



Dziedzinowo zorientowane  
usługi i zasoby infrastruktury  
PL-Grid dla wspomaganie  
Polskiej Nauki w Europejskiej  
Przestrzeni Badawczej

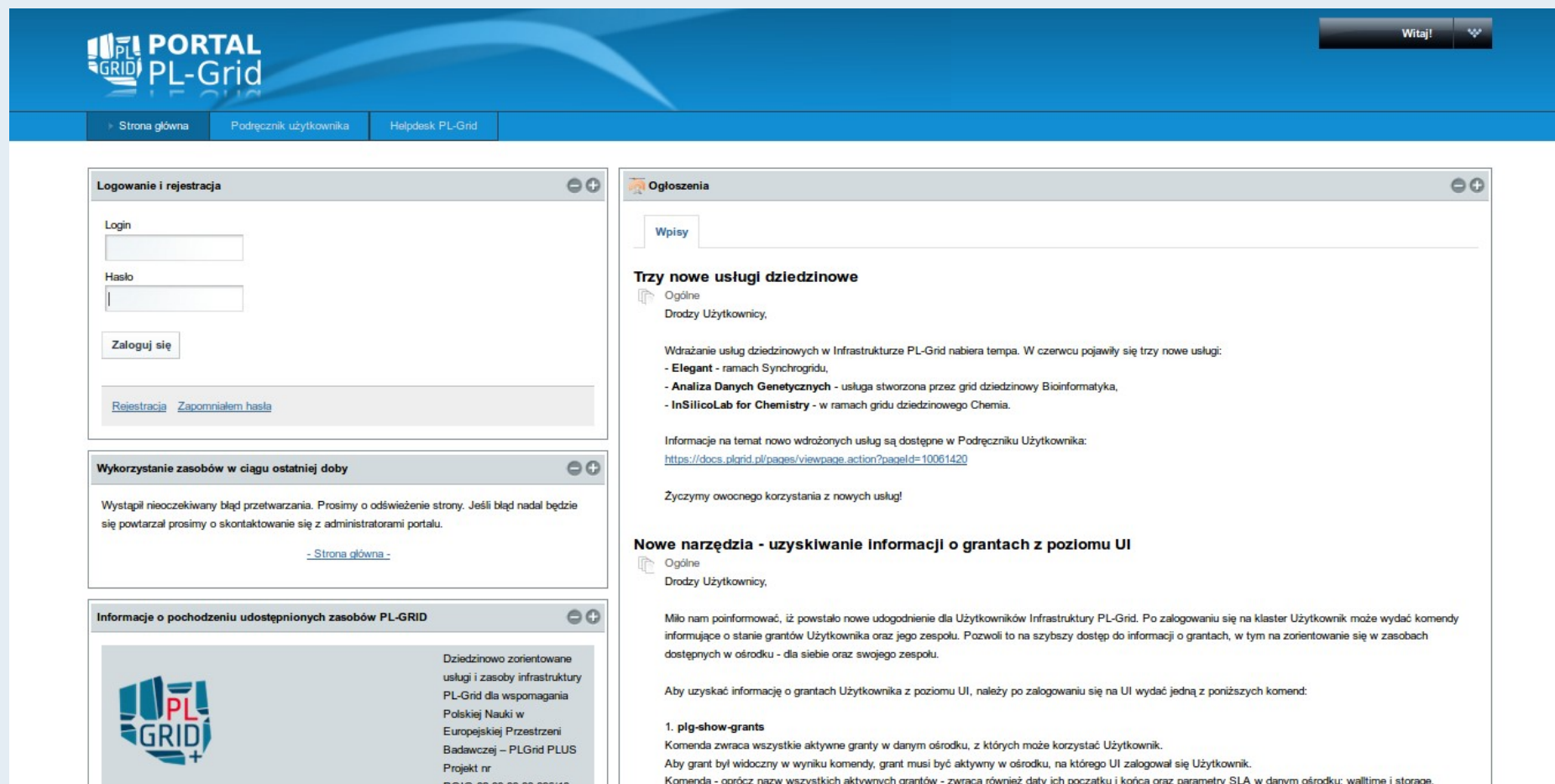
# Computational infrastructure for polish science

Mikołaj Mikołajczyk

Wrocław Centre for Networking and Supercomputing

Kraków, 04.09.2013

# https://portal.plgrid.pl



The screenshot shows the PL-GRID portal homepage. The top navigation bar includes the PL-GRID logo, a 'Witaj!' (Welcome!) button, and a dropdown menu. Below the navigation bar are three menu items: 'Strona główna', 'Podręcznik użytkownika', and 'Helpdesk PL-Grid'. The main content area is divided into several sections:

- Logowanie i rejestracja**: A login and registration section with fields for 'Login' and 'Hasło' (password), a 'Zaloguj się' button, and links for 'Rejestracja' and 'Zapomniałem hasła'.
- Wykorzystanie zasobów w ciągu ostatniej doby**: A section reporting an unexpected processing error and advising users to refresh the page or contact administrators.
- Informacje o pochodzeniu udostępnionych zasobów PL-GRID**: A section with the PL-GRID logo and text describing the infrastructure and its support for Polish science and the European Research Infrastructure (PLGrid PLUS).
- Ogłoszenia**: A news section with a 'Wpisy' (Posts) tab. It features two main announcements:
  - Trzy nowe usługi dziedziczne**: A notice about three new services in the PL-GRID infrastructure, including 'Elegant', 'Analiza Danych Genetycznych', and 'InSilicoLab for Chemistry'.
  - Nowe narzędzia - uzyskiwanie informacji o grantach z poziomu UI**: A notice about new tools for grant information retrieval, including a list of commands like 'plg-show-grants'.

## <https://portal.plgrid.pl>

- User manual

<https://docs.plgrid.pl/rejestracja>

- Manual in english

<https://docs.cyfronet.pl/display/PLGDoc/User+manual>

- Select “Posiadam własny numer OPI” if you can find your name in the OPI Database:  
<http://nauka-polska.pl/dhtml/raportyWyszukiwanie/wyszukiwanieLudzieNauki.fs>
- Otherwise select: “Jestem podopiecznym osoby zarejestrowanej w bazie OPI” and provide as supervisor:  
Mikołaj Mikołajczyk (OPI number: 226271)
- To change supervisor after workshop and keep using PL-Grid account contact **helpdesk@plgrid.pl**

- Needed by grid services to authenticate user and secure communication
- PL-Grid portal generate certificates in the PKCS12 format (.p12)
- Protected with password
- Must be kept in secure and not given to any other person

## Application for access to the QosCosGrid

### Usługi globalne [Zwiń](#)

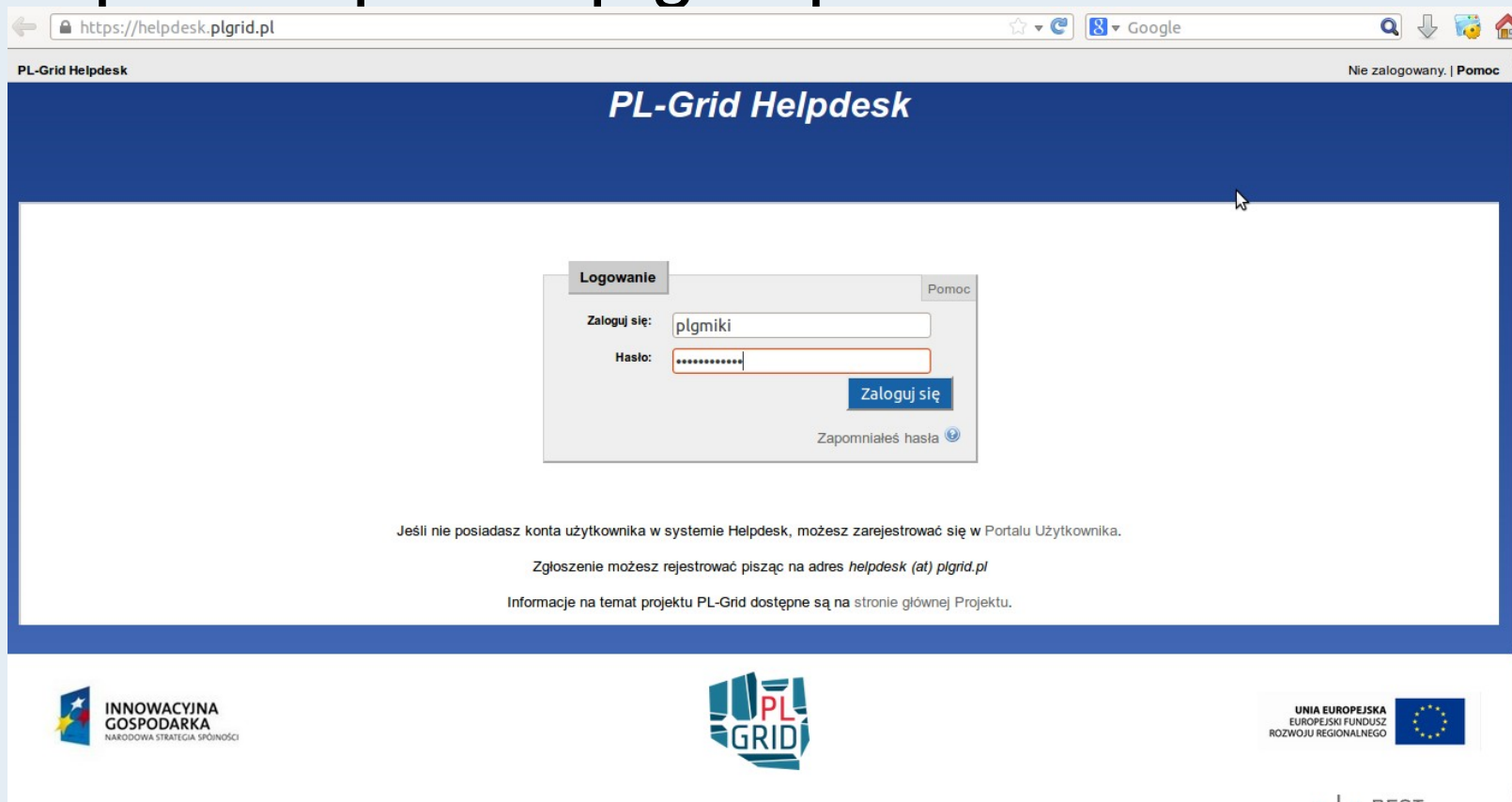
Nazwa	Zasięg	Usługa nadrzędna	Status	Strona z informacjami
Globalny dostęp gLite	GLOBAL	(brak)	<a href="#">Aplikuj o usługę</a>	<a href="#">Informacje</a>
+ Globalny dostęp QosCosGrid	GLOBAL	(brak)	<a href="#">Aplikuj o usługę</a>	<a href="#">Informacje</a>
+ Globalny dostęp UNICORE	GLOBAL	(brak)	Aktywna	<a href="#">Informacje</a>

# What if something went wrong?

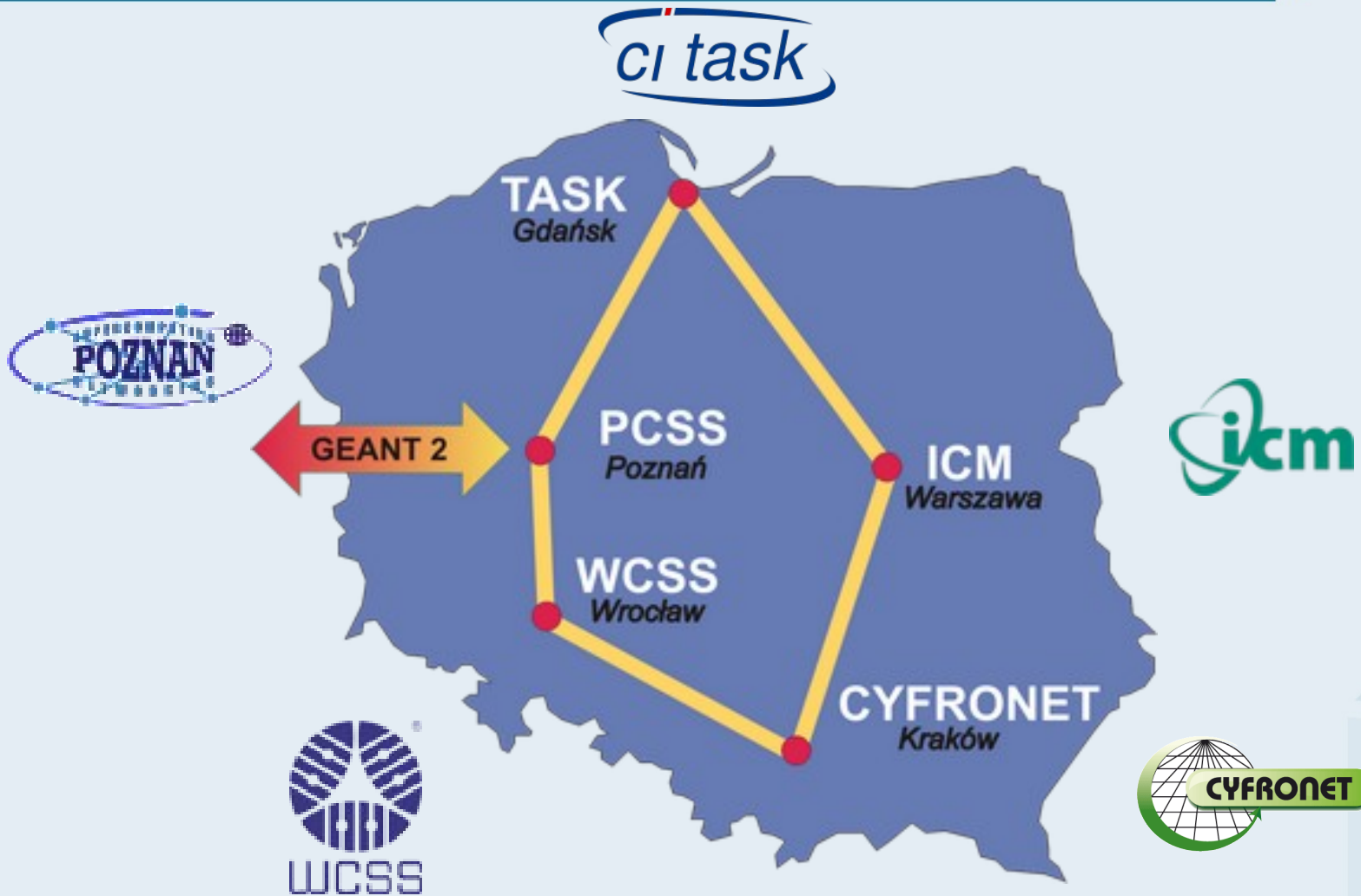


## helpdesk@plgrid.pl

## https://helpdesk.plgrid.pl



# Polish grid infrastructure



**41 248** cores

**113,26** TB RAM

**8.38** PB storage





# Domain-oriented services and resources of Polish Infrastructure



The main aim of the PLGrid Plus project is to increase potential of the Polish Science by providing the necessary IT services for research teams in Poland, in line with European solutions.

Pilot introduction of 13 domain grids opens the scope of use of the Project results by various research communities. However, the scope is not limited to the selected domains. By using the developed general services and experience in building the domain ones, the integration of new groups will proceed smoothly and at lower cost.



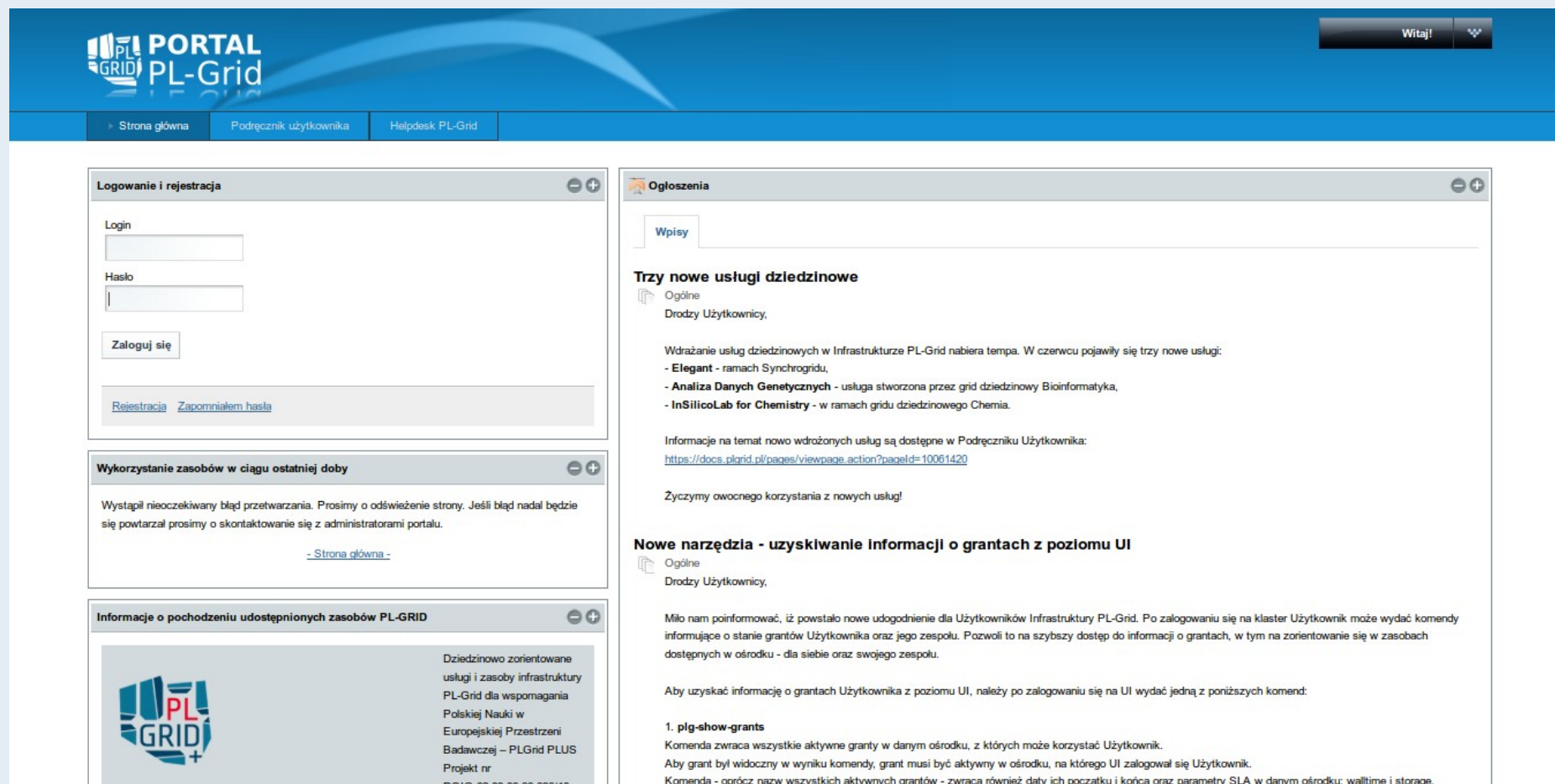
# Who can use PL Grid infrastructure?



- Polish scientist (with OPI number)
- Foreigner coworkers of polish scientist (the head of the group should have OPI number)
- Participants of today's tutorial can have temporary access



# https://portal.plgrid.pl



The screenshot shows the PL-Grid portal homepage. At the top left is the 'PORTAL PL-Grid' logo. To the right is a 'Witaj!' (Welcome!) button. Below the logo is a navigation bar with links: 'Strona główna', 'Podręcznik użytkownika', and 'Helpdesk PL-Grid'. The main content area is divided into several sections:

- Logowanie i rejestracja**: A login form with fields for 'Login' and 'Hasło', a 'Zaloguj się' button, and links for 'Rejestracja' and 'Zapomniałem hasła'.
- Wykorzystanie zasobów w ciągu ostatniej doby**: A message stating: 'Wystąpił nieoczekiwany błąd przetwarzania. Prosimy o odświeżenie strony. Jeśli błąd nadal będzie się powtarzał prosimy o skontaktowanie się z administratorami portalu.' with a link to '- Strona główna -'.
- Informacje o pochodzeniu udostępnionych zasobów PL-GRID**: A section with the PL-Grid logo and text: 'Dziedzinnie zorientowane usługi i zasoby infrastruktury PL-Grid dla wspomagania Polskiej Nauki w Europejskiej Przestrzeni Badawczej – PLGrid PLUS Projekt nr POK.02.03.MN.00.00.10'.
- Ogłoszenia**: A section with a 'Wpisy' tab and two announcements:
  - Trzy nowe usługi dziedziczne**: 'Wdrażanie usług dziedzicznych w Infrastrukturze PL-Grid nabiera tempa. W czerwcu pojawiły się trzy nowe usługi: - **Elegant** - ramach Synchrogridu, - **Analiza Danych Genetycznych** - usługa stworzona przez grid dziedziczny Bioinformatyka, - **InSilicoLab for Chemistry** - w ramach gridu dziedzicznego Chemia.' It includes a link to a document: <https://docs.plgrid.pl/pages/viewpage.action?pageId=10061420> and a closing sentence: 'Życzymy owocnego korzystania z nowych usług!'.
  - Nowe narzędzia - uzyskiwanie informacji o grantach z poziomu UI**: 'Milo nam poinformować, iż powstało nowe udogodnienie dla Użytkowników Infrastruktury PL-Grid. Po zalogowaniu się na klaster Użytkownik może wydać komendy informujące o stanie grantów Użytkownika oraz jego zespołu. Pozwoli to na szybszy dostęp do informacji o grantach, w tym na zorientowanie się w zasobach dostępnych w ośrodku - dla siebie oraz swojego zespołu.' It includes a sub-section '1. plg-show-grants' with instructions: 'Komenda zwraca wszystkie aktywne granty w danym ośrodku, z których może korzystać Użytkownik. Aby grant był widoczny w wyniku komendy, grant musi być aktywny w ośrodku, na którego UI zalogował się Użytkownik. Komenda - oprócz nazw wszystkich aktywnych grantów - zwraca również daty ich początku i końca oraz parametry SLA w danym ośrodku: walltime i storage.'

- Personal grant
  - 1000 core-hours
  - 40 GB storage
  - renewed automatically every 6 months
- Regular grant
  - more resources available
  - given for a research group (could be one person group)

## ■ Definition:

$\text{core-hower} = \text{used-cores} \cdot (\text{job-end-time} - \text{job-start-time})$

## ■ Example:

- 1 core and 74h running time =  $1 \cdot 74\text{h} = 74$  core-howers
- 6 cores and 12h running time =  $6 \cdot 12\text{h} = 74$  core-howers
- 2 nodes with 12 cores each and 48h running time (24 cores total)  
=  $24 \cdot 48\text{h} = 1152$  core-howers

## ■ Chemistry/Biology

- ABINIT, ADF, AMBER, CFOUR, CP Dalton, GAMESS, Gaussian, Molcas, Molpro, MOPAC, NWChem, Open Babel, Siesta, TURBOMOLE, AutoDock/AutoGrid, Clustal, CPMD, Gromacs, NAMD

## ■ Physics

- FLUENT, Meep, OpenFOAM

## ■ Nanotechnology

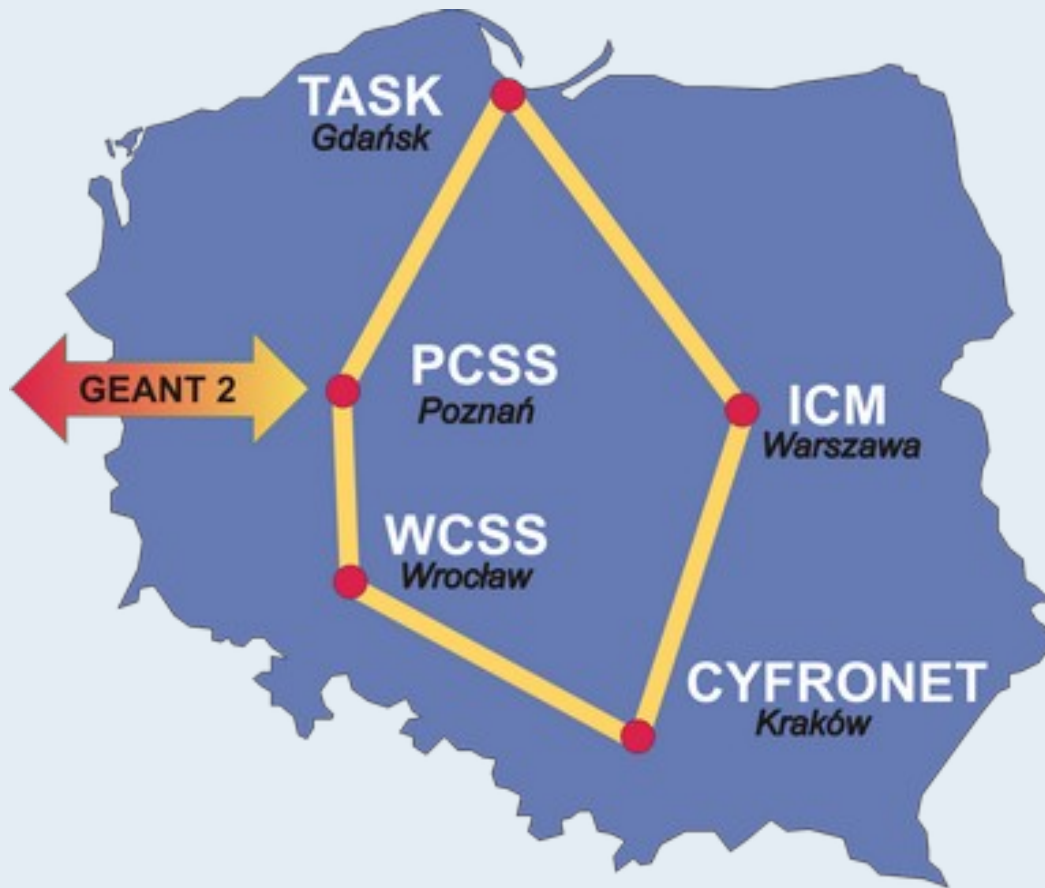
- ABINIT, Quantum Espresso, NAMD

## ■ Multipurpose

- Mathematica, MATLAB

## ■ Development

- Intel, PGI, GNU compilers, MKL, OpenMPI TAU, Alinea, CUDA



# POWIEW



**41 248** cores

**113,26** TB RAM

**8.38** PB storage

# Nodes for special purposes



Center	Cluster	Nodes	Cores/ node	Mem/ core [GB]	Mem/ node [GB]
ACK CYFRONE TAGH	Zeus BigMem	104	64	4	256
ICM UW	Hydra	15	64	8	512
WCSS	Supernova	3	64	4	256
CI TASK	Galera Plus	2	192	6	1000





# Nodes for special purposes



- Zeus GPGPU  
28 x NVIDIA Tesla M2050  
80 x NVIDIA Tesla M2090



- Hydra  
48 x NVIDIA Tesla M2050  
4 x NVIDIA Tesla K20



- Inula  
104 x NVIDIA Tesla M2050



- Supernova  
6 x NVIDIA Tesla M2090

- You can run calculations on the clusters in 5 HPC from single user interface
- The possibility of use of five HPC centers resources provides constant access to resources.
- Free access to many licensed softwares
- Graphical User Interface for job submitting

- QosQosGrid



- Unicore



- Glite



- Command line QosCosGrid client
- Allows to submit jobs from single place to any PL-Grid cluster
- Job description consist of set of #QCG directives
- Support for e-mail and jabber notifications
- Interactive job
- Documentation: <https://docs.plgrid.pl/qcg-client>

NAME	Max Waltime	Prioryty
plgrid-testing*	1	Highest
plgrid	72	Medium
plgrid-long	168	Medium/Lowest

\* 3 jobs per user allowed

# Resources available



Center	Cluster	Full name QCG	QCG alias
WCSS	supernova	nova.wcss.wroc.pl	nova
PCSS	reef	reef.man.poznan.pl	reef
PCSS	inula	inula.man.poznan.pl	inula
Cyfronet AGH	zeus	zeus.cyfronet.pl	zeus
CI TASK	galera plus	galera.task.gda.pl	galera
ICM	hydra	hydra.icm.edu.pl	hydra



- QCG-Client is available on the:

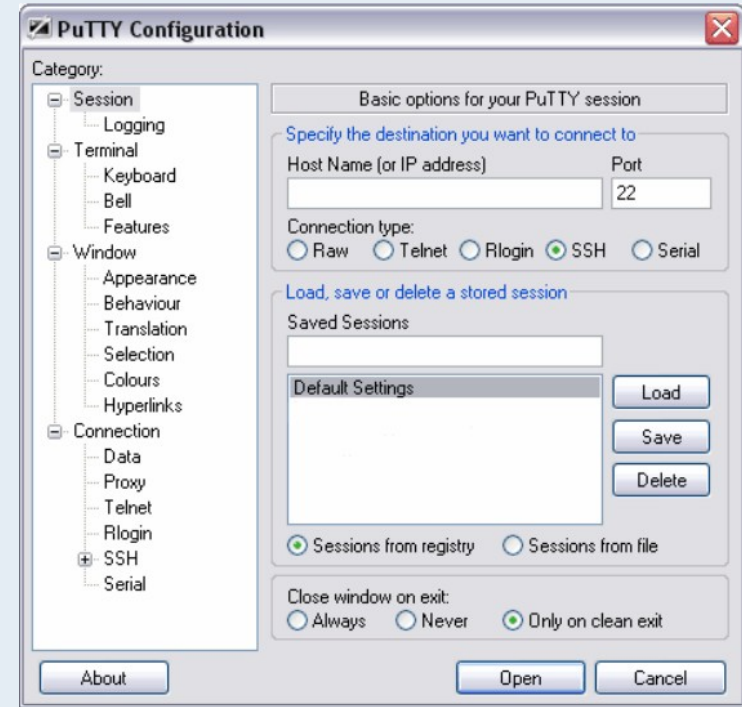
- [ui.plgrid.wcss.wroc.pl](http://ui.plgrid.wcss.wroc.pl)
- [qcg.man.poznan.pl](http://qcg.man.poznan.pl)

- Login using ssh protocol

- `ssh plguser@ui.plgrid.wcss.wroc.pl`

- using PUTTY

<http://the.earth.li/~sgtatham/putty/latest/x86/putty.exe>



```
$ ssh plgmiki@ui.plgrid.wcss.wroc.pl
...
WCSS [plguser@ui ~]$ creds keyfs
WCSS [plguser@ui ~]$ cp /tmp/cttc6.tar .
WCSS [plguser@ui ~]$ tar -xvzf cttc6.tar
WCSS [plguser@ui ~]$ ls
cttc6
WCSS [plguser@ui ~]$ vi sample.qcg
```



```
#QCG queue=plgrid-testing
#QCG name=etanol
#QCG note=etanol Gaussian
#QCG output=${JOB_ID}.output
#QCG error=${JOB_ID}.error
#QCG stage-in-file=sample.com -> sample.com
#QCG stage-out-file=wynik.tar -> ${JOB_ID}.tar
#QCG nodes=1:1:1
#QCG walltime=PT1H
#QCG memory=1800

#QCG preprocess=echo START
#QCG application=g09
#QCG argument=sample.com
#QCG postprocess=tar cvf wynik.tar *
```

```
WCSS [plguser@ui ~]$ qcg-sub sample.qcg
```

```
...
```

```
WCSS [plguser@ui ~]$ qcg-list
```

```
...
```

```
WCSS [plguser@ui ~]$ qcg-info JBO_ID
```

```
...
```

```
#QCG queue=plgrid-testing
#QCG name=et_modul
#QCG note=etanol Gaussian
#QCG output=${JOB_ID}.output
#QCG error=${JOB_ID}.error
#QCG stage-in-file=sample.com -> input.com
#QCG stage-out-file=wynik.tar -> ${JOB_ID}.tar
#QCG nodes=1:1:1
#QCG host=nova
#QCG persistent
#QCG walltime=PT1H
#QCG memory=1900
#QCG postprocess=tar cvf wynik.tar *
```

```
module load gaussian
(echo "%nproc=1"
echo "%mem=1500MB"
cat input.com |egrep -vi -e %mem -e %nproc
echo "") |g09 >& sample.log
```

qcg-sub – submit a job into QCG infrastructure

qcg-list – display submitted jobs list

qcg-info – display detail information about job

qcg-cancel – cancel submitted job

qcg-clean – remove persistent job working directory

qcg-peek – preview of the output of the application

qcg-connect – creates interactive session in the running job directory

- Download from:  
<https://apps.man.poznan.pl/trac/qcg-icon/downloads>
- For use of KeyFS install:  
<http://www.oracle.com/technetwork/java/javase/downloads/jce-6-download-429243.html>