



ugr | Universidad
de Granada

INSTITUTO CARLOS I DE FÍSICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

PROTEUS *y servidor web*

Talleres de computación en
el iCI

PROTEUS
scientific computing cloud



Presentación de los talleres

Primero de una serie de talleres sobre los servicios de computación del iC1

Me presento: José M. Martín. Técnico del iC1.

sysadmin@onsager.ugr.es

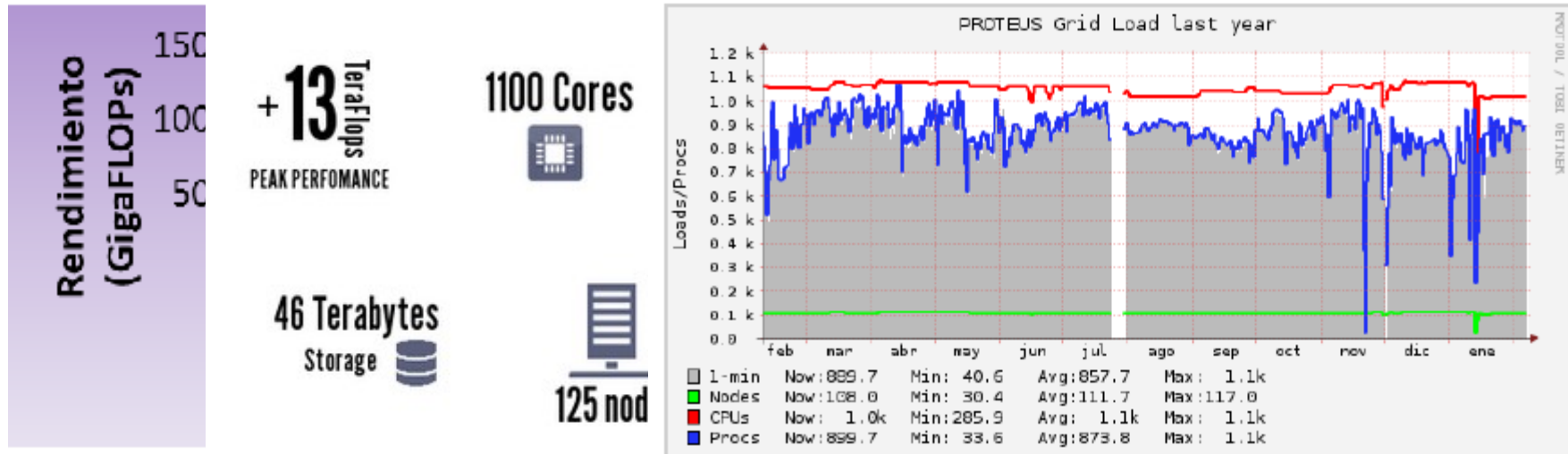
Temática:

- Uso de **PROTEUS** y servidor web (éste)
- Copias de seguridad
- Trabajo colaborativo
- Programación distribuida
- Abierto a vuestras necesidades. Por ejemplo:
 - bash, perl
 - Html, css, php, ajax
 - CUDA?

Periodicidad variable, al menos uno al año

¿Alguien no conoce PROTEUS?

Servicio de Computación del iC1



¿Qué tipos de programa admite?

- Programas secuenciales
 - Paralelos (hasta 12 cores)
 - CUDA (tarjetas gráficas)
 - Alto uso de memoria (hasta 120GB)
 - Distribuidos (necesitan muchos cores) no soportados hasta ahora.
- Ampliación/mejora

Empezar a trabajar con **PROTEUS**

Obtener cuenta `sysadmin@onsager.ugr.es`

Para miembros del iC1 y colaboradores

Acceso por ssh/sftp

- Sesión: `ssh usuario@proteus.ugr.es` (nativo en Linux/OS X, putty en Windows)
- Copiar archivos
 - Terminal: `scp`
 - Filezilla: servidor `proteus.ugr.es`, puerto 22, usuario y password
 - sshfs: parecido a nfs

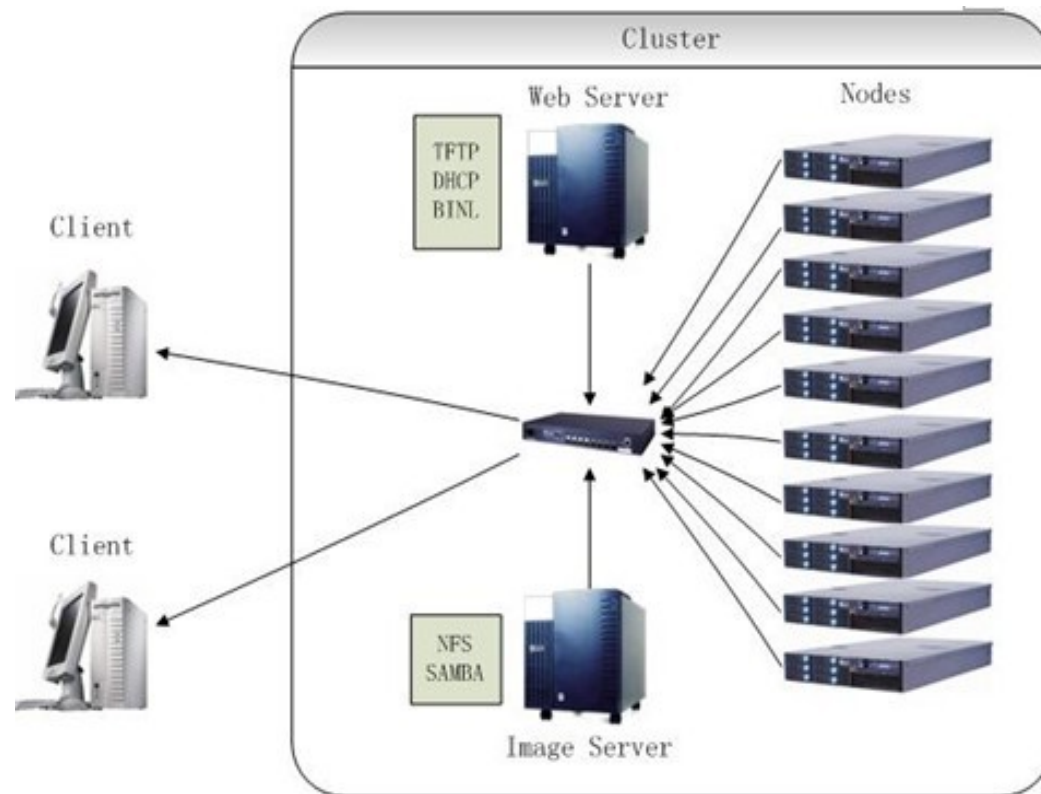
Entorno de ejecucion: `/home/profiles/`

- Compiladores de Intel: `icc` e `ifort`
- Python: `anaconda` y `canopy`
- CUDA
- `Gromacs`, `freesurfer`, `fsl`, etc.

Cluster de computación

Cuando hacemos ssh accedemos a la máquina de entrada

- NO ejecutar programas pesados en ella
- Usar el gestor de colas



Gestor de colas

Trabajar con el cluster: interaccionar con el gestor de colas: *HTCondor*. Se encarga de controlar qué hacen los nodos de ejecución

¿Qué es una cola? Listado de trabajos demandando recursos (cpu y memoria)

Cuando queremos ejecutar un programa, lo enviamos a la cola, indicando qué necesitamos para que se ejecute. Por ejemplo:

- Nº de procesadores
- Cantidad de memoria
- Otras características, como un determinado software o tecnología (CUDA, MPI, etc.)

Una vez enviados, los trabajos esperan su turno para ejecutarse. Cuanto más bajos sus requisitos, más fácil entrar

El gestor se encarga de buscar un nodo que satisfaga sus necesidades, ejecuta el programa y devuelve los resultados

Gestor de colas (II)

El gestor decide qué trabajos se ejecutan en cada momento basándose en

- Prioridad de cada usuario
- Disponibilidad de recursos (nodos libres)

Prioridad: todos los usuarios parten de la misma. Decrece al usar recursos. Aumenta un tiempo después de dejar de usarlos hasta la original

Si varios usuarios compiten por el mismo recurso, se le asigna al de mayor prioridad. Incluso puede llegar a quitar un trabajo que se está ejecutando para poner el de mayor prioridad

Sistema equitativo de uso del cluster. A la larga, todos los usuarios reciben los mismos recursos

Consultar el estado de la cola

Estado de los trabajos: condor_q y mi_condor_q

```
-- Submitter: proteus.localdomain : <192.168.3.120:59474> : proteus.localdomain
ID      OWNER      SUBMITTED      RUN_TIME ST PRI  SIZE CMD
796263.0 paula      4/10 16:36      5+15:09:59 H  0   293.0 2Dvoter 512 0.041 -0.2 1000000 1
796264.0 paula      4/10 16:36      5+15:09:35 H  0   293.0 2Dvoter 512 0.042 -0.2 1000000 1
796265.0 paula      4/10 16:37      5+15:09:35 H  0   293.0 2Dvoter 512 0.042 -0.2 1000000 1
```

Significado de las columnas:

- Identificativo de HTCondor
- Usuario que lo mandó (propietario)
- Fecha en la que se envió
- Tiempo que ha estado ejecutándose
- Estado: I → Idle, en espera
 - R → Running, ejecutándose
 - H → Hold, error en la ejecución
- Prioridad
- Tamaño en memoria
- Programa y sus argumentos

Consultar el estado del cluster

Estado de las máquinas: `condor_status`

```
-----  
| Machine      | Free Cores | Free Memory | Free Memory/Core |  
+-----+-----+-----+-----+  
| calypso02    |          0 |         3723 | -                 |  
| calypso03    |          0 |         3211 | -                 |  
| calypso19    |          0 |         3723 | -                 |  
| calypso22    |          0 |          139 | -                 |  
| calypso24    |          0 |          651 | -                 |  
| calypso27    |          0 |         1163 | -                 |
```

Tabla resumen

- Nombre de la máquina
- Número de cores (procesadores) libres
- Cantidad de memoria libre
- Cantidad de memoria libre por nodo
- Abajo aparece el total

Consultar el estado del cluster de manera gráfica

<http://gloton.ugr.es/ganglia>

Manos a la obra

Enviar trabajos: scripts `lanzarv` y `lanzarv2`

```
lanzarv miprograma [argumentos]
```

Diferencia: `lanzarv2` crea checkpoints o puntos de guardado aleatoriamente entre 1 y 2 días.

✓ Aporta tolerancia a fallos

✗ Ralentiza el programa

¿Por qué son necesarios los checkpoints?

- Como ya hemos visto, un programa puede ser sacado de ejecución por prioridad
- También puede haber caídas del cluster que hagan perder mucho tiempo de computación

¿Cuándo usar uno u otro?

- `lanzarv` para programas cortos (hasta varios días)
- `lanzarv2` para programas largos (semanas o meses)

Enviando trabajos

Una vez “lanzados”, HTCondor le asigna un identificador (número) y los pone en cola

Se crean 4 archivos automáticamente:

- Programa.submit: interno, usado para ejecutar el programa
- Programa.id.out: salida a pantalla
- Programa.id.err: errores
- Programa.id.log: prin

Si hay recursos libres, pasan a ejecutarse. Si no, compiten con otros trabajos:

- Prioridad de los usuarios
- Antes de sacar de ejecución a otro, éste habrá estado al menos 2 días

Es posible recibir un mail avisando cuando ha acabado un trabajo

¿Y si hay fallos?

Si se sacan de ejecución

- `lanzarv`: pasan a *Held*. Esperan por intervención del usuario
- `lanzarv2`: se reanudan desde el último checkpoint. Si no existe, desde el principio

Si ocurre un fallo y el trabajo es borrado de la cola (terminado con error), en el caso de `lanzarv2` se puede volver a encolar:

`relanzarv2 idCondor`: permite elegir el checkpoint a restaurar y lanza un nuevo trabajo desde ahí

Gestión adicional

“Modos avanzados” de lanzar

- Podemos indicar la cantidad de memoria y procesadores que necesita nuestro programa, tanto para `lanzarv` como para `lanzarv2`

```
lanzarv -m1000 -c4 miprograma reservaría 1000 MB y 4 cores
```

Borrar trabajos

```
condor_rm id_condor
```

```
condor_rm -all
```

Consultar prioridad `condor_userprio`

Prioridad entre trabajos

```
condor_prio -p priority | + value | - value  
id_condor
```

Parar y reanudar trabajos

```
condor_hold id_condor
```

```
condor_release id_condor
```

Basada en la facilidad

- Una única cola
- No hay cuotas de disco
- No hay límites de trabajos
- No hay restricción de IP de origen
- Scripts propios facilitan la interacción con el gestor de colas
- Autogestión usando la prioridad (historial de uso de recursos)

Futuro de PROTEUS

Ampliación/mejora en marcha (en espera de licitación)

Inversión en red de baja latencia para programación distribuida (paralelismo) + ~200 cores

+ mejora refrigeración

+ instalación eléctrica

Última “gran” ampliación. A partir de ahora será renovación

En función de su uso, las siguientes renovaciones irán en un sentido o en otro

Proyectos a largo plazo

Demás servicios computacionales

Además de supercomputación, contamos con:

Copias de seguridad

- A disco
- A cintas → extraíbles para guardarlas en lugar seguro

Alojamiento web

- Páginas personales (lo veremos a continuación)
- Páginas para asignaturas (moodle), congresos, etc.

Soporte al investigador: resolución de problemas

Correo electrónico @onsager.ugr.es

- Más flexible, sin cuotas, cuentas para eventos, etc.

Almacenamiento en la nube

- Como dropbox, pero sin cuotas y con los datos en nuestros servidores
- Se pueden cifrar

PROTEUStv, canal de divulgación científica

Almacenamiento temporal de datos o consigna

<http://ergodic.ugr.es/uploads>

Presentación de la nueva web del iC1

Aspecto institucional (plantilla de la oficina web)

The screenshot displays the institutional website for the Instituto Carlos I de Física Teórica y Computacional. The header includes the UGR logo and the text "Universidad de Granada" on the left, and a search bar and language selector ("Español English") on the right. The main title "INSTITUTO CARLOS I DE FÍSICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL" is prominently displayed in purple. Below the title is a banner image of a particle detector and the iC1 logo. The navigation menu on the left lists: Home, About the iC1, Governing, Computation Service, Activities, and Publications. The main content area features a "Home" section with a paragraph describing the institute's history and research focus, followed by a "News and events" section listing four recent events with dates and "read more" links. The sidebar on the right contains a "Contrato programa 2014" button, a login form with fields for "Username" (admin) and "Password" (masked), and an "Enviar" button. Below the login form are two event announcements: "Conferencias del iC1 Fronteras de la Física" and "Curso de verano Aspectos Físicos y Matemáticos de la Naturaleza y la Sociedad".

UGR Universidad de Granada

Search:

INSTITUTO CARLOS I DE FÍSICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL



- Home
- About the iC1
- Governing
- Computation Service
- Activities
- Publications

Contrato programa 2014

Username: Password:

Enviar 

Home

The **Institute Carlos I for Theoretical and Computational Physics (IC1)** of the University of Granada was established in 1995. Since its foundation, the IC1 has fostered scientific research, both applied and fundamental, with the focus on theoretical and computational physics. Due to its university character, the IC1 also carries out teaching activities covering basic and interdisciplinary Physics.

News and events

- 12/06/2015** Ciclo de Conferencias "Fronteras de la Física": Physicist's Theory of Biological Robustness and Plasticity: Fluctuation and Response in Adaptation and Evolution [read more](#)
- 29/05/2015** Ciclo de Conferencias "Fronteras de la Física": Experimentos de precisión con iones enfriados con láseres en trampas electromagnéticas [read more](#)
- 27/05/2015** Conferencia: Stochastic dynamics of spatially extended populations [read more](#)
- 20/05/2015** "The QUIJOTE experiment: first results and future plans" [read more](#)

Conferencias del iC1
Fronteras de la Física

Curso de verano
Aspectos Físicos y Matemáticos de la Naturaleza y la Sociedad
Almuñecar,
del 13 al 16 de julio de
2015



Net-works 2015
International Conference
Complex networks and their
interdisciplinary applications
Granada (Spain), September 16-18, 2015

Principales características:

- Listado automático de las publicaciones de los miembros
 - Actualizado diariamente
 - Fuente: web of science
 - Comprobar resultados: te falta algún artículo? Podemos mejorar la búsqueda
- Banners laterales: disponible para anunciar congresos, cursos, etc. Ordenados por fecha de realización
- Noticias y eventos (mantenida por Paco)
- Actividades y aparición en los medios (mantenida por Elvira)
- Listado de miembros, con enlace a web personal, foto y enlace a publicaciones
- Demás información sobre el iC1
- Idiomas: inglés y español
- Tema Wordpress disponible para otras webs

Alojamiento de webs en ic1.ugr.es

Desde hace tiempo, se pueden alojar webs en el servidor web:

- Personales
- Grupos, departamentos, congresos

Ventajas frente a otros servidores:

- mayor flexibilidad
- no hay límite de número de webs
- no hay cuotas de disco
- lenguajes soportados: php, asp y cualquier libre
- base de datos: *mysql* y *SQL Server* de Windows

Métodos de publicación:

- Wordpress
- FTP
- Expression Web (Microsoft)

FTP y Expression Web

FTP:

- Creación del sitio web en tu máquina y copiarla al servidor por FTP
- Necesita más conocimientos, aunque también se tiene más control de todas las características de tu web

Expression Web:

- El programa permite editar la página web como si fuese un documento de texto (WYSIWYG), abrirlo remotamente y otras funcionalidades
- También permite gran control del sitio si sabemos programación web

Wordpress

La creación de un nuevo sitio es inmediata, todo el software ya está instalado

Muy extendido: 1 de cada 4 páginas de Internet están hechas en Wordpress

- Podemos encontrar multitud de temas, widgets y plugins que complementen la funcionalidad

Fácil de editar, no requiere conocimientos

Edición online a través de la propia web

Se pueden tener varios sitios webs

✘ Más difícil para combinar con desarrollos propios

<http://ic1.ugr.es/members/sitioweb>