Suporte (GridUNESP) - Implantação #103
Instalação do Gaussian & Linda

24 Apr 2010 11:34 - Ney Lemke

Status:	Resolvida	**Start date:**	24 Apr 2010
Priority:	Normal	**Due date:**	
Assignee:	Gabriel Winckler	**% Done:**	100%
Category:		**Estimated time:**	20.00 hours
Target version:			

Description

O Gaussian e Linda devem ser instalados.

History

#1 - 24 Apr 2010 11:37 - Ney Lemke

- Tracker changed from Problema to Implantação

#2 - 27 Apr 2010 16:53 - Gabriel Winckler

- Status changed from Nova to Execução

Pelo telefone falei com o Prof. Tognolli, que está com o software.

Ele está enviando para São Paulo.

#3 - 30 Apr 2010 09:14 - Gabriel Winckler

- Status changed from Execução to Teste

- % Done changed from 0 to 100

Ontem (29/04) recebi por sedex o software.

Segue um roteiro da instalação do software e adaptações no cluster:

Instalação básica

Seguindo o instruído no manual, copiei o tgz e extraí. Depois rodei o script de instalação que só corrige as permissões.

O diretório escolhido como base foi o /opt/gaussian/ e a instalação ocorreu em /opt/gaussian/g09

Grupo de acesso

Como o Prof. Adelino requisitou explicitamente um controle sobre o uso do software, deixando claro que outros grupos de pesquisa também poderão utilizar, criei um grupo "gaussian" e atribui a esse grupo o software:

```
chgrp -R gaussian /opt/gaussian/g09
```

Com isso, para utiliza o software, o usuário precisa ser incluído nesse grupo.

Profile e ld.so.conf

Para carregar as variáveis de ambiente, foram criados os seguintes arquivos na Access e nos WorkerNodes:

/etc/profile.d/gaussian.sh

```
if [ -r /opt/gaussian/g09/bsd/g09.profile ]
then
   g09root=/opt/gaussian
   GAUSS_SCRDIR=/tmp
   export g09root GAUSS_SCRDIR

   . /opt/gaussian/g09/bsd/g09.profile
fi
```

/etc/profile.d/gaussian.csh

```
if (-r /opt/gaussian/g09/bsd/g09.login) then
   setenv g09root "/opt/gaussian"
   setenv GAUSS_SCRDIR "/tmp"

   source /opt/gaussian/g09/bsd/g09.login
endif
```

/etc/ld.so.conf.d/gaussian.conf

```
/opt/gaussian/g09/bsd
/opt/gaussian/g09/local
/opt/gaussian/g09/extras
/opt/gaussian/g09
```

Adaptações do universo paralelo do condor

Como esse programa é paralelo mas não utiliza MPI, modifiquei o job_wrapper do condor para identificar uma flag **NoMPI**

/opt/condor/bin/job_wrapper.sh

```
#!/bin/bash

source /etc/profile

UNIVERSE=$($(condor_config_val libexec)/condor_chirp get_job_attr JobUniverse 2>/dev/null)

if [ $? == 0 ] && [ $UNIVERSE == 11 ];
then
   NOMPI=$($(condor_config_val libexec)/condor_chirp get_job_attr NoMPI 2>/dev/null)
   if [ ${NOMPI}x == "TRUE"x ]
   then
      exec "$@"
   else
      exec /opt/condor/bin/condor-impi.sh "$@"
   fi
else
   exec "$@"
fi
```

Criação do job_wrapper específico para o Gaussian

/opt/gaussian/gaussian-parallel.sh

```
#!/bin/sh

_CONDOR_PROCNO=$_CONDOR_PROCNO
_CONDOR_NPROCS=$_CONDOR_NPROCS

GAUSSIAN=/opt/gaussian/g09/g09

finalize()
{
 exit
}
```

```
trap finalize TERM

#Create a empty response file
touch ${1}.log

if [ $_CONDOR_PROCNO -eq 0 ]
then
   #Get the list of slots
   SLOTS=$($(condor_config_val libexec)/condor_chirp get_job_attr AllRemoteHosts)

   nodes=$(echo $SLOTS |  sed -e 's/\"\(.*\)\".*/\1/' -e 's/,/\n/g' -e 's/slot.\@//g' -e 's/.local/i/g' | sort | uniq -c | awk '{print $2":"$1}' | tr '\n' ',')
   echo $nodes 1>&2

   #Contact the worker noder by SSH
   export GAUSS_LFLAGS=" -opt 'Tsnet.Node.lindarsharg: ssh'"

   #Add the nodes list
   sed -i 1i"%LindaWorkers=$nodes" ${1}.com

   ##Create a empty response file
   #touch ${2}.log

   $GAUSSIAN $@

else
   sleep 10
fi

exit $?
```

Testes e exemplo de submissão

Utilizando os exemplos que acompanham o software, testei diversas submissões, seriais e paralelas.

Criei uma página na wiki com o modelo de submissão:

https://www.ncc.unesp.br/twiki/bin/view/GuiaUsuario/GaussianSubmit

#4 - 30 Apr 2010 14:46 - Gabriel Winckler

- Project changed from NCC to Suporte (GridUNESP)

#5 - 01 Oct 2010 10:38 - Gabriel Winckler

- Status changed from Teste to Resolvida