

ACARUS

CAR



Responsable :

María del Carmen Heras Sánchez

Asesores Técnicos :

Daniel Mendoza Camacho

Yessica Vidal Quintanar

Día 5:

- ✓ **Practicas de Ejecución de Software**

Cluster Choya

Geany

Es un editor de texto pequeño y ligero con características básicas de entorno de desarrollo integrado (IDE). Utiliza librerías GTK para su funcionamiento. Está disponible para distintos sistemas operativos, como GNU/Linux, Mac OS X, BSD, Solaris y Microsoft Windows. Es distribuido como software libre bajo la Licencia Pública General de GNU.

Características:

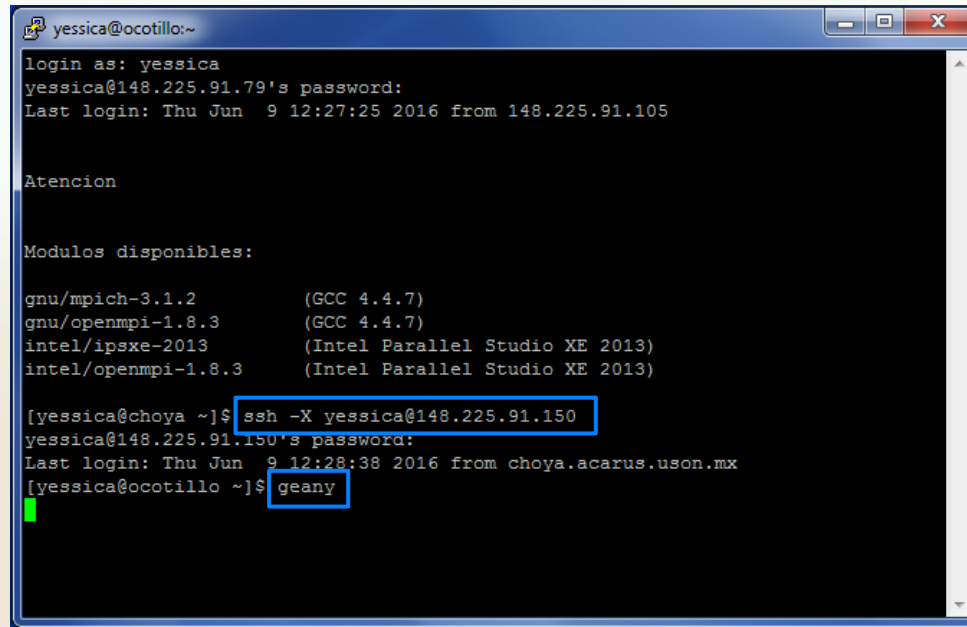
Resaltado de sintaxis.	Plegado de código.
Autocompletado.	Cierre automático de etiquetas XML y HTML.
Muestra de consejos.	Muchos tipos de archivos soportados tales como : C, Fortran, Java, PHP, Python, Perl, Pascal , y más
Listas de símbolos.	Código de navegación.
Fácil gestión de proyectos.	Construir un sistema (conjunto de ejecuciones) para compilar y ejecutar el código
Soporte para plugins	

Emulación de ventanas ssh -X desde Linux

1. Ejecutar la instrucción

```
ssh -X usuario@ip_del_servidor
```


2. Ejecutar algún programa con interfaz gráfica como geany



```
yessica@ocotillo:~  
login as: yessica  
yessica@148.225.91.79's password:  
Last login: Thu Jun  9 12:27:25 2016 from 148.225.91.105  
  
Atencion  
  
Modulos disponibles:  
  
gnu/mpich-3.1.2      (GCC 4.4.7)  
gnu/openmpi-1.8.3   (GCC 4.4.7)  
intel/ipsxe-2013    (Intel Parallel Studio XE 2013)  
intel/openmpi-1.8.3 (Intel Parallel Studio XE 2013)  
  
[yessica@choya ~]$ ssh -X yessica@148.225.91.150  
yessica@148.225.91.150's password:  
Last login: Thu Jun  9 12:28:38 2016 from choya.acarus.uson.mx  
[yessica@ocotillo ~]$ geany
```

Emulación de ventanas VcXsrv

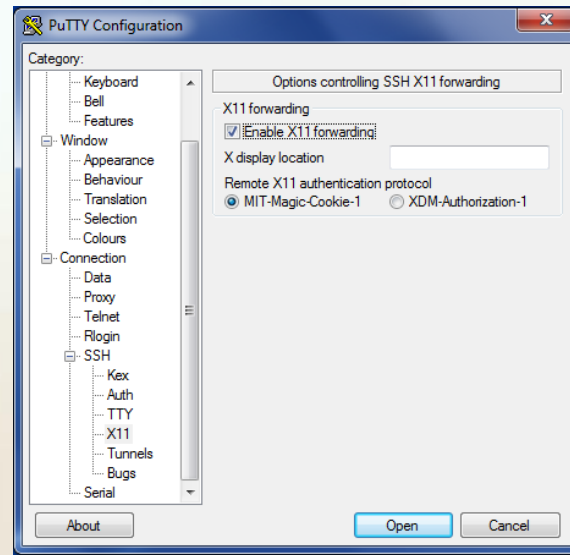
1. Inicializar VcXsrv

Queda en segundo plano 

2. Abrir PuTTY 

3. Habilitar el reenvío de ventanas X11

Connection → SSH → X11 → Enable X11 Forwarding



4. Hacer login a nuestra cuenta

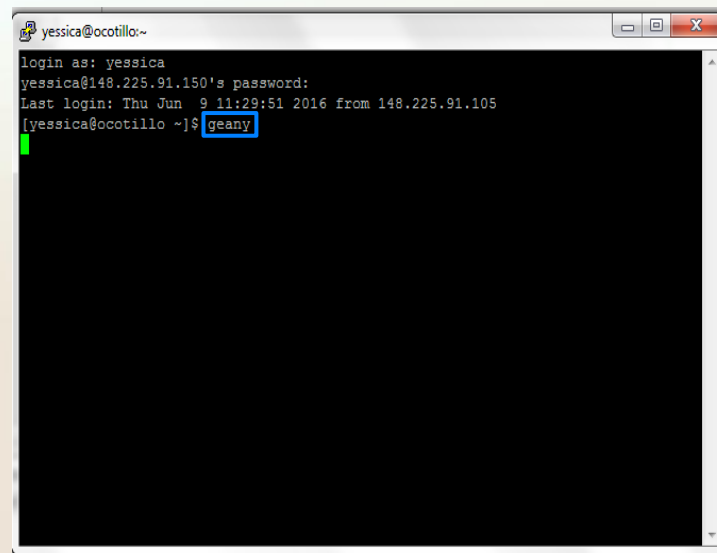
Descargar :

<http://acarus2.uson.mx/descargas>

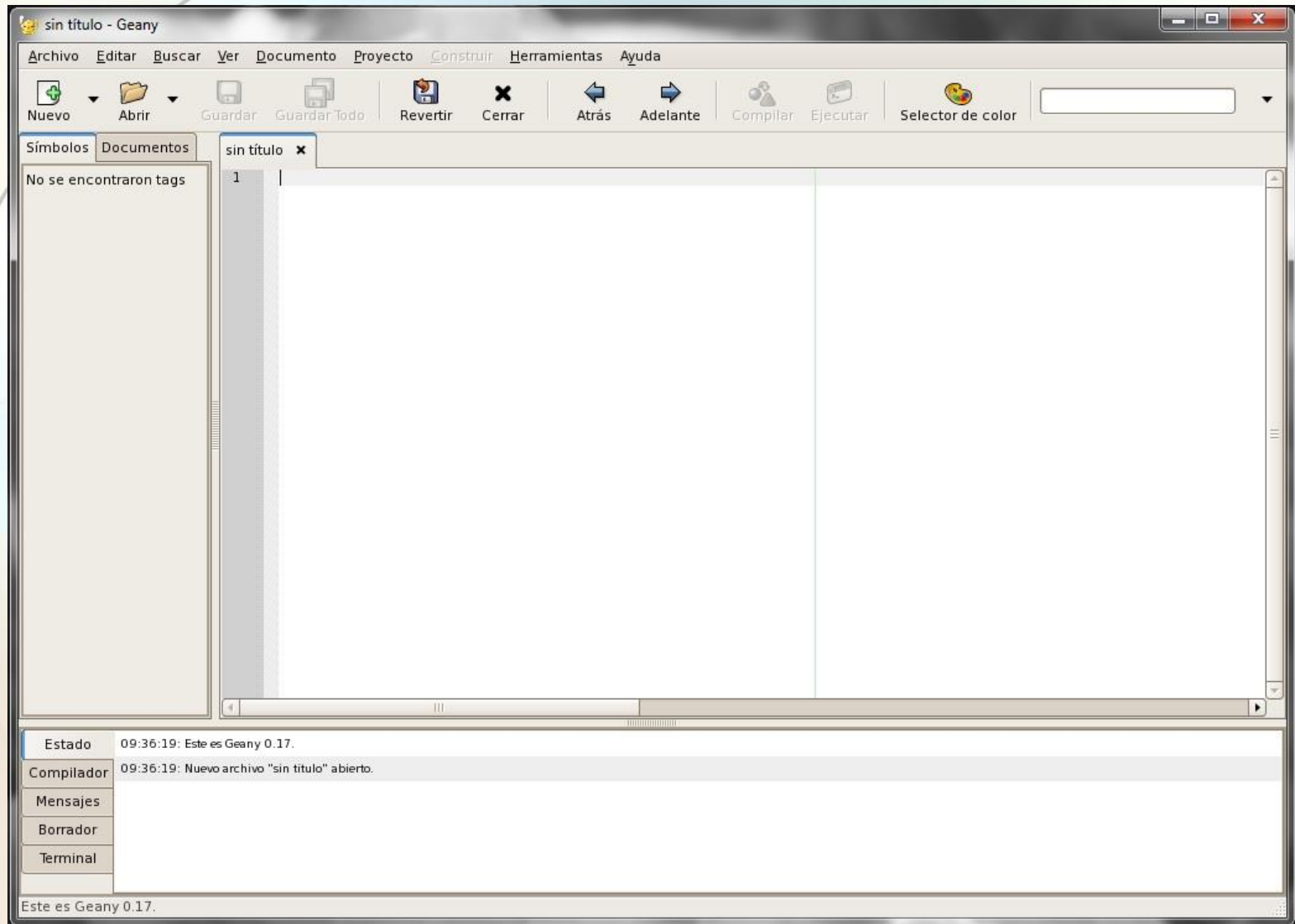
- Cargar los módulos PARALELO C

```
module load gnu/mpich-3.1.2  
module load parallel_studio-2013
```

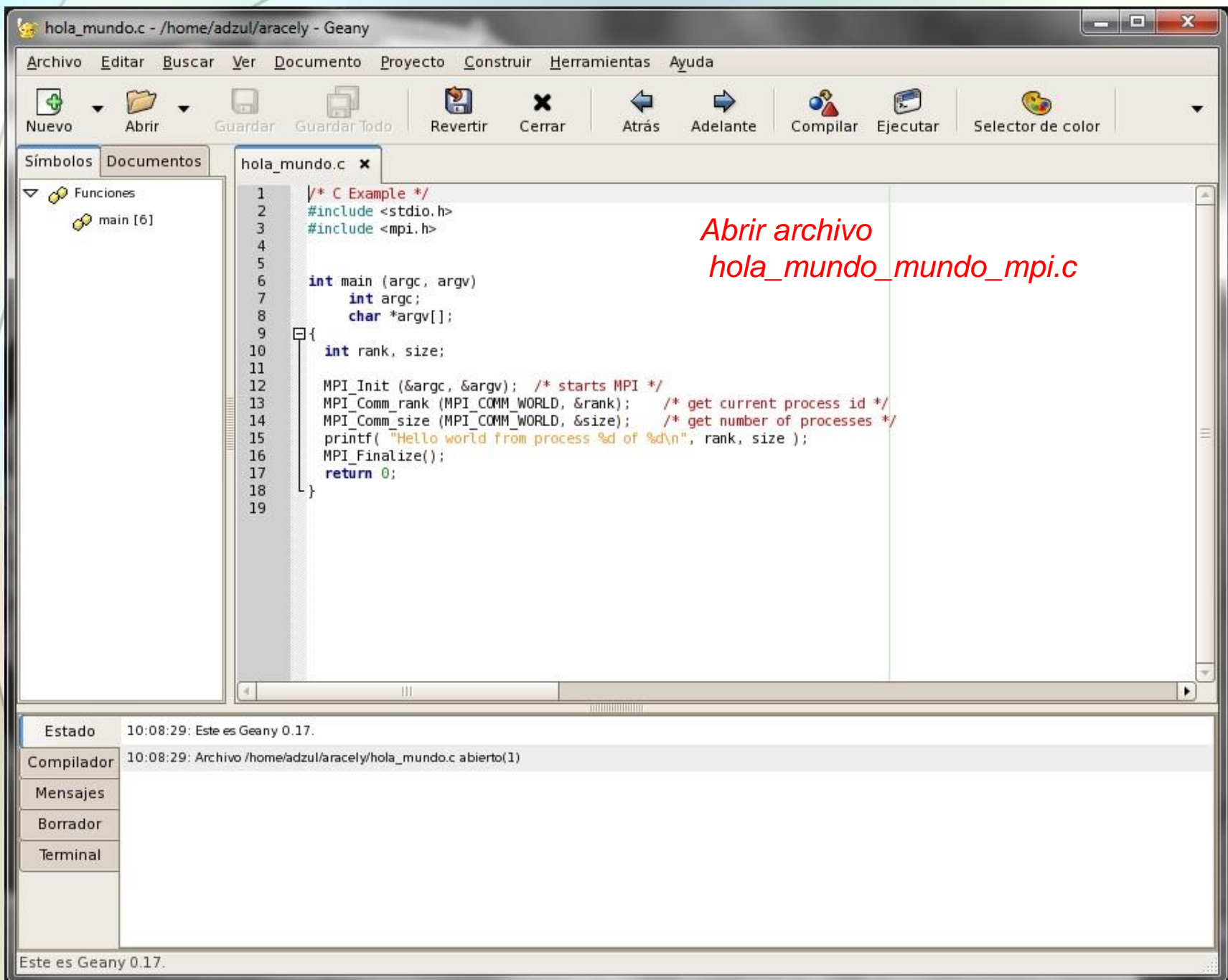
- Para ejecutar es con la instrucción:
geany

A terminal window titled 'yessica@ocotillo:~' showing a login sequence. The text in the terminal is: 'login as: yessica', 'yessica@148.225.91.150's password:', 'Last login: Thu Jun 9 11:29:51 2016 from 148.225.91.105', and '[yessica@ocotillo ~]\$ geany'. The word 'geany' is highlighted with a blue selection box. A green cursor is visible on the line following the command.

```
yessica@ocotillo:~  
login as: yessica  
yessica@148.225.91.150's password:  
Last login: Thu Jun 9 11:29:51 2016 from 148.225.91.105  
[yessica@ocotillo ~]$ geany
```



Abrir el programa hola_mundo.c



hola_mundo_mpi.c

```
#include <stdio.h>
#include <mpi.h>

int main (argc, argv)
    int argc;
    char *argv[];
{
    int rank, size;

    MPI_Init (&argc, &argv);
    MPI_Comm_rank (MPI_COMM_WORLD, &rank);
    MPI_Comm_size (MPI_COMM_WORLD, &size);
    printf( "Hola Mundo %d of %d\n", rank, size );
    MPI_Finalize();
    return 0;
}
```

Menú **Construir** opción Selecciona inclusiones y Argumentos

The screenshot shows an IDE window titled 'hola_mundo_mpi.c - /home/yessica/curso2016 - Geany@choya'. The menu bar includes 'Archivo', 'Editar', 'Buscar', 'Ver', 'Documento', 'Proyecto', 'Construir', 'Herramientas', and 'Ayuda'. The toolbar contains icons for 'Nuevo', 'Abrir', 'Guardar', 'Guardar todo', 'Revertir', 'Cerrar', 'Atrás', 'Adelante', 'Compilar', and 'Construir'. The 'Construir' menu is open, showing options: 'Construir', 'Compilar todo', 'Compilar objetivo personalizado...', 'Compilar objeto', and 'Establecer comandos de construcción'. The main editor displays the following C code:

```
1 #include <stdio.h>
2 #include <mpi.h>
3
4 int main (argc, argv)
5     int argc;
6     char *argv[];
7 {
8     int rank, size;
9
10    MPI_Init (&argc, &argv);
11    MPI_Comm_rank (MPI_COMM_WORLD, &rank);
12    MPI_Comm_size (MPI_COMM_WORLD, &size);
13    printf( "Hola Mundo %d of %d\n", rank, size );
14    MPI_Finalize();
15    return 0;
16 }
17
```

The 'Símbolos' pane on the left shows 'Funciones' and 'main [4]'. The 'Estado' pane at the bottom shows a compiler error: 'make (en el directorio: /home/yessica/curso2016) Ha fallado la compilación. make: *** No se especificó ningún objetivo y no se encontró ningún makefile. Alto.' The status bar at the bottom indicates 'línea: 16 / 17 col: 1 sel: 0 INS TAB mode: Unix (LF) codificación: UTF-8 tipo de archivo: C ámbito: main'.

Ingresar en compilar :
mpicc hola_mundo_mpi.c
Ingresar en ejecución:
mpirun -np 40 ./a.out

hola_mundo_mpi.c - /home/yessica/curso2016 - Geany@choya

Archivo Editar Buscar Ver Documento Proyecto Construir Herramientas Ayuda

Nuevo Abrir Guardar Guardar todo Revertir Cerrar Atrás Adelante **Compilar** Construir

Símbolos hola_mundo_mpi.c x

Funciones
main [4]

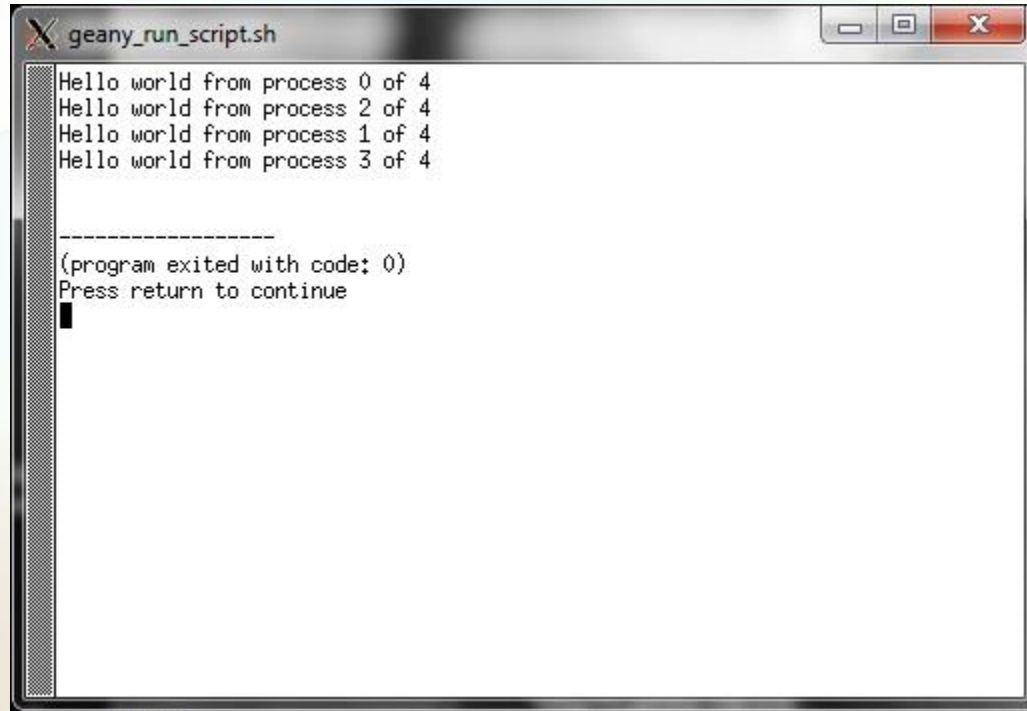
```
1 #include <stdio.h>
2 #include <mpi.h>
3
4 int main (argc, argv)
5     int argc;
6     char *argv[];
7 {
8     int rank, size;
9
10    MPI_Init (&argc, &argv);
11    MPI_Comm_rank (MPI_COMM_WORLD, &rank);
12    MPI_Comm_size (MPI_COMM_WORLD, &size);
13    printf( "Hola Mundo %d of %d\n", rank, size );
14    MPI_Finalize();
15    return 0;
16 }
17
```

Ejecutar F5

Estado
make (en el directorio: /home/yessica/curso2016)
Ha fallado la compilación.
make: *** No se especificó ningún objetivo y no se encontró ningún makefile. Alto.

Compilador

línea: 16 / 17 col: 1 sel: 0 INS TAB mode: Unix (LF) codificación: UTF-8 tipo de archivo: C ámbito: main

A terminal window titled "geany_run_script.sh" with standard window controls (minimize, maximize, close). The terminal displays the output of a script that runs four parallel processes. Each process prints "Hello world from process X of 4" where X is 0, 2, 1, and 3 respectively. The output is not in sequential order. After the last line, there is a horizontal dashed line, followed by the text "(program exited with code: 0)" and "Press return to continue" with a cursor.

```
geany_run_script.sh
Hello world from process 0 of 4
Hello world from process 2 of 4
Hello world from process 1 of 4
Hello world from process 3 of 4

-----
(program exited with code: 0)
Press return to continue
█
```

script_mpi.pbs

```
#!/bin/bash
```

```
#SBATCH --nodes=1
```

```
#SBATCH --ntasks-per-node=4
```

```
#SBATCH --partition=batch
```

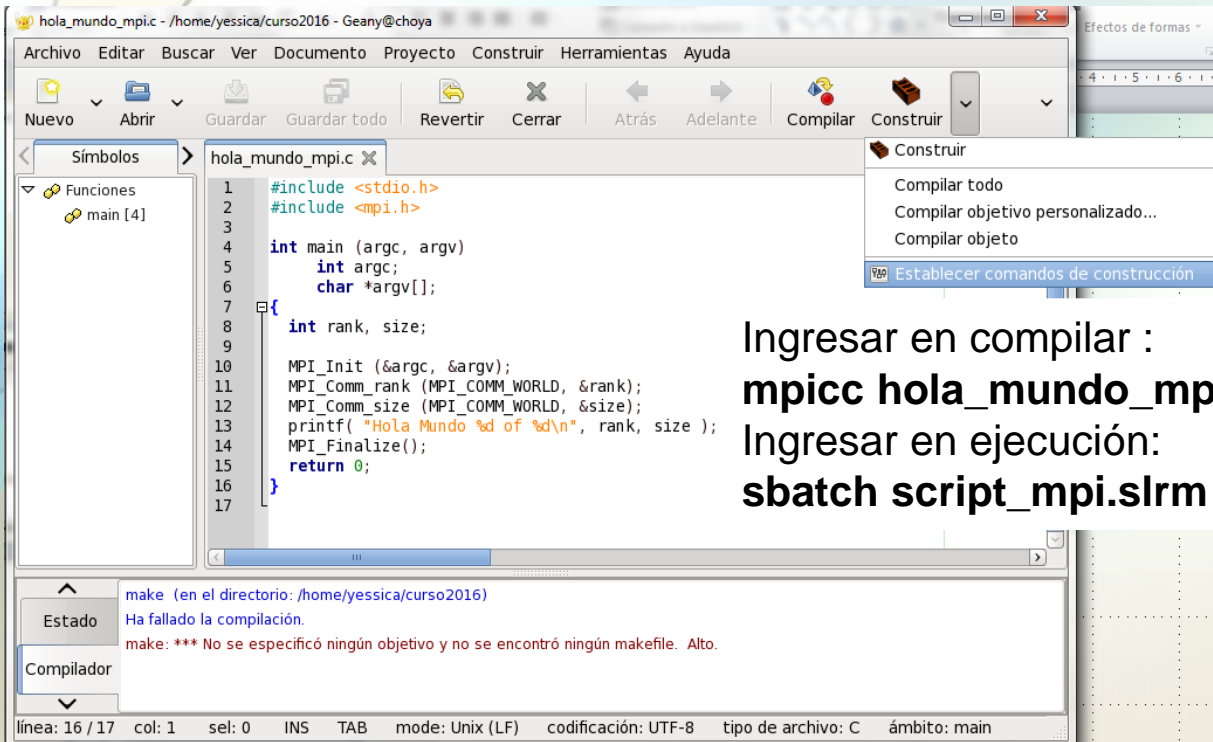
```
#SBATCH --time=00:30:00
```

```
#SBATCH --job-name=mpi
```

```
module load gnu/mpich-3.1.2
```

```
mpirun ./hola_mundo_mpi
```

Menú **Construir** opción Selecciona inclusiones y Argumentos



The screenshot shows an IDE window titled 'hola_mundo_mpi.c - /home/yessica/curso2016 - Geany@choya'. The menu bar includes 'Archivo', 'Editar', 'Buscar', 'Ver', 'Documento', 'Proyecto', 'Construir', 'Herramientas', and 'Ayuda'. The toolbar contains icons for 'Nuevo', 'Abrir', 'Guardar', 'Guardar todo', 'Revertir', 'Cerrar', 'Atrás', 'Adelante', 'Compilar', and 'Construir'. The 'Construir' menu is open, showing options: 'Construir', 'Compilar todo', 'Compilar objetivo personalizado...', 'Compilar objeto', and 'Establecer comandos de construcción'. The main editor displays the following C code:

```
1 #include <stdio.h>
2 #include <mpi.h>
3
4 int main (argc, argv)
5     int argc;
6     char *argv[];
7 {
8     int rank, size;
9
10    MPI_Init (&argc, &argv);
11    MPI_Comm_rank (MPI_COMM_WORLD, &rank);
12    MPI_Comm_size (MPI_COMM_WORLD, &size);
13    printf( "Hola Mundo %d of %d\n", rank, size );
14    MPI_Finalize();
15    return 0;
16 }
17
```

At the bottom, a terminal window shows the following error message:

```
make (en el directorio: /home/yessica/curso2016)
Estado Ha fallado la compilación.
make: *** No se especificó ningún objetivo y no se encontró ningún makefile. Alto.
```

The status bar at the bottom indicates: línea: 16 / 17 col: 1 sel: 0 INS TAB mode: Unix (LF) codificación: UTF-8 tipo de archivo: C ámbito: main

Ingresar en compilar :
mpicc hola_mundo_mpi.c -o hola_mundo_mpi-c
Ingresar en ejecución:
sbatch script_mpi.slrn

hola_mundo_mpi.c - /home/yessica/curso2016 - Geany@choya

Archivo Editar Buscar Ver Documento Proyecto Construir Herramientas Ayuda

Nuevo Abrir Guardar Guardar todo Revertir Cerrar Atrás Adelante **Compilar** Construir

Símbolos hola_mundo_mpi.c x

Funciones
main [4]

```
1 #include <stdio.h>
2 #include <mpi.h>
3
4 int main (argc, argv)
5     int argc;
6     char *argv[];
7 {
8     int rank, size;
9
10    MPI_Init (&argc, &argv);
11    MPI_Comm_rank (MPI_COMM_WORLD, &rank);
12    MPI_Comm_size (MPI_COMM_WORLD, &size);
13    printf( "Hola Mundo %d of %d\n", rank, size );
14    MPI_Finalize();
15    return 0;
16 }
17
```

Ejecutar F5

Estado
make (en el directorio: /home/yessica/curso2016)
Ha fallado la compilación.
make: *** No se especificó ningún objetivo y no se encontró ningún makefile. Alto.

Compilador

línea: 16 / 17 col: 1 sel: 0 INS TAB mode: Unix (LF) codificación: UTF-8 tipo de archivo: C ámbito: main


```
geany_run_script.sh@choya
Submitted batch job 54

-----
(program exited with code: 0)
Press return to continue
█
```

squeue -na cat slurm-jobid

The image shows a Geany IDE window titled "hola_mundo.c - /home/adzul/aracely - Geany". The menu bar includes Archivo, Editar, Buscar, Ver, Documento, Proyecto, Construir, Herramientas, and Ayuda. The toolbar contains icons for Nuevo, Abrir, Guardar, Guardar todo, Revertir, Cerrar, Abrir, Adelante, Compilar, Ejecutar, and Selector de color. The left sidebar shows "Simbolos" and "Documentos" tabs, with "Funciones" expanded to show "main [6]". The main editor displays the following C code:

```
1  /* C Example */
2  #include <stdio.h>
3  #include <mpi.h>
4
5
6  int main (argc, argv)
7      int argc;
8      char *argv[];
9  {
10     int rank, size;
11
12     MPI_Init (&argc, &argv); /* starts MPI */
13     MPI_Comm_rank (MPI_COMM_WORLD, &rank); /* get current process id */
14     MPI_Comm_size (MPI_COMM_WORLD, &size); /* get number of processes */
15     printf( "Hello world from process %d of %d\n", rank, size );
16     MPI_Finalize();
17     return 0;
18 }
19
```

The bottom panel shows a terminal window with the following commands and output:

```
[adzul@master ~]$ qstat
[adzul@master ~]$ cat mpi_trabajo.o80
Hello world from process 3 of 4
Hello world from process 2 of 4
Hello world from process 1 of 4
Hello world from process 0 of 4
[adzul@master ~]$
```

The status bar at the bottom indicates: línea: 1 col: 0 sel: 0 INS TAB modo: Unix (LF) codificación: UTF-8 Tipo de archivo: C alcance: desconocido

Cluster

Ocotillo

Uso de Software en Ocotillo

- Nodos de Procesamiento CPU (Torque)
Colas: q128b, q128c, q128d, q256b y q512a (qsub)

Gaussian 09

`/tmp/curso2016/gaussian/gaussian.pbs`

Gromacs 5.0.4

`/tmp/curso2016/gromacs/gromacs.pbs`

NWChem 6.1.1 / NWCHem 6.6

`/tmp/curso2016/nwchem/nwchem.pbs`

NAMD 2.11

`/tmp/curso2016/namd/namd.pbs`

Quantum Espresso 5.0.2

`/tmp/curso2016/quantum/quantum.pbs`

`/tmp/curso2016/quantum/quantum-mpi.pbs`

Uso de Software en Ocotillo

- Nodos de Procesamiento GPU (Slurm)
Particion: gpu (sbatch)

CUDA 6.0 / 6.5 / 7.0 / 7.5

`/tmp/curso2016/cuda/cuda.slm`

Gromacs 5.0.4

`/tmp/curso2016/gromacs/gromacs.slm`

NAMD 2.11

`/tmp/curso2016/namd/namd-multicore-gpu.slm`

Uso de Software en Ocotillo

- Nodos de Visualizacion (Slurm)
Particion: visualizacion (qsub -I)
- TurboVNC
- Ansys 17
- Matlab

Uso de Software en Ocotillo

- Para compilar

Nodos CPU (AMD)

```
qsub -l -l nodes=1:ppn=1
```

Cargar módulo

Compilar

Cerrar sesión

Nodos de Visualización (Intel)

```
srus -pty --partition visualización -n 1 /bin/bash -i
```

Nodos GPU (AMD, CUDA)

```
srus --pty --partition gpu -n 1 /bin/bash -i
```