

MANUAL DEL USUARIO

CONTROL DE CAMBIOS		
Versión	Fecha	Motivo de la modificación
01	03/07/2025	Actualización del manual



ÍNDICE

1.	INTRODUCCIÓN.....	3
2.	CONCEPTOS BÁSICOS.....	3
3.	PRERREQUISITOS	4
4.	ACCESO.....	5
5.	SISTEMA DE COLAS.....	6
6.	DIAGRAMA DE FLUJO	9
7.	RECURSOS SOFTWARE	10
8.	PROGRAMAS	10
8.1	Gaussian 16.....	10

1. INTRODUCCIÓN

Este documento está diseñado para proporcionar una guía completa sobre el uso efectivo de un clúster, así como de varios programas informáticos enfocados principalmente a la química y física cuántica. Desde la configuración inicial del entorno de trabajo hasta la ejecución de cálculos avanzados, el objetivo es proporcionar a los usuarios una base sólida para aprovechar al máximo las capacidades de estas herramientas.

2. CONCEPTOS BÁSICOS

HPC (High Performance Computing) o **Computación de Alto Rendimiento**: es una tecnología que utiliza clústeres de potentes procesadores trabajando en paralelo para procesar conjuntos de datos masivos multidimensionales (big data) y resolver problemas complejos a velocidades extremadamente altas.

Clúster: se puede definir como un sistema de procesamiento paralelo o distribuido. Consta de un conjunto de superordenadores (servidores) independientes, interconectadas entre sí, de tal manera que funcionan como un solo recurso computacional. A cada uno de los elementos del *clúster* se le conoce como **nodo**.

Computación paralela: es una forma de cómputo en la que se hace uso de 2 o más procesadores para resolver una tarea.

Computación serial: es una forma de cómputo en la que se hace uso de un solo procesador para resolver una tarea.

Nodo principal: conocido también como "frontend" o "nodo00", es el servidor que gestiona todos los recursos informáticos del clúster (servicios, usuarios, almacenamiento compartido, programas, etc.). Es el "cerebro" del clúster (en este nodo NO se ejecutan cálculos).

Nodo de cómputo: su única función es realizar tareas de computación y almacenar de forma temporal archivos de salida mientras se ejecuta un cálculo, se encarga de efectuar las tareas que se le envían desde el nodo principal a través del sistema de colas, se podría decir que estos nodos son el "músculo" del clúster.

Sistema de colas: es una herramienta o servicio que se encarga de gestionar de forma automática los recursos "hardware" del clúster (memoria RAM, procesadores, GPUs, etc.) y distribuye los trabajos entre los nodos de cómputo. Por cada trabajo (cálculo) que usted envía al sistema de colas, recibirá un identificador único (JOB_ID).

Trabajos: conocido por su nombre en inglés "jobs", no son nada más que cálculos, cada cálculo que usted envía al sistema de colas se considera un trabajo.

JOB_ID: es un identificador único para cada trabajo que se envía al sistema de colas.

Launcher o lanzador: es un "script" que fue previamente desarrollado por el Administrador del sistema para facilitar el uso de los programas, contiene instrucciones generales del sistema de colas y otras instrucciones específicas del programa. Cada programa dispone de su propio lanzador, no está permitido el uso de programas sin su correspondiente lanzador ya que esto puede generar fallos en los cálculos.

Scratch: unidad de almacenamiento local donde se generan los ficheros temporales de salida.

3. PRERREQUISITOS

Conexión

El acceso al clúster está restringido a la red interna de la Universidad de Alcalá. Solo se permite acceder desde un ordenador conectado a la red local de la universidad (por ejemplo, desde el equipo de su despacho o laboratorio) o de forma remota a través de la VPN (FortiClient).

Siga las instrucciones para configurar cliente VPN (FortiClient):

<https://uah.atlassian.net/wiki/spaces/CAU/pages/3703442/VPN>

Credenciales

Es indispensable contar con un usuario y contraseña para acceder a los recursos del clúster. Por favor, contacte con el Administrador del sistema para obtener sus credenciales.

Software

Una vez que tiene acceso a la red interna de la universidad y que ha obtenido su usuario y contraseña, necesitará un cliente SSH para realizar la conexión y un cliente FTP para la transferencia de archivos.

Para usuarios de Windows se recomienda utilizar "[MobaXterm](#)", que además de ser un cliente SSH implementa de forma nativa FTP para transferencia de archivos.

En caso contrario, tendrá que descargar dos programas, un cliente SSH (como por ejemplo "[putty](#)") y un cliente FTP para transferencia de archivos (como por ejemplo [WinSCP](#)).

Los usuarios más avanzados de Linux y MacOS pueden elegir los clientes SSH/FTP que consideren más convenientes.

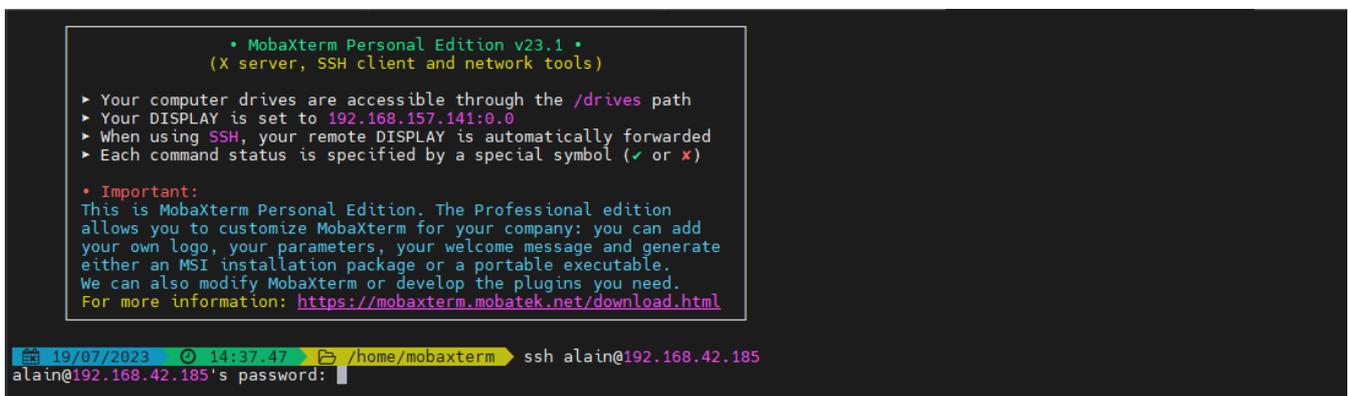
4. ACCESO

Abra su cliente SSH (en este caso MobaXterm) y escriba el siguiente comando:

ssh <usuario>@192.168.42.185 (reemplace <usuario> por su propio nombre de usuario)

A continuación, pulse la tecla "Enter" e introduzca su contraseña.

Importante: Cuando teclee la contraseña, esta no se mostrará en pantalla, ni en texto claro ni otro formato como "*****". El cursor tampoco se moverá, por lo que puede tener la sensación de no estar escribiendo, se trata de una medida de seguridad, simplemente escriba su contraseña como de forma habitual y después pulse la tecla "Enter".



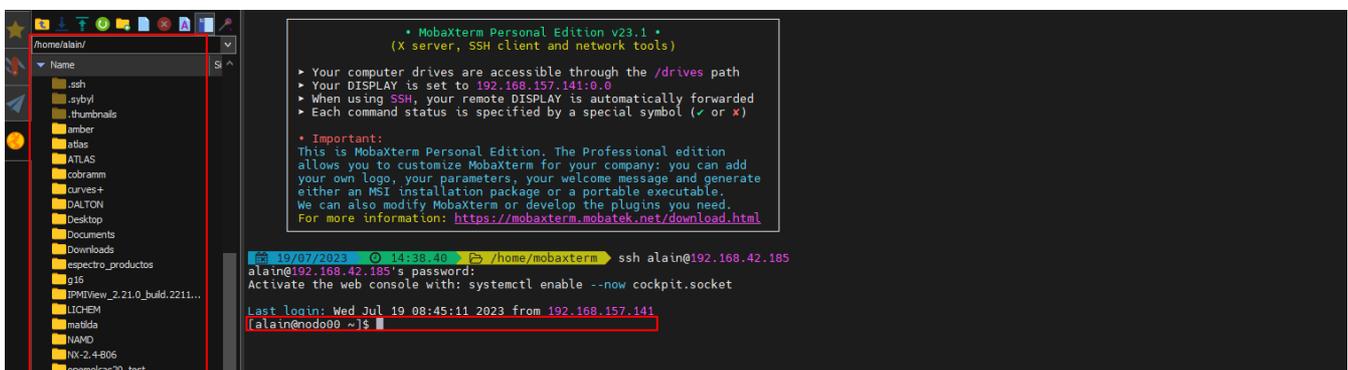
```
• MobaXterm Personal Edition v23.1 •
(X server, SSH client and network tools)

▶ Your computer drives are accessible through the /drives path
▶ Your DISPLAY is set to 192.168.157.141:0.0
▶ When using SSH, your remote DISPLAY is automatically forwarded
▶ Each command status is specified by a special symbol (✓ or ✗)

• Important:
This is MobaXterm Personal Edition. The Professional edition
allows you to customize MobaXterm for your company: you can add
your own logo, your parameters, your welcome message and generate
either an MSI installation package or a portable executable.
We can also modify MobaXterm or develop the plugins you need.
For more information: https://mobaxterm.mobatek.net/download.html

19/07/2023 14:37:47 /home/mobaxterm ssh alain@192.168.42.185
alain@192.168.42.185's password: █
```

Si ha introducido correctamente sus credenciales, se le mostrará una pantalla como la que puede observar a continuación:



```
• MobaXterm Personal Edition v23.1 •
(X server, SSH client and network tools)

▶ Your computer drives are accessible through the /drives path
▶ Your DISPLAY is set to 192.168.157.141:0.0
▶ When using SSH, your remote DISPLAY is automatically forwarded
▶ Each command status is specified by a special symbol (✓ or ✗)

• Important:
This is MobaXterm Personal Edition. The Professional edition
allows you to customize MobaXterm for your company: you can add
your own logo, your parameters, your welcome message and generate
either an MSI installation package or a portable executable.
We can also modify MobaXterm or develop the plugins you need.
For more information: https://mobaxterm.mobatek.net/download.html

19/07/2023 14:38:46 /home/mobaxterm ssh alain@192.168.42.185
alain@192.168.42.185's password:
Activate the web console with: systemctl enable --now cockpit.socket

Last login: Wed Jul 19 08:45:11 2023 from 192.168.157.141
[alain@nodo00 ~]$ █
```

A la izquierda se encuentra el **árbol de directorios**, a través del cual se puede mover de un directorio a otro, crear nuevos directorios y ficheros, subir archivos desde su equipo local, etc... (recuerde que los directorios y ficheros con un "." delante son archivos del sistema que no debe modificar ni borrar).

A la derecha encontrará el clásico terminal de LINUX con el **"prompt"** a través del cual podrá ejecutar cualquier comando UNIX y también desde donde podrá lanzar sus cálculos.

5. SISTEMA DE COLAS

Slurm (Simple Linux Utility for Resources Management), es un sistema de gestión de tareas y de clústeres (nodos o servidores de cómputo). Slurm como sistema de gestión tiene tres tareas claves:

1. Asignar a los usuarios acceso exclusivo o no exclusivo a nodos de cómputo durante un tiempo determinado para que puedan ejecutar sus tareas.
2. Proporciona un framework que permite iniciar, ejecutar y supervisar el trabajo.
3. Se encarga de arbitrar la disputa de recursos, administrando una cola de tareas pendientes.



En SLURM, debemos de diferenciar dos tipos de roles (que se corresponden con los distintos tipos de usuarios del sistema), que son los "usuarios" y los "administradores". Ambos interactúan con SLURM mediante un conjunto de **comando** simples, pero sus propósitos son totalmente contrapuestos:

- **Usuarios:** Envían trabajos para que se ejecuten, y esperan a que finalice lo más rápido posible y de manera correcta, sin importarles si el trabajo se ha realizado en uno, dos o tres nodos de cómputo.
- **Administradores:** Debe encontrar la manera de ejecutar trabajos paralelos en nodos paralelos, y lo que es más importante, deben hacer como si el trabajo se ejecutará en un solo nodo.

Como ya dijimos anteriormente los usuarios interactúan con SLURM mediante un conjunto de comandos simples, los cuales son:

Comandos	Descripción
sbatch	Envía un script para su posterior ejecución
srun	Envía un trabajo para su ejecución
squeue	Informa sobre el estado de los trabajos en ejecución en orden de prioridad y luego de los trabajos pendientes también en orden de prioridad
sinfo	Muestra información sobre el estado de los nodos de cómputo
scancel	Finaliza trabajos que se encuentren en ejecución o pendientes

Tabla de conversión SGE/TORQUE - SLURM

Algunos comandos comunes en SGE y SLURM con sus respectivos equivalentes:

Comando	SGE/TORQUE	SLURM
Enviar un trabajo	qsub [script_file]	sbatch [script_file]
Cancelar un trabajo	qdel [job_id]	scancel [job_id]
Estado de un trabajo	qstat	squeue
Estado de los nodos	qhost	sinfo

Colas disponibles

Cola	Nodos	CPUs totales	GPUs totales	RAM total	Descripción
	4	384	4 Tesla T4	2 TB	Reservada para usuario del CAI. Cada usuario puede usar un total de 16 CPUs y tener como máximo 4 trabajos en ejecución simultáneamente.

Algunos de los comandos más usados

Con el comando **"squeue"** puede ver todos los trabajos en cola (tanto en ejecución ST=R como en espera ST=PD).

```
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$ squeue
JOBID PARTITION NAME USER ST TIME NODES NODELIST(REASON)
1334 all CC-S1-re marta R 1-18:06:02 1 nodo01
1337 all CC-S1-in marta R 1-17:47:18 1 nodo01
1351 all opt_DMS0 cris R 7:57:16 1 nodo01
1352 all opt_AcCN cris R 7:53:32 1 nodo01
1353 cai BR2B_M06 alain R 2:33 1 nodo06
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$
```

Con el comando **"squeue -u <usuario>"** puede ver los trabajos de un usuario en concreto.

```
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$ squeue -u alain
JOBID PARTITION NAME USER ST TIME NODES NODELIST(REASON)
1353 cai BR2B_M06 alain R 6:04 1 nodo06
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$
```

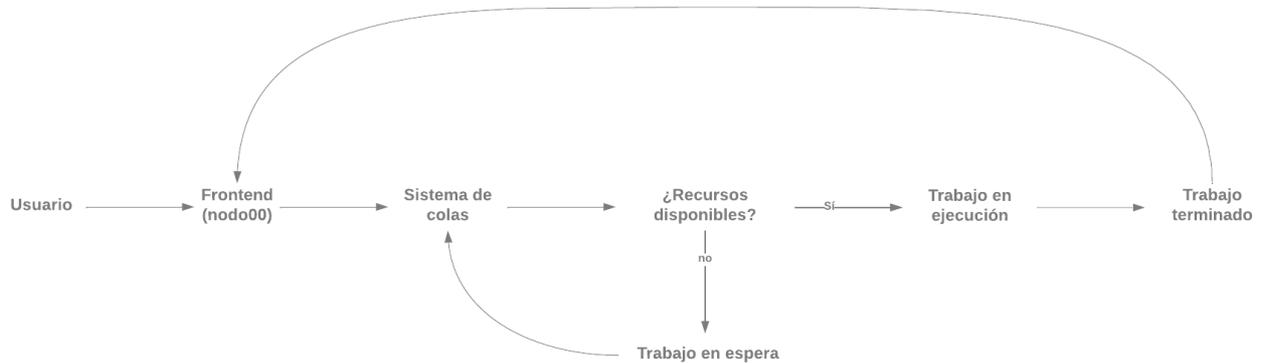
Con el comando **"scancel <JOB_ID>"** puede cancelar un trabajo. Para cancelar varios trabajos al mismo tiempo puede usar rangos: **"scancel {1000..1050}"** (cancela todos los trabajo desde el 1000 hasta el 1050, ambos incluidos).

```
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$ squeue -u alain
JOBID PARTITION NAME USER ST TIME NODES NODELIST(REASON)
1353 cai BR2B_M06 alain R 12:31 1 nodo06
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$ scancel 1353
```

Con el comando **"scancel -u <usuario>"** puede cancelar todos los trabajos de un usuario.

```
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$ squeue -u alain
JOBID PARTITION NAME USER ST TIME NODES NODELIST(REASON)
1353 cai BR2B_M06 alain R 19:50 1 nodo06
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$ scancel -u alain
```

6. DIAGRAMA DE FLUJO



El usuario se conecta al Frontend (nodo00)



Envía un trabajo (cálculo) al Sistema de colas



El Sistema de colas envía el trabajo a la cola predeterminada



Si existen recursos disponibles (memoria, procesadores, etc.), el Sistema de colas asigna el trabajo a uno de los nodos de cómputo disponible



Si no existen recursos disponibles, el Sistema de colas pone en espera el trabajo hasta que los recursos se liberen



Una vez asignado el trabajo a un nodo de cómputo, se empieza a ejecutar el cálculo en la "scratch" local del nodo de cómputo



Cuando finalice el trabajo, los ficheros de salida serán copiados desde la "scratch" local del nodo de cómputo a su directorio de trabajo "home" en el Frontend (nodo00)

7. RECURSOS SOFTWARE

El clúster dispone de una serie de recursos como los que se describen a continuación:

Compiladores: Intel Parallel Studio XE, PGI Community Edition, GNU Compiler Collection y NVIDIA Cuda.

MPI: Intelmpi, OpenMPI.

Librerías: atlas, boost, fftw, hdf5, hypre, metis, mkl, openblas, scalapack, clapack, nfft y plumed.

Programas: Gaussian16

8. PROGRAMAS

8.1 Gaussian 16

Gaussian 16 es la última versión de la serie Gaussian de programas de estructura electrónica, utilizada por químicos, ingenieros químicos, bioquímicos, físicos y otros científicos de todo el mundo.

Como se comentó anteriormente, cada programa dispone de su propio [lanzador](#) para facilitar el uso de este y asegurar un correcto funcionamiento. En el caso de Gaussian16, el nombre del lanzador es "**launch_g16**", solo debe indicar al "launcher" el fichero de entrada de Gaussian y automáticamente este se encargará de enviar el cálculo al sistema de colas que a su vez se encarga de distribuir los trabajos entre los distintos nodos de cómputo.

Ejemplo:

Cree un nuevo directorio y dentro cree el fichero de entrada con la extensión ".com"

En este caso se ha creado un nuevo directorio llamado "BR2B_M062X_opt" y dentro de este directorio se creó el fichero de entrada para Gaussian con el mismo nombre y la extensión ".com"

```
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$ pwd
/home/alain/BR2B_M062X_opt
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$ ls
BR2B_M062X_opt.com
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$
```

Contenido del fichero de ejemplo "BR2B_M062X_opt.com"

```
%chk=BR2B_M062X_opt.chk
```

```
%mem=4000Mb
```

```
%nproc=4
```

```
#P UM062X/6-31G* opt
```

```
No title specified
```

```
0 3
```

```
6 -0.954456 -0.757314 1.455456
6 -0.204673 -0.596263 0.118105
8 0.156119 -1.824212 -0.387791
6 -1.105891 0.014887 -0.971937
6 1.041807 0.330560 0.184343
6 1.185372 1.260425 1.135182
1 -1.360680 0.185299 1.832050
1 -1.781478 -1.457975 1.309781
1 -0.869705 -0.259223 -1.994409
6 -1.997507 1.175422 -0.683243
6 2.071071 0.123992 -0.898813
1 2.057466 1.909826 1.147123
1 0.468362 1.409680 1.935518
1 -2.467875 1.531695 -1.605027
1 -0.277440 -1.167288 2.210773
1 -2.800115 0.920617 0.023457
1 -1.443657 2.019067 -0.241235
1 1.621590 0.165716 -1.897689
1 2.538909 -0.862754 -0.811788
1 2.851341 0.888785 -0.840782
```

Para lanzar el cálculo escriba el siguiente comando (estando en el mismo directorio donde creó el fichero de entrada):

```
launch_g16 "fichero_de_entrada.com"
```

```
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$ launch_g16 BR2B_M062X_opt.com
dos2unix: convirtiendo archivo BR2B_M062X_opt.com a formato Unix...

Launching calculations using checkpoint file BR2B_M062X_opt.chk

Submitted batch job 1883 ← JOB_ID
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$
```

Automáticamente el lanzador se encargará de enviar su cálculo al sistema de colas para ser procesado por un nodo de cómputo, en el caso de que todos los nodos de cómputo estén ocupados o usted haya excedido el límite de uso de sus recursos, el sistema de colas pondrá su trabajo en espera "ST=PD (pending)" hasta que los recursos vuelvan a estar disponibles.

Para cada trabajo (cálculo) que un usuario envíe al sistema de colas, recibirá un "JOB_ID" (es un número incremental que identifica de forma única cada trabajo). Posteriormente, puede utilizar este identificador para obtener información sobre el estado de su trabajo con el comando "squeue" o para cancelar el trabajo con el comando "scancel <JOB_ID>".

```
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$ squeue -u alain
JOBID PARTITION NAME USER ST TIME CPUS NODELIST(REASON)
1883 cai BR2B_M06 alain R 2:10 4 nodo06
```

Para comprobar que su cálculo se está ejecutando correctamente debe conectarse vía ssh al nodo de cómputo donde se está ejecutando el trabajo y acceder a su "scratch" local para verificar los ficheros de salida.

```
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$ squeue -u alain
JOBID PARTITION NAME USER ST TIME CPUS NODELIST(REASON)
1883 cai BR2B_M06 alain R 2:10 4 nodo06
[alain@nodo00 BR2B_M062X_opt]$ ssh nodo06
Last login: Fri Jan 12 09:55:51 2024 from 192.168.2.10
[alain@nodo06 ~]$ cd /scratch/job.1883.alain/
[alain@nodo06 job.1883.alain]$ ll
total 21056
-rw-r--r-- 1 alain users 2932736 ene 12 10:02 BR2B_M062X_opt.chk
-rw-r--r-- 1 alain users 972 ene 12 09:58 BR2B_M062X_opt.com
-rw-r--r-- 1 alain users 336202 ene 12 10:02 BR2B_M062X_opt.log
-rw-r--r-- 1 alain users 975 ene 12 09:58 Gau-37457.inp
-rw-r--r-- 1 alain users 0 ene 12 09:58 Gau-37458.d2e
-rw-r--r-- 1 alain users 0 ene 12 09:58 Gau-37458.int
-rw-r--r-- 1 alain users 19939328 ene 12 10:02 Gau-37458.rwf
-rw-r--r-- 1 alain users 524288 ene 12 10:02 Gau-37458.skr
```

Cuando el cálculo finalice, los ficheros de salida (no temporales) serán copiados al directorio inicial de trabajo.