek:

```
/var/spool/torque/aux//10312644.arien.ics.muni.cz
zubat2.ncbr.muni.cz
zubat2.ncbr.muni.cz
mandos2.ics.muni.cz
```

Seznam CPU slotů je pak dostupný v úplném popisu úlohy, položka **exec_host**:

```
$ qstat -f <cislo_ulohu>
```


Počet a typ výpočetních uzlů a CPU, III

Vlastnosti:

Výpočetní uzly mohou mít specifikované vlastnosti. Jedná se o krátké řetězce, jejichž význam je závislý na administrátorech systému. Vlastnosti uzlů jsou vypisovány příkazem **pbsnodes** položka **properties**.

Uživatel může ve specifikaci výpočetních zdrojů požadovat pouze takové výpočetní uzly, které mají specifikované vlastnosti.

Příklady:

`nodes=1:ppn=1:brno`

logické ANO

`nodes=1:ppn=1:brno#debian70`

`nodes=1:ppn=1:^cl_doom`

`nodes=1:ppn=1:^onyx1-1.ncbr.muni.cz`

exclusion (pouze MetaCentrum)

Další specifikace zdrojů

Zdroj	Omezení	Popis
mem		velikost paměti, jednotky mb, gb
scratch		velikost lokálního datového úložiště, jednotky mb, gb
scratch_type	pouze Meta	typ lokálního datového úložiště
walltime		maximální doba běhu úlohy nejčastěji ve spojení s frontou default
umask		umask pro soubory a adresáře vytvářené na lokálním datovém úložišti
group		skupina pro soubory a adresáře vytvářené na lokálním datovém úložišti

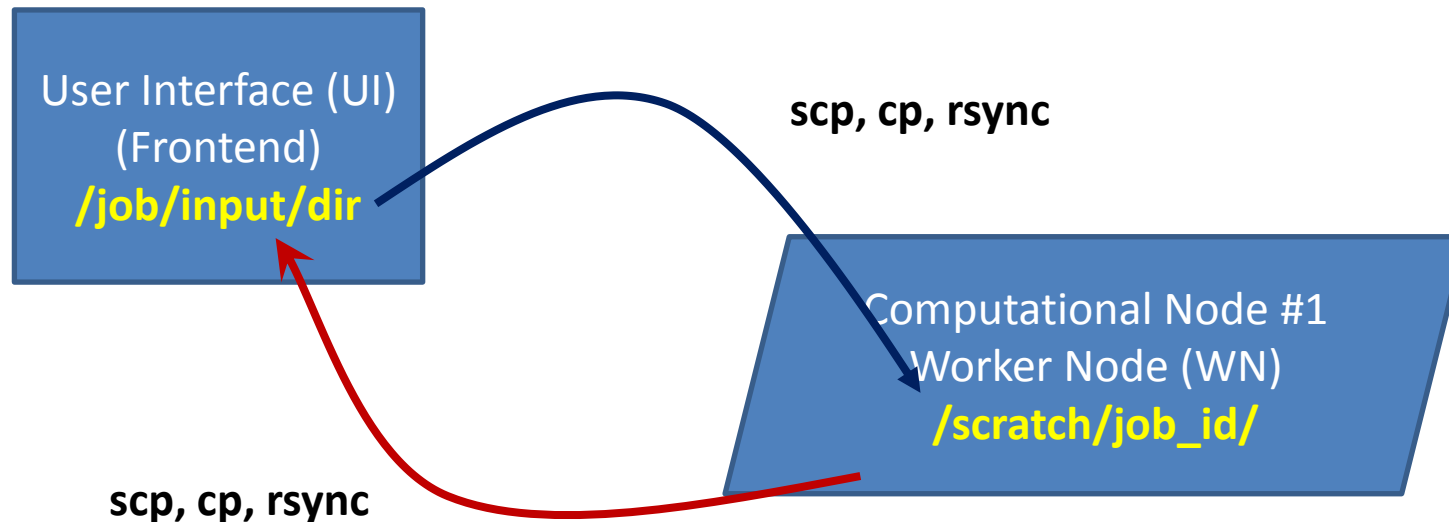
V MetaCentru mohou být úlohy s nedostatečně specifikovanými požadavky na zdroje předčasně ukončeny.

Torque

(kopírování souborů)

Kopírování souborů

Torque má vnitřní podporu pro kopírování souborů pomocí `stagein` a `stageout` direktiv. Tento způsob je však prakticky nepoužitelný a uživatel by měl veškeré operace související s kopírováním dat na lokální datové úložiště zajistit v rámci úlohy (příkazy `cp`, `scp`, `rsync`). Tento způsob je popsán v dokumentaci MetaCentrum VO.



Torque (MetaCentrum)

Dávkové systémy

MetaCentrum VO se skládá ze dvou oddělených dávkových systémů:

- **arien.ics.muni.cz** obsluhuje výpočetní uzly z MetaCentra, výchozí na všech čelních uzlech, kromě **zuphux.cert-sc.cz**
- **wagap.cerit-sc.cz** obsluhuje výpočetní uzly z CERIT-SC, výchozí na čelním uzlu **zuphux.cert-sc.cz**

Oba systémy jsou uživatelsky kompatibilní (stejně volby), rozdíly je možné najít v dokumentaci MetaCentrum VO.

Výchozí Torque server lze změnit nastavením proměnné PBS_SERVER, např.

```
[kulhanek@zuphux ~]$ qstat
```

← vypíše úlohy z MetaCentra

```
[kulhanek@zuphux ~]$ export PBS_SERVER=arien.ics.muni.cz
```

```
[kulhanek@zuphux ~]$ qstat
```

← vypíše úlohy z CERIT-SC

Spouštění programu gaussian v MetaCentru

Cvičení 3

Cílem cvičení je vytvořit model molekuly C_{60} a vypočítat její molekulární vibrace semiempirickou kvantově-chemickou metodou PM6 v programu gaussian verze 09.

Výsledek následujícího cvičení uvádějte do protokolu souhrnně, uvádějte pouze důležité informace.

1. V programu Nemesis namodelujte molekulu fullerenu C_{60} . Použijte projekt "Build structure", dále Structure → Insert → SMILES ... SMILE zápis molekuly použijte z anglické wikipedie pro C_{60} . Po vložení struktury posuňte jeden atom z roviny (Mouse → Atom manipulation). Poté zoptimalizujte geometrii pomocí výchozího silového pole (typ pole lze zjistit v Geometry → Optimizer setup).
2. Vytvořte vstupní soubor pro program gaussian (File → Export Structure as ... → Gaussian Input). Zvolte metodu PM6 a optimalizaci geometrie. Poté do vstupního souboru dopište klíčové slovo FREQ (za klíčové slovo Opt) a soubor uložte s příponou .com.
3. Vytvořený vstupní soubor přeneste na čelní uzel MetaCentra, připravte skript úlohy a úlohu zařadte do dávkového systému. Postupujte podle dokumentace MetaCentra, **úloha musí na výpočetním uzlu používat lokální datové úložiště.**
4. Výsledek úlohy (soubor se zakončením .log) přeneste na vaši pracovní stanici a vypočítané molekulární vibrace zobrazte v programu Nemesis, podle návodu uvedenému dále.

Nemesis

Spuštění programu:

```
$ module add nemesis  
$ nemesis
```

Myš:

Levé tlačítko	selekce
Prostřední tlačítko	rotace
Levé tlačítko	posun
Kolečko	zoom

Modifikátory:

Shift	XZ -> Y pohyby
Ctrl	přepíná mezi sekundárním a primárním manipulátorem

Build Project

The screenshot shows the NEMESIS Molecular Modelling Package interface. The main window is titled "Project 1 : NEMESIS - Molecular Modelling Package". The interface is divided into several panels:

- Structures panel:** Contains a table with columns "Name", "SID", and "Ato". The first row is "Structure 1" with "SID" 1. A blue arrow points to this row with the label "vrstvy".
- Build panel:** Contains various chemical symbols and buttons. A blue arrow points to the "Cl-" symbol with the label "stavba/editace molekuly". Another blue arrow points to the "Optimize" button, which is circled in red, with the label "optimalizace geometrie pomocí silového pole".
- Profile objects panel:** Contains a table with columns "Name" and "Ty". The first row is "Light 1" with "Ty" "Light". A blue arrow points to this row with the label "grafické modely".
- Geometry panel:** Contains buttons for "Position", "Distance", "Angle", and "Torsion". A blue arrow points to this panel with the label "měření geometrie".

At the bottom of the interface, there is a toolbar with icons for "S", "T", "C", "G", "D", "P", and "S".

Nastavení silového pole pro optimalizaci: menu Geometry-> Optimizer Setup

Trajectory: Vizualizace vibrací

- 1) Projekt: Trajectory
- 2) File->Import Trajectory as -> Gaussian Vibrations

The screenshot shows the NEMESIS Molecular Modelling Package interface. The main window displays a ball-and-stick model of an ethane molecule. A blue arrow labeled "dvojklik" (double-click) points from the "Trajectory 1 Structure 1" entry in the "Trajectories" panel to the "Trajectory" dialog box. The "Trajectory" dialog box has a table with the following data:

SI	Name	Snapshots	Type
1	ethan_freq	180	Gaussian Vibratic

Another blue arrow labeled "dvojklik" points from the "Trajectory" dialog box to the "Gaussian Vibrations" dialog box. The "Gaussian Vibrations" dialog box has a table with the following data:

ID	Frequency	IR Intensity	Scale
1	224.6	0.0	
2	878.2	0.0	
3	878.2	0.0	
4	1120.0	0.0	
5	1120.0	0.0	
6	1137.8	0.0	
7	1359.3	0.0	
8	1408.2	0.0	
9	1408.2	0.0	
10	1443.6	0.0	

The checkboxes in the "Gaussian Vibrations" dialog box are circled in orange, with a blue arrow labeled "zvolíme vibraci" (we will choose vibrations) pointing to them. Below the dialog box, the "Number of vibrations:" is set to 24 and "Active vibrations:" is set to 0. There are "Activate imaginary" and "Deactivate all" buttons. A blue arrow labeled "spustíme animaci" (we will start animation) points to the animation controls at the bottom of the interface, which include a play button and a stop button, both circled in orange.