

Guia de Uso dos Recursos Computacionais

Grupo de Estrutura Eletrônica Molecular, $\langle GE|EM \rangle$ – UFSC

29 de outubro de 2018

Cluster Júpiter – $\langle GE|EM \rangle$, UFSC

Acessando o Júpiter

1. Antes de acessar, se faz necessária a conexão com a rede da UFSC. Estando na universidade, apenas a conexão cabeada permite o acesso via *ssh* ao *cluster*. Para acesso externo, ou pelo wi-fi da UFSC, é necessária a conexão via VPN. Para mais informações, acesse [aqui](#).
2. Acesso via *ssh* se dá por meio do Terminal (em computadores linux), que também pode ser emulado em outros sistemas operacionais com programas como o PuTTY, Cygwin, entre outros. Para baixar arquivos do *cluster* para uma máquina local que não é Linux, o programa WinSCP facilita tal procedimento.
3. Estando com o terminal aberto, o acesso ao Júpiter é realizado digitando-se:

```
$ ssh nomedousuario@150.162.31.2
```

onde 150.162.31.2 é o IP do Júpiter. A seguir é solicitada a colocação da senha do usuário.

4. Você pode configurar um nome amigável para o *cluster* em seu computador. Basta adicionar as seguintes linhas ao arquivo $\$HOME/.ssh/config$ (crie o arquivo se necessário),

```
Host jupiter
HostName 150.162.31.2
User nomedousuario
```

Acesse o Júpiter então com

```
$ ssh nomedousuario@jupiter
```

5. A criação de uma nova conta deve ser solicitada ao Prof. Dr. Giovanni Finoto Caramori.

Utilizando o *cluster*

1. Para uso do *cluster*, criação e manipulação de arquivos, entre outras funções, é utilizada a linguagem Shell (linguagem básica do Terminal Linux). Para mais informações, acesse [aqui](#).
2. Para verificação dos softwares e pacotes instalados no *cluster*, é possível acessar:

```
$ ls /nfs-share/software
```

Atualmente, estão instalados pacotes como o AMBER, Dalton, GAMESS, GROMACS, LAMMPS, NAMD, NBO, NWChem, ORCA, QuantumEspresso e Siesta. Alguns dos pacotes encontram-se disponíveis em diferentes versões.

Submissão de *jobs* à fila do Júpiter

1. Após escrever o *input* (ex: *nomeinput.inp*) adequado para o *job* que se deseja calcular, este pode ser testado na fila de testes, ou submetido para a fila normal.
2. A submissão na fila de testes se dá através do comando:

```
$ qsub -qtestes -N nomeinput /nfs-share/scripts/submit.programa.sh -l  
nodes=1:ppn=1,walltime=10:00
```

onde o nome do *input* vem após o `-N`, e não apresenta a extensão (`.inp` por exemplo), seguido de um *script* de submissão (que pode ser criado, ou utilizar um pré existente – que estão reunidos na pasta `/nfs-share/scripts/`). Após o `-l`, é selecionado o número de nós, seguido do número de processadores e tempo desejado para que o cálculo seja rodado. Para a fila de testes, só é possível utilizar 1 nó, 1 processador, e num período máximo de 10 minutos.

3. Já a submissão na fila normal acontece sem a especificação da fila de testes (i.e., sem o uso de `-qtestes`):

```
$ qsub -N nomeinput /nfs-share/scripts/submit.programa.sh -l  
nodes=1:ppn=8,walltime=1:00:00:00
```

após a submissão, um número é gerado, e corresponde ao `jobID`, permitindo que este cálculo seja acompanhado e até mesmo cancelado.

4. Os recursos computacionais disponíveis no momento são: **acho interessante por o que o cluster tem em nodes e procs**. É possível checar o recurso que está disponível e em uso com o comando `showq`.
5. O gerenciamento dos *jobs* se dá através dos comandos de PBS, como por exemplo (comando seguido de sua função, entre parênteses):

```
$ showq (mostra a fila de jobs)  
$ qstat (mostra a lista de jobs do usuário enviados à fila)  
$ qpeek -f jobID (mostra o output do job sendo gerado – em tempo real devido à opção -f)  
$ qdel jobID (cancela o job)
```

Mais opções e funções para cada comando podem ser descobertas através do manual, como por exemplo:

```
$ man qstat
```

6. O sistema de filas gerencia a entrada de cálculos com determinados critérios de prioridade, a depender da quantidade de *jobs* enviados pelo usuário e disponibilidade de nós. Assim, inúmeros *inputs* podem ser submetidos, mas estes podem assumir 3 *status* diferentes: *Active Jobs* (que estão rodando no momento), *Idle Jobs* e *Blocked Jobs* (que são automaticamente redirecionados para a fila de ativos assim que houver disponibilidade de recursos). Tais *status* podem ser acompanhados pelos comandos `showq` e `qstat`.

Cluster Tarsus – UNIFRAN, SP

Acessando o Tarsus

1. Também é necessário o acesso da rede da UFSC para acessar o Tarsus. Caso esta conexão seja feita utilizando a VPN da UFSC, é necessário primeiro um *login* no Júpiter, e a partir dele acessar o Tarsus, com o seguinte comando:

```
$ ssh renato@200.136.87.9 -p 13324
```

A senha de usuário deve ser solicitada ao Prof. Dr. Giovanni Finoto Caramori.

2. O Tarsus possui 32 processadores, e é possível usar programas como o Gaussian, ORCA, entre outros. A partir dele também é possível acessar as demais máquinas disponíveis.
3. A principal é o Tarsus10, que possui 56 processadores, e é onde o programa ADF está instalado. Para acessá-lo, é só realizar o comando (já tendo acessado o Tarsus):

```
$ ssh tarsus10
```

4. Ambas as máquinas acima compartilham o mesmo HD, permitindo o acesso dos mesmos caminhos para diretórios e arquivos, independentemente de qual delas o usuário tenha acessado.

Utilizando o *cluster*

1. Para uso do Tarsus, criação e manipulação de arquivos, entre outras funções, também é utilizada a linguagem básica do Terminal Linux. Para mais informações, acesse [aqui](#).
2. Como a utilização deste *cluster* está atrelada a um usuário apenas (renato), um novo diretório de trabalho deve ser criado dentro da pasta /UFSC, com o nome do usuário. O uso destas máquinas está dedicado principalmente ao programa ADF e Gaussian, uma vez que são *softwares* pagos (e possuímos a licença apenas neste *cluster*).

Submissão de *jobs* no Tarsus

1. Após escrever o *input* (ex: nomeinput.inp) adequado para o *job* que se deseja calcular, o programa pode ser executado diretamente, uma vez que o *cluster* não possui sistema de filas. Entretanto, é imprescindível a excussão do comando:

```
$ htop
```

para verificar a quantidade de processadores livres. **Nunca** deve-se exceder a quantidade de processos possíveis, para não haver sobrecarga e perda de desempenho nos demais cálculos que estão sendo realizados.

2. Assim, havendo processadores disponíveis, a submissão se dá através da ferramenta [marathon](#). Ela já está instalada nos computadores em questão. Sua utilização para execução de cálculos no ADF, por exemplo, se dá da seguinte forma:

```
$ nohup marathon -n 28 adf *f1.in *f2.in *eda.in &
```

onde `nohup` e `&` são necessários para que o terminal seja liberado após a execução do comando, e que o cálculo não seja interrompido ao fechar o terminal. O número após o `-n` define o quantos processadores serão utilizados (opção que não é válida para todos os programas). Após o nome do programa a ser executado, são definidos os nomes dos inputs (com a extensão `.in`, por exemplo).

3. Inúmeros programas são suportados pelo `marathon`, para maiores informações, digite:

```
$ marathon -h
```

4. Para cancelar um cálculo que já está sendo executado, deve-se digitar o comando `htop`, selecionar o processo referente ao seu cálculo (com as teclas direcionais do teclado ou clicando com o *mouse*), pressionar a tecla **F9** do teclado, para que apareçam as opções, a tecla **9** para que seja selecionada a opção `SIGKILL`, e então, a tecla *enter*. Assim, este processo será cancelado.

Caso o modo de submissão envolva uma lista de *inputs* a ser executada, por exemplo, e deseja-se encerrar todos os processos, deve-se procurar o processo raiz, que executa os *inputs* sequencialmente. Do contrário, apenas o cálculo selecionado será finalizado, dando início ao seguinte da lista (que deverá sofrer o mesmo procedimento para ser cancelado).

Centros de Supercomputação

- Também é possível realizar cálculos em centros de supercomputação existentes no país, entre eles:
 - [CESUP](#) – UFRGS;
 - [Santos Dumont](#) – LNCC;
 - Demais [CENAPADS](#);
- O acesso à tais *clusters* se dá mediante envio de projetos para a abertura de contas (verificar maiores informações nos *sites*).

Ferramentas de Química

- Para desenho e manipulação de moléculas, geração de imagens, entre outras, há programas como:
 - [Chemcraft](#) (possuímos uma chave para o grupo, ver com os colaboradores a respeito; baixar a versão para windows);
 - [Avogadro](#);
 - [MarvinSketch](#);
 - [VMD](#);
 - [Chimera](#);
- Através da CAPES, temos acesso a uma série de bancos de dados de estruturas cristalográficas. Para tanto, é necessário um cadastro neste [site](#).

Os Bancos de estruturas cristalográficas da [Cambridge](#), por exemplo, onde é possível baixar um pacote com programas como o *ConQuest* e *Mercury* para busca de estruturas, ou utilizá-las *online*.