Documentação do usuário GridUNESP

Introdução

Bem-vindo à página principal da documentação de usuário do GridUnesp, que visa disponibilizar informações úteis para a comunidade de usuários do sistema.

Correções e sugestões são sempre muito bem-vindas. Caso encontre falhas na documentação ou queira contribuir com sugestões para novos tópicos, pedimos que envie email ao time de suporte técnico: support(at)ncc.unesp.br.

Informações importantes

Política de uso

[[PoliticaDeUso|Política de uso]]

Certificados digitais

[[InformacaoCertificados|Informações sobre os certificados digitais]]

Citação

De acordo com a política de uso, em todos os artigos submetidos a revistas científicas, proceedings de conferências, teses, dissertações, etc., que façam uso dos recursos computacionais deve conter um agradecimento ao NCC/GridUNESP. O modelo de agradecimento segue abaixo:

"This research was supported by resources supplied by the Center for Scientific Computing (NCC/GridUNESP) of the São Paulo State University (UNESP)."

ou

"Esta pesquisa tornou-se possível graças aos recursos computacionais disponibilizados pelo Núcleo de Computação Científica (NCC/GridUNESP) da Universidade Estadual Paulista (UNESP)."

Solicitamos também que nos informe quando ocorrer a publicação.

Veja abaixo a lista de artigos científicos publicados sobre o GridUNESP.

[[Artigos|Artigos e trabalhos publicados]]

[[ProjetosCad|Projetos Cadastrados]]

Acesso e submissão

Informações básicas

- [[InstrucoesDeAcesso|Instruções de acesso]]
- [[TrocarSenha|Instruções de como trocar a senha]]
- [[EnvModules|Carregando ferramentas de compilação, aplicações e bibliotecas]]
- [[ReportingIssues|Identificando e informando problemas]]
- [[Filas| **Nova organização das filas**]]

Mecanismos de acesso aos recursos:

Atualmente o GridUnesp oferece diversas formas de utilizar os seus recursos. Elas variam em funcionalidade e capacidade. Com isso é possível escolher a forma que melhor atende ao seu modo de trabalho.

Cluster local (HPC tradicional)

Esse é o modelo tradicional de uso de recursos de alto desempenho (Cluster HPC).

- Vantagens:
  - simples
  - melhor controle dos recursos alocados
  - não requer mecanismos adicionais de segurança de grid (myproxy)
- Desvantagens:
  - envio fica limitado à apenas o cluster central, não explorando todo o potencial das grades
- Recomendação:
  - usuários iniciantes
  - usuários com processos MPI e/ou SMP
  - usuários com processos individuais que demorem mais de 12 horas
  - usuários que precisem depurar ou otimizar programas

Mais informações: [[SLURM| **Usando o cluster local (via SLURM)**]]

Grid tradicional (sem o go, diretamente com o condor_q)

É possível usar diretamente a estrutura de grid. Porém essa opção requer conhecimentos avançados da tecnologia de grid (globus, SRM, GridFTP, certificados...)

- Vantagens:
  - permite explorar todo o potencial das grades
  - uso de workflows complexos
  - capacidade de tratar grandes fluxos de dados (ordem de TB)
- Desvantagens:
  - limitações impostas aos processos de grid: single core, execução de até 12 horas, muitas vezes oportunístico
- Recomendação:
  - usuários experientes com grids
  - processos "bag of tasks" - muitos processos sem comunicação entre si

Mais informações: [[Introducao|Introdução sobre a tecnologia de grid]], [[SubmissaoTradicional| **Sistema tradicional de grid**]] e [[OperacaoCertificados|Informações práticas sobre o uso dos certificados digitais]]

Sistema de submissão simplificado (GO)

Para simplificar o uso da estrutura de grid, desenvolvemos o script go. Ele abstrai vários detalhes e permite a geração de arquivos de progresso e checkpoint, por exemplo.
As aplicações instaladas são suportadas através de um template, simplificando muito o uso para usuários iniciantes. Porém elas podem ser limitantes em diversos aspectos.

O sistema GO ainda é suportado, e pode ser usado para o envio ao cluster local ou para o grid. Futuramente daremos prioridade ao uso do Goo (portal e linha de comando), desenvolvido para suceder o GO.

- Vantagens:
  - suporte a diversas aplicações pelo uso de templates
  - simples de usar
  - abstrai o uso da tecnologia de grid
- Desvantagens:
  - limitado quando a definições precisas dos recursos (uso de memória, distribuição dos jobs MPI...)
  - eventualmente será substituído pelo Goo (portal)
- Recomendação:
  - usuários habituados com esse método

Mais informações: [[SubmissaoSimplificada| **Sistema de submissão simplificada (GO)**]]

Goo - Portal (+ linha de comando)

Trazendo diversos novos recursos, foi desenvolvido um sucessor do GO, o Goo. Ele é um portal de envio e gerenciamento de processos, mas que também funciona com linha de comando e uma API ReST.

Foi lançado em 2014, mas um número pequeno de aplicações suportadas pelo Go foram portadas para o Goo. Até que isso seja terminado, os dois sistemas estarão disponíveis.

- Vantagens:
  - simplicidade de uso: basta um navegador, funcionando inclusive em tablets e celulares
  - abstrai o uso da tecnologia de grid
- Desvantagens:
  - poucas aplicações suportadas no momento
- Recomendação:
  - usuários de aplicações já suportadas

Mais informações: **Portal de submissão**

Aplicativos suportados

Nome	Versão	Local(*)	GO	Goo
[[BEAST]]	1.6.1	S	S	N
[[BEAST]]	1.8.2	S	N	N
[[BEAST]]	2.3.0	S	N	N
[[BEAST]]	2.4.0	S	N	N
[[Charmm]]	c37b2	S	N	N
[[Clustalw]]	1.82	N	S	N
[[Crystal]]	14.1	S	S	N
[[Dacapo]]	r474	N	S	N
[[Dalton]]	2013.4	N	S	N
[[Dalton]]	2016.0	S	N	N
[[Dirac]]	12.3	N	S	N
[[Espresso]]	3.2.0	N	S	N
[[Estructure]]	2.3.4	S	N	N
[[Foam-Extend]]	3.1	S	N	N
[[Estructurama]]	2.0	S	N	N
[[Gamess]]	2013	N	S	N
[[Gamit]]	10.5	S	S	N
[[Garli]]	2.0	N	S	N
[[Gaussian]]	09	S	S	N
[[GPAW]]	2012 07	N	S	N
[[Gromacs]]	4.5.4	N	S	N
[[Gromacs]]	4.6.5	N	S	S
[[Gromacs]]	5.0.4	S	N	N
[[Hmmer]]	3.1b2	S	N	N
[[IM]]	12_17_2009	N	S	N
[[IMa2]]	8.26.11	N	S	N
[[LAMMPS]]	18_10_2011	N	S	N
[[LAMMPS]]	10_02_2015	S	N	N
[[Mathematica]]	9	S	S	N
[[MOPAC]]	13.294	N	S	N
[[MrBayes]]	3.1.2	N	S	N
[[MrBayes]]	3.2.5	S	N	N
[[Mugsy]]	1.2.1	N	S	N
[[NAMD]]	2.9	N	S	N
[[NAMD]]	2.10	S	N	N
[[NWChem]]	6.5.r26243	S	N	N
[[OpenFOAM]]	2.4.0	N	S	N
[[Orca]]	r1730	N	S	N
[[Phyluce]]	1.5.0	S	N	N
[[Python]]*	2.7	N	S	S
[[POY]]	4.1.2	N	S	N
[[QuantumEspresso]]	4.3	S	S	N
[[QuantumEspresso]]	5.2	S	S	N
[[R]]	3.1	S	S	N
[[RAxML]]	7.3.0	N	S	N
[[RAxML]]	8.2.2	S	N	N
[[Siesta]]	3.2.4	S	S	N
[[TESS3]]	1.0	S	N	N
[[Tesseract]]	3.05	S	N	N

(*) Todas as aplicações suportam execução pelo método local. As marcadas com (S) foram testadas e possuem os *enviroment modules* corretos
h1. Suporte

Sobre o estado do sistema

É possível verificar alguns aspectos do sistema através do "RSV": http://ce.grid.unesp.br/rsv/

Notícias relacionadas a instabilidades e manutenções serão registradas em Notícias (alto dessa página)

Email

Envie suas dúvidas para a equipe de suporte através do email support(at)ncc.unesp.br.

Reportando problemas

Para reportar dúvidas ou problemas utilize o sistema de tickets.

Para criar um novo Ticket, clique em "Entrar" no canto direito superior e use seu usuário e senha.

Dúvidas freqüentes

[[FaqSuporte|FAQ (Frequently Asked Questions)]]

Estatísticas

- [[Utilizacao2010|Utilização 2010]]
- [[Utilizacao2011|Utilização 2011]]
- [[Utilizacao2013|Utilização 2013]]

Eventos

- São Paulo OSG School: https://indico.fnal.gov/conferenceDisplay.py?confId=3586
- [[Encontro2011]]
- [[WorkshopHPCSysAdmins]]