## Capítulo 4

# Implementación y Evaluación

### 4.1. Descripción de la infraestructura

La figura muestra de forma esquemática los elementos que integran el ambiente de grid bajo el cual se instaló y configuró el portal OGCE versión 2.5:



Figura 4.1: Elementos con los que interactúa un portal grid

El portal grid OGCE versión 2.5 se encuentra instalado en una máquina virtual del Departamento de Supercómputo ogce1.super.unam.mx, el sistema operativo de la

máquina virtual es Fedora 8, cuenta con un procesador Intel Xeon a 1.8 GHz y tiene de memoria RAM 512 MB.

La parte del middleware de grid correspondiente al servidor de manejo de certificados Myproxy fue instalado en la máquina vodka.super.unam.mx, cuenta con sistema operativo Ubuntu 8, tiene un procesador Intel Pentium 4 a 2.26 GHz y tiene de memoria RAM 756 MB.

Los restantes partes del middleware de Grid se instalaron en un nodo de login de la Supercomputadora y la versión del middleware es GT5. Este nodo fue dado de alta en el DNS con el nombre de balam-ln2.super.unam.mx con el fin de poder acceder a este nodo mediante los servicios del middleware. Los cuales son:

- gridftp
- gram5

Los recursos de *fabric*, son los nodos de cálculo de la Supercomputadora Kanbalam. Los nodos de cálculo son 337 nodos de cálculo regulares, cada nodo con dos procesadores AMD Opteron Dual Core con 8 GB de RAM y 5 nodos de cálculo especiales con dos procesadores AMD Opteron Dual Core por nodo y 64 GB de RAM. El manejo de estos recursos se lleva a cabo mediante el software de administración de recursos LSF.



Figura 4.2: Arquitectura de un cluster LSF

### o IIIIII o O IIIIII o O IIIIII o KanBalam

# Procesamiento y memoria de KanBalam



### 4.2. Configuración

### 4.2.1. Configuración del Servidor de MyProxy

A continuación se muestran los pasos para la instalación del servidor de Myproxy en la máquina vodka.super.unam.mx:

- Como root, crear un usuario llamado globus % adduser globus
- 2. Crear un directorio, en el cual se instalará GT5.

%mkdir /usr/local/globus-5.0/

3. Cambiar de dueño y de grupo al anterior directorio.

% chown globus: globus /usr/local/globus-5.0/

- 4. Como globus, agregar la variable de ambiente GLOBUS\_LOCATION
   % export GLOBUS\_LOCATION=/usr/local/globus-5.0/
- 5. Configurar y compilar myproxy:
  - %./configure –prefix=\$GLOBUS\_LOCATION%make g<br/>si-myproxy
- 6. Agregar el contenido de \$GLOBUS\_LOCATION/share/myproxy/etc.services en /etc/services
- 7. Copiar el archivo \$GLOBUS\_LOCATION/share/myproxy/etc.xinetd.myproxy a /etc/xinet.d/myproxy y modificar las variables de ambiente

 $server = /usr/local/globus-5.0/sbin/myproxy-server env = GLOBUS\_LOCATION=/usr/local/globus-5.0 LD\_LIBRARY\_PATH=/usr/local/globus-5.0/lib$ 

8. Como root, reiniciar el demonio de xinetd

%kill -HUP pid\_de\_xinetd

### 4.3. Configuración del Portal Grid

### 4.3.1. Instalación de Java

Para el portal Grid, es necesario contar con una versión de Java superior o igual a la 1.5.

En nuestra implementación se instaló Java 1.6.6 [22], debido a que no se encontró ningún paquete que configurará la última versión del Ambiente de Ejecución de de Java (*Java Runtime Environment*, JRE) de Sun y mantuviera al mismo tiempo los JREs que proporciona el Sistema Operativo.

- 1. Instalación del Java Devolopment Kit, JDK.
  - a) Entrar a la página de Sun: http://java.sun.com/ o de http://www.oracle.com/technetwork/java/index.html
  - b) Dar click en Java SE en la sección de Descargas de Software, Software Downloads
  - c) Dar click en *Previous Releases*
  - d) Dar click en Archived Releases
  - e) De la sección Java 2 Platform Standard Edition (J2SE), elegir de las opciones de JDK/JRE 6 la actualización 6 (6 Update 6) y dar click en Go.
  - $f)\,$  Dar click en Download JDK
  - g) Seleccionar en Plataforma Linux, aceptar la licencia y dar click en continuar.
  - h)Dar click en jdk-6u<br/>6-linux-i 586-rpm.<br/>bin y guardarlo en Disco Duro.
  - i) Agregar permisos de ejecución al archivo descargado. ch<br/>mod $+{\rm x}$ jdk-6u6-linux-i586-rpm.<br/>bin
  - *j*) Como root, ejecutar el archivo ./jdk-6u6-linux-i586-rpm.bin
- 2. El paso anterior instalará el JDK y el JRE pero sólo configurará adecuadamente al JDK; para configurar adecuadamente el JRE, es necesario descargar el paquete jpackage[23]:
  - a) Entrar a la siguiente dirección: ftp://jpackage.hmdc.harvard.edu/JPackage/1.7/generic/RPMS.non-free/

- b) Descargar el paquete compatible con la versión de Java instalada. En nuestro caso, se descargó la versión 1.6.6: java-1.6.0-sun-compat-1.6.0.06-1jpp.i586.rpm
- c) Instalar el paquete jpackage[24] rpm -Uvh java-1.6.0-sun-compat-1.6.0.06-1jpp.i586.rpm
- 3. Configuración del JRE

Esta configuración funciona en distribuciones de Linux basadas en RPMs (Mandrake, Red Hat, SuSE, etc).

a) Configurar el JRE con el que deseamos trabajar, con el siguiente comando: alternatives –config java

[root@ogce3 ~]‡	# alternatives	config java
-----------------	----------------	-------------

There are 3 programs which provide 'java'.

S	election	Command
*+	1 2	/usr/lib/jvm/jre-1.7.0-icedtea/bin/java /usr/lib/jvm/jre-1.5.0-gcj/bin/java
	3	/usr/lib/jvm/jre-1.6.0-sun/bin/java

b)Seleccionar el número que corresponda a la versión 1.6. En nuestro caso, tecleamos 3.

#### 4.3.2. Descarga del Portal OGCE

1. Entrar a la página de OGCE

http://www.collab-ogce.org/ogce/index.php/Main\_Page

- 2. Dar click en OGCE Portal en la sección de componentes descargables.
- 3. Ir a la sección *Portal Toolkit 2.5 Download* y descargar el archivo compactado y comprimido:

ogce-portal-only-release-2.5.tar.gz

### 4.3.3. Instalación del Portal OGCE

1. Descomprimir y descompactar el archivo que contiene el portal en el directorio \$HOME de una cuenta dedicada al servicio del portal exclusivamente, en nuestro caso la cuenta dedicada se llama irving.

%tar -zxvf ogce-portal-only-2.5-release.tar.gz

2. Hacer una liga al directorio anteriormente descomprimido.

%ln -<br/>s ogce-portal-only-2.5-release ogce-portal-only

3. Cambiarse al directorio ogce-portal-only y descompactar el archivo maven-2.0.7bin.tar.gz.

%tar -zxvf maven-2.0.7-bin.tar.gz

- 4. Agregar las siguientes variables de ambiente. Para hacer que esta configuración sea permanente en una cuenta de usuario dedidicada, agregar las siguientes líneas al archivo \$HOME/.bashrc
  - a) export JAVA\_HOME=/usr/lib/jvm/jre-1.6.0-sun
  - b) PATH=\$HOME/ogce-portal-only/maven-2.0.7/bin:\$PATH

La primer línea actualiza la variable de ambiente de Java.

La siguiente línea agrega al PATH los programas que utiliza el administrador de proyectos Apache Maven.

- 5. Editar las propiedades (properties) del archivo pom.xml
  - a) Cambiar <portal.server.ip/> por la dirección IP en que se va a encontrar el portal grid.
     <portal.server.ip>132.248.202.135</portal.server.ip>
- 6. Para instalar el portal, ejecutar el siguiente comando: mvn clean install
- 7. Finalizado el proceso de compilación del portal, iniciar el servidor Apache Tomcat mediante el comando:

./startup-tomcat.sh

- Accesar a la página web del portal: http://132.248.202.135:8080/gridsphere
- 9. Y crear la cuenta de administrador del portal introduciendo la información solicitada por el portal como nombre de usuario, correo electrónico, contraseña, etc.

### 4.3.4. Configuración del Firewall

En caso de que el portal esté detrás de un firewall, realizar el siguiente procedimiento:

- 1. Como root, editar el archivo /etc/sysconfig/iptables
- 2. Agregar la siguiente línea, antes de cualquier otra que contenga un *REJECT*-A RH-Firewall-1-INPUT -m state –state NEW -p tcp -m tcp –dport 8080 -j ACCEPT
- 3. Actualizar la nueva regla del Firewall /etc/init.d/iptables restart

### 4.3.5. Configuración del Portlet de Administración de Archivos

1. Estando en el directorio donde se instaló el portal "ogce-portal-only", parar el servidor Tomcat:

./shutdown-tomcat.sh

- 2. Editar el archivo "pom.xml"
  - a) Agregar los hosts "balam-ln2.supercomputo.unam.mx,vodka.super.unam.mx" entre las etiquetas <gridftp.host.names> y </gridftp.host.names>
- 3. Reconstruir el portlet de Administración de Archivos, *File Manager*, ejecutando el siguiente comando:

mvn clean install -f portlets/file-manager/pom.xml

4. Reiniciar el servidor Apache Tomcat:

./startup-tomcat.sh

### 4.3.6. Configuración del Portlet de Envío de Jobs

La configuración del Portlet de Envío de Jobs, gp<br/>—job—submission es similar a los pasos 1 y 4 de la sección<br/> 4.3.5

- 1. Editar el archivo "pom.xml"
  - a) Agregar el nuevo host "balam-ln2.supercomputo.unam.mx,vodka.super.unam.mx" entre las etiquetas <gram.host.names> y </gram.host.names>
- 2. Reconstruir el portlet, ejecutando el siguiente comando:

mvn clean install -f portlets/gp-job-submission/pom.xml

Debido a que el portlet de Envío de Jobs no presentaba ciertas características del lenguaje RSL del middleware y que son particulamente útiles en el uso de la Supercomputadora, como los parámetros de Queue y JobType fue necesario modificar parte del código fuente de este portlet:

A continuación se presentan las modificaciones realizadas:

En el archivo submit.jsp del directorio \$HOME/ogce-portal-only/portlets/gp-job-submission/ src/main/webapp/jsp se agregó lo siguiente:

En la clase GRAMJobSubmissionPortlet.java del directorio \$HOME/ogce-portal-only/portlets/gp-job-submission/src/main/java/edu/tacc/gridport/portlets/interactive se añadió lo siguiente:

```
jbean.setJobtype(request.getPreferences().getValue(handle + ".jobtype", null));
jbean.setJobtype(request.getPreferences().getValue(handle + ".queue", null));
```

```
req.getPreferences().setValue(handle + ".jobtype", currentJobBean.getJobtype());
req.getPreferences().setValue(handle + ".queue", currentJobBean.getQueue());
```

En la clase JobBean.java del directorio \$HOME/ogce-portal-only/portlets/gp-job-submission/ src/main/java/edu/tacc/gridport/portlets/interactive/beans se agregó:

```
private String jobtype;
     private String queue;
       /**
*
           * Get the jobtype associated with the job
*
                              * Creturn Returns the jobtype.
*
*
                                        */
       public String getJobtype() {
               return jobtype;
       }
       /**
           * Set jobtype to be associated with the job
*
*
                              * Oparam jobtype The jobtype to set.
*
                                        */
*
       public void setJobtype(String jobtype) {
               this.jobtype = jobtype;
       }
       /**
*
              * Get the queue associated with the job
                         *
*
                                    * Creturn Returns the queue.
*
                                              */
       public String getQueue() {
               return queue;
```

```
}
/**
* * * Set queue to be associated with the job
* * * * *
* * * * *
* * * * *
public void setQueue(String queue) {
    this.queue = queue;
}
```

 $En \ la \ clase \ GRAMJobManager.java \ del \ directorio \ \$HOME/ogce-portal-only/portlets/gp-job-submission/src/main/java/edu/tacc/gridport/portlets/interactive/helpers \ se \ agregó \ lo \ siguiente:$ 

```
String jobtype = req.getParameter("jobtype");
newJob.setJobtype(jobtype);
String queue = req.getParameter("queue");
newJob.setQueue(queue);
if (job.getJobtype() != null && !(job.getJobtype()).equals("")) {
    rslSb.append("(jobType=\"" + job.getJobtype() + "\")");
}
if (job.getQueue() != null && !(job.getQueue()).equals("")) {
    rslSb.append("(queue=\"" + job.getQueue() + "\")");
}
System.out.println("El rsl es: " + rsl);
```

Adicionalmente este portlet generaba un RSL incorrecto porque una vez dados los archivos de error y salida mediante el portal grid, el RSL agregaba otras líneas referentes a los mismos archivos. Este comportamiento no permitía almacenar nada en los archivos de error y de salida. Por lo anterior fue necesario comentar algunas líneas de la clase GRAMJobPreWS.java ubicada en el mismo directorio de la clase (GRAMJobManager.java) anterior:

```
//newRSL.append("(stdout=x-gass-cache://$(GLOBUS_GRAM_JOB_CONTACT)
stdout anExtraTag)");
//newRSL.append("(stderr=x-gass-cache://$(GLOBUS_GRAM_JOB_CONTACT)
stderr anExtraTag)");
```

Finalmente, se recompiló este portlet como se mostró en 4.3.6

### 4.3.7. Configuración de la CA

Para configurar la CA a utilizar, se deben solicitar a la CA: su certificado y sus políticas de firmado (*CA Signing policy*).

Para la configuración se deben seguir los siguientes pasos:

1. Copiar la información al directorio \$HOME/.globus/certificates de la cuenta dedicada a la implementación del portal.

2. Descomprimir la información

%cd \$HOME/.globus/certificates

%tar -zxvf vodka.ca.tar.gz

### 4.3.8. Creación de cuentas

- 1. Con cuenta de administrador del portal, entrar al portlet de administración (Administration).
- 2. Ingresar a la sección de usuarios (Users).
- 3. Y dar click en Crear nuevo usuario (*Create new user*)
- 4. Llenar los campos solicitados: nombre de usuario, nombre, correo electrónico, organización, tipo de cuenta, contraseña en el portal.

Open Grie	d Compu	ting Environ	ments	Welcome Irving Alvarez
Welcome Ad	ministration	jobsubmit-portlet	proxymanager-portlet	gp-job-submissio
Portlets Users	Groups Roles	s Layouts Messag	ing	
? '	Jser Account Manager			
Edit User In	formation			
LEAVE PASSWO		K TO KEEP		
EXISTING PASSI	ORD IF EDITING	AN EXISTING		
USER				
User Name:	[			
Full Name:				
Email Address:				
Organization:				
Roke In GridSphere:	USER ∫▼	l		
Disable account?				
Password:				
Confirm password:				

Figura 4.3: Administración de cuentas

### 4.3.9. Configuración de cuentas de usuario

Una vez conectado al portal grid, aparece el portlet de bienvenida, en este portlet el usuario del portal podra configurar su información personal, cambiar su contraseña y seleccionar los portlets a utilizar. Para seleccionar los portlets, ir a la sección de configurar membresía de grupo (*Configure group membership*) y marcar (dar un click) los siguientes portlets:

- file-manager
- gp-job-submission
- proxymanager-portlet

Y finalmente dar de alta los cambios, dar click en el botón de Save

			Profile Manager			
Edit Settings for Last Login Time User Name:	: Monday, December 6, 2010	) 5:34:17 PM EMail:	PST lirving@super.unam.mx	Locale:	💶 💥 English 🛛 🔻	1
Full Name:	Irving Carlos Alvarez				America/Kilox_IN	_
Organization:	UNAM				America/Lima	
Save				Timezone:	America/Louisville America/Maceio America/Managua	×
Update passwo	ord		- Configure group membersh	ip		Dala in Oneu
Enter original p	bassword:		Groups:	Condor-G	Group Description.	USEB
Password:			Condor-job-submission	Condor Jot	Submission Portlet	USER
Confirm passw	rord:		⊡ file-manager	Comprehe	nsive File Management Po	tlet USER
Save			□gfac	Generic Se	rvice Toolkit	USER
			gp-job-submission	Batch Job S	Submission Portlet	USER
			gpir-portlet	GPIR TGU	P Browser Portlet	USER

Figura 4.4: Configuración de cuenta de usuario

### 4.3.10. Configuración del Portlet de Manejo de Certificados Proxy

- 1. Entrar al portlet de Servidor de Manejo de Certificados Proxy, *ProxyManager-Portlet*
- 2. Dar click en el botón de Edit que se encuentra en la parte superior izquierda del portlet.
- 3. Cambiar el valor del Hostname por "vodka.super.unam.mx"
- 4. Poner el nombre de usuario en el servidor de Manejo de Certificados y dar el tiempo de vida del proxy o aceptar el default que es de 2 horas.
- 5. Por último actualizar estos parámetros en el portal, dar click en Customize.

Open Gri	d Computing	Environment	ts	Logout Welcome, Irving Carlos Alvarez
elcome file-	manager 🛛 gp-job-	submission <b>proxym</b>	anager-portlet	
oxy Manager F	Portlet			
Il out the par	ameters below an	ProxyMana d click 'Customize' to	oger Portlet	ttings for your MyProxy server
Il out the par • <b>Preference</b> Hostname:	ameters below an <b>s</b> vodka.super.una	ProxyMana d click 'Customize' to n.mx	nger Portlet	ttings for your MyProxy server:
Il out the par Preference Hostname: Port:	ameters below an s vodka.super.una 7512	ProxyMana d click 'Customize' to n.mx	nger Portlet	u ∟
Il out the par • <b>Preference</b> Hostname: Port: Username:	ameters below an s vodka.super.una 7512 irving	ProxyMana d click 'Customize' to n.mx	nger Portlet	ttings for your MyProxy server
ill out the par • <b>Preference</b> Hostname: Port: Username: Lifetime:	ameters below an s vodka.super.una 7512 irving 8 (hours)	ProxyMana d click 'Customize' to n.mx	nger Portlet	ttings for your MyProxy server

Figura 4.5: Configuración del Servidor de certificados

### 4.4. Pruebas de funcionamiento

### 4.4.1. Ingreso al Portal

Para ingresar al Portal Grid OGCE ingrese su nombre de usuario y contraseña.

🔄 🔿 🔻 🍫 🔕 🏠 👻 📑 http://ogce	1.super.unam.mx:8080/gridsphere/gridsphere	습 🗸 🔽 Google	_ ₽ ×
	nts	English 🔽	Search using Google
Welcome			
Home			
Login	Welcome to the OGCE Portal		
User Name irving Password **********	The OGCE portal combines portlets developed by the GridPort t Lab at Indiana University, and tools and portlets from the Sakai provided by a portal-compatible version of the Java COG Kit.	team at TACC and SDSU, the Extreme Lab Project. Grid access and high level program	, the Community Grids nming APIs are
Bemember my login	OGCE Portlets		
Login Forget your password?	<ul> <li>Grid Information - The Grid Information contains a G about grid resources that have been configured to re the TeraGrid GPIR service. However, you can config installation.</li> <li>Proxy Management - This portlet interfaces to a My and store one or more proxy credentials for interacti</li> </ul>	SPIR browser portlet to display valuable dy eport data to the GPIR service. By default, th gure this portlet to display information from (Proxy online credential repository and ena ing with Grid services. By default, this portle	namic and static data his portlet connects to your own GPIR service bles you to download t is configured to point
	to the TeraGrid MyProxy server, but you may change this interface, a user can checkout a proxy from a My when using grid-enabled resources through the vari information about GridPort authentication can be fou File Management Portlets -We provide two portlets 1. The CFT file management portlet interface w	e this to point to your local or alternative My yProxy server which can then be used to at ious grid portlets (e.g. File Management, Jo und on the security documentation page. for interacting with remote file services. with the Comprehensive File Transfer servic	Proxy servers. Using ithenticate the user ib Submission). More e to enable multiple file
	<ul> <li>management tasks such as file listing and traservers.</li> <li>2. The GridFTP portlet is a basic portlet for man COG interfaces for accessing remote files.</li> <li>Storage Resource Broker (SRB) - The SRB portlet collection services. They provide basic functionality create/deletion, etc.) to any SRB server. These portly FusionGrid, and use either the SRB or GSI authentic</li> </ul>	ansfer on remote resources. It also interface nipulating remote files, it illustrates how to u ts interface to the SDSC Storage Resource (collection navigation, file upload/downloa lets work on several grids, including the Ter cation mechanisms.	is with GridFTP se higher level Java Broker (SRB) data d/transfer, aGrid and the
	<ul> <li>Queue Wait Time Prediction Portlets (QBETS) - Th service from the Network Weather Service group.</li> <li>GRAM Job Submission - This portlet enables job submission to a single resource that ha submitted through the portal. This portlet allows dyn both GT2 and GT4 GRAMs.</li> <li>Condor Portlets - We provide both 'vanilla universe condor portlets can be used to submit jobs to regula condora portlets can be used as clients to Globus G</li> </ul>	ese portlets provide two interfaces for inter ubmission using both Globus WS GRAM ar is a GRAM server running and can show jol amic binding to different versions, so users of Condor and 'grid universe' Condor-G po ar Condor installations via the BirdBath Wet SRAM services Both of these services use	acting with the QBETS Id pre-WS GRAM. It a status for jobs can submit jobs to rtlets. The vanilla a Service interface. The (and provide). Java API

Figura 4.6: Pantalla de inicio del portal grid

#### 4.4.2. Uso del Portlet Proxy-Manager

Seleccionar el portlet ProxyManager y dar click en el botón Get new Proxy



Figura 4.7: Portlet del servidor de certificados

Proporcionar la contraseña del certificado proxy y dar un click en el botón de *Get Proxy From MyProxy*.

Icome Administration file-man	ager proxymanager-portlet gp-job-submission
	ProxyManager Portlet
l out the following parameters a	and click 'Get Proxy' to retrieve your proxy from the MyProxy server sp
l out the following parameters a MyProxy Settings Hostname:	and click 'Get Proxy' to retrieve your proxy from the MyProxy server sp
l out the following parameters a MyProxy Settings Hostname: Port:	and click 'Get Proxy' to retrieve your proxy from the MyProxy server sp vodka.super.unam.mx 7512
I out the following parameters a MyProxy Settings Hostname: Port: Username:	and click 'Get Proxy' to retrieve your proxy from the MyProxy server sp vodka.super.unam.mx 7512 irving
I out the following parameters a MyProxy Settings Hostname: Port: Username: Password:	and click 'Get Proxy' to retrieve your proxy from the MyProxy server sp vodka.super.unam.mx 7512 irving
I out the following parameters a MyProxy Settings Hostname: Port: Username: Password: Lifetime:	and click 'Get Proxy' to retrieve your proxy from the MyProxy server sp vodka.super.unam.mx 7512 irving ********* 8 (hours)

Figura 4.8: Solicitud de un certificado proxy



Lo anterior, mostrará que se obtuvo un certificado proxy del usuario del portal grid.

Figura 4.9: Obtención del certificado proxy vía el portal

Para ver el contenido del certificado proxy, dar click en view



Figura 4.10: Información del certificado proxy

#### 4.4.3. Uso del Portlet File-Manager

Seleccionar el Portlet File-Manager, este portlet tiene dos secciones una de listado de archivos de origen y otra de destino.

Open Grid C	Computing Environments	ortlet gp-job-submission			
Comprehensive File I	lanagement Portlet				
?		GridPor	t File Management		
- File Manag	ger Source File Listing			Destination File Listing	
Host	balam-In2.supercomputo.unam.mx 💌		Host	balam-In2. supercomputo. unam. mx 💌	
Directory	~	Go	Directory	~	Go
PLEASE CLICK	"Go" to list files on this resource o urce.	R CHANGE THE "HOST" TO LIST FILE	S ON PLEASE CLICK ANOTHER RESO	"Go" To list files on this resource o urce.	R CHANGE

Figura 4.11: Portlet de manejo de archivos

Seleccionar en el listado de archivos de origen el host "balam-ln2.supercomputo.unam.mx" y despues dar click en Go para desplegar los archivos.

🔿 🔹 🕫 🔘	1 😵 🥞 http://ogce1.super.unam	n.mx:8080/gridsphere	/gridsphere?cid=file	e-manager-PF&gs_act	tior 🚔 🔽 Google 🍳
elcome Administ	ration <b>file-manager</b> proxymanager-;	contlet gp-job-subm	lission		
omprehensive File M	anagement Portlet				
			GridPort F	ile Management	
File Menee					
File Manag	er				
	Source File Listing				Destination File Listing
	Source File Listing				Destination File Listing
Host	balam-In2. supercomputo. unam. mx 💌			Host	balam-In2.supercomputo.unam.mx 👻
Directory	A	0.1		Directory	
Directory	/nptc_cluster/nome/irving	Go		Directory	GO
				DI FACE OLIOK	"Co" TO LIST SHEE ON THIS PEROUPOS OF ONA
L 🐴 🔇	1 1 53 in 1998			ANOTHER RESC	SURCE.
Name / T	vpe Bename	Size	Permissions	and the second second	
globus	100	4096	drwx		
idl		4096	drwxr-xr-x		
pathsc ale	3	4096	drwx·····		
pdsh		4096	drwx		
🗋 .qt		4096	drwxr-xr-x		
C.ssh		4096	drwx		
Lotalview		4096	d rwx · · · · ·		
homee		4096	drwxr-xr-x		
kpruebats	S	4096	drwxr-xr-x		
		4096	drwxr-xr-x	-1	

Figura 4.12: Listado de archivos de una máquina origen

Las acciones que se pueden realizar en ambas secciones son las siguientes:

- Ir un directorio atrás
- Ir al directorio \$HOME del usuario
- Actualizar el listado de archivos
- Subir archivos a un host origen o destino desde la máquina local del usuario.

Adicionalmente el host origen, puede transferir archivos hacia el host destino.

Dar click en el botón de Subir archivo (*Upload file*), seleccionar un archivo desde la máquina local y subir el archivo, dar click en Upload.

			GridPort Fil	e Management		
le Manager –						
Sour	ce File Listing				<b>Destination File Listing</b>	
Host balam	-In2, supercomputo, unam, mx 📕			Host	balam-In2. supercomputo. unam. mx 👻	ī
Discotory .		1		Disectory		_
Directory //hptc_c	cluster/home/irving Go			Directory	~	G
				PLEASE CLICK	"GO" TO LIST FILES ON THIS RESOURCE	OR C
- 6 🗠 2	r 33			ANOTHER RESC	DURCE.	
Name / Type	Rename	Size	Permissions			
.globus		4096	drwx			
		4090				
.idl		4006	draw			
.idl		4096	drwx			
.idl .pathscale .pdsh		4096 4096 4096	drwx drwx drwxr-xr-x			
.idl pathscale pdsh dt .qt .ssh		4096 4096 4096 4096	drwx drwx drwxr-xr-x drwx			
.idl .pathscale .pdsh .qt .ssh		4096 4096 4096 4096 4096	d rwx d rwx d rwx r- x r- x d rwx d rwx			
idl i,pathscale i,pdsh i,qt i.ssh i.totalview ihomee		4096 4096 4096 4096 4096 4096	drwx drwx drwxr-xr-x drwx drwx drwxr-xr-x			
idl i.pathscale i.pdsh i.qt i.ssh i.totalview i.totalview i.homee kpruebatss		4096 4096 4096 4096 4096 4096 4096	drwx drwx drwxr-xr-x drwx drwx drwxr-xr-x drwxr-xr-x			

Figura 4.13: Transferencia de archivo desde una máquina local

### CAPÍTULO 4. IMPLEMENTACIÓN Y EVALUACIÓN

Source File Listing Host balam-In2.supercomputo.unam.mx	•		
Directory /hptc_cluster/home/irving	Go		
ڬ À 🎯 👉 🥩			
Name / Type Rename	Siz	e	Permissions
🖄 script. serial	15	8	rw-rr
🖒 script3.err		0	rw
Script3.out		0	rw
Script5	15	8	rwxr-xr-x
Slurm-543081.0. out	19	3	rw- r r
0 top. 1024.04-10-2010_21:23	8	33	rw-rr
top. 1024.04-10-2010_21:24	8	3	rw-rr
top. 1024.04-10-2010_21:25	8	3	rw-rr
⊐Õ×		3	rw-rr
- 2		-	

Figura 4.14: Archivo en la máquina origen

Seleccionar en el listado de archivos destino el host "vodka.<br/>super.unam.mx" y después dar click en Go para desplegar los archivos.

>⇒ • % ◎ ☆ %	http://ogce1.super.unam.mx:	8080/gridsphere	e/gridsphere?cid=fil	e-manager-PF&g	s_action ☆ ▼ C ▼ Goog	le	<ul> <li>- 8</li> </ul>
O G							
Welcome Administration file	e-manager	an-job-subr	nission				
Comprehensive File Management I	Portlet						
?			GridPort F	ile Manageme	nt		
– File Manager –							
Source	File Listing				Destination File	e Listing	
Hert Luis				L L	ort u		-
balam-in2	supercomputo.unam.mx			0	vodka.super.unam.mx		<b>•</b>
Directory /hptc_clus	ter/home/irving Go	,		Direct	ory /home/irving		Go
🔁 👌 🎯 🎓	<u>.</u>				3 🙆 🕆		
Name / Type	Rename	Size	Permissions	Nar	ne / Type	Size	Last Mod
globus		4096	drwx	hist	back.27jul10	2998	2010072623
id.		4096	drwxr-xr-x	🖉 🚫 scri	pt	113	2010062900
pathscale		4096	drwx+++++	🚫 scri	pt.irving.err	0	2010062900
🗀 .pdsh		4096	drwx	🚫 scri	pt.irving.err.3	0	2010062900
qt		4096	drwxr-xr-x	🚫 scri	pt.irving.out	0	2010062900
🛄.ssh		4096	drwx+++++	🚫 scri	pt.irving.out.3	453	2010062900
Lotalview		4096	drwx·····	🚫 scri	pt4	157	2010112702
homee		4096	drwxr-xr-x	🚫 scri	pt5	158	2010120702
kpruebatss		4096	drwxr-xr-x	Sev.	.1	0	2010112702
		4006	dowr.vr.v	1 6 cm	4	0	2010112705

Figura 4.15: Listado de archivos en máquina destino

Seleccionar el archivo "script.serial" en el listado de archivos origen y dar click en el botón Transferir archvios (*transfer files*).

come Administration 1986	e-manager proxymanager-p Portlet	⊨ontlet [gp-job-subm	ission	_				
			GridPort	i File I	Management			
File Manager —								
Source	File Listing					Destination File	Listing	
Host balam-In2	.supercomputo.unam.mx 💌				Host	vodka.super.unam.mx	•	
Discolaria		-						
Directory /hptc_clus	ter/home/irving	Go			Directory	/home/irving		Go
Directory //hptc_clus	iter/home/irving	Go			Directory	/home/irving		Go
Name / Type	Rename	Go	Permissions		Directory	/home/irving	Size	Go
Name / Type	Rename	Go Size 158	Permissions	-	Directory	/home/irving	Size 2998	Go Last 2010072
Name / Type Name / Type Script.serial	Rename	Go Size 158 0	Permissions rw-rr rw	•	Directory	/home/irving	Size 2998 113	Go Last 1 2010072 2010062
Name / Type Script.serial Script3.err	Rename	Go Size 158 0 0	Permissions           rw-r-r-           rw-rrw-           rw	•	Directory	/home/irving	Size 2998 113 0	Go Last 1 2010072 2010062 2010062
Name / Type Script.serial Script3.err Script5	Rename	Go Size 158 0 0 158	Permissions           rw-rr           rw           rw           rw-r           rw-r		Directory	Intererieving	Size 2998 113 0 0	Go Last 2010072 2010062 2010062 2010062
Name / Type Script. script. script. Script. 3. out Script.3. out Script.5 Script.5 Script.5	Rename	Go Size 158 0 0 158 193	Permissions           rw-rr           rw-rr           rw-rr           rw-rr	•	Directory	Type k.27jul10 ving.err.3 ving.out	Size 2998 113 0 0	Go Last 2010072 2010062 2010062 2010062 2010062
Name / Type script.serial script.s	Rename	Go Size 158 0 0 158 193 193 83	Permissions           rw·r··r·           rw·r··r·           rw·r··r·           rw·r··r·           rw·r··r·           rw·r··r·		Directory	(home/irving Type k. 27jul 10 ving. err ving. err. 3 ving. out ving. out 3	Size 2998 113 0 0 0 453	Go Last 2010072 2010062 2010062 2010062 2010062
Name / Type           Script3.errl           Script3.errl           Script3.ort           Scrip	Rename	Go 5ize 158 0 0 158 193 83 83	Permissions           rw-rr-           rw           rw           rw-r           rw-r           rw-r           rw-r           rw-r           rw-r		Directory	Inomeritiving	Size 2998 113 0 0 0 453 157	Go Last 2010072 2010062 2010062 2010062 2010062 2010062
Image: Second	Earlborne/Irving	Go Size 158 0 0 158 193 83 83 83 83	Permissions           ГW- Г Г           ΓW           ΓW           ΓW- Γ Γ           ΓW- Γ Γ           ΓW- Γ Γ		Directory	Inome/irving	Size 2998 113 0 0 0 453 157 158	Go Last I 2010072 2010062 2010062 2010062 2010062 2010162 2010112
Name / Type           Script.serial           script.serial </td <td>Rename          </td> <td>Go Size 158 0 0 0 158 193 83 83 83 83 83 83 83 83 83 83 83 83</td> <td>Permissions           DW- D D           DW-           DW-<td></td><td>Directory</td><td>ThomesTriving</td><td>Size 2998 1113 0 0 0 453 157 158 0</td><td>Go Last I 2010072 2010062 2010062 2010062 2010062 2010112 2010112 2010120 2010112</td></td>	Rename	Go Size 158 0 0 0 158 193 83 83 83 83 83 83 83 83 83 83 83 83	Permissions           DW- D D           DW-           DW- <td></td> <td>Directory</td> <td>ThomesTriving</td> <td>Size 2998 1113 0 0 0 453 157 158 0</td> <td>Go Last I 2010072 2010062 2010062 2010062 2010062 2010112 2010112 2010120 2010112</td>		Directory	ThomesTriving	Size 2998 1113 0 0 0 453 157 158 0	Go Last I 2010072 2010062 2010062 2010062 2010062 2010112 2010112 2010120 2010112

Figura 4.16: Transferencia de archivo desde máqina origen a máquina destino

A continuación se observa el archivo transferido en el host destino enviado de un host origen.

Destination	File Listing		
Host vodka.super.unar	m.mx	•	
Directory //home/irving		Go	
🗅 🔥 🍪 🌮			
Name / Type	Size	Last Modified	Permissions
K script	113	20100629000919	rwxr-xr-x
K script.irving.err	0	20100629001023	rw
Script.irving.err.3	0	20100629001334	rw
Script.irving.out	0	20100629001023	rw
Script.irving.out.3	453	20100629001345	rw
🚫 script.serial	158	20101208030226	rw- r r
Script4	157	20101127023246	rw-rr
Ko script5	158	20101207025935	rw- r r
🚫 sev.1	0	20101127023343	rw
🚫 sov.1	0	20101127023343	rw

Figura 4.17: Archivo en máquina destino

### 4.4.4. Uso de Portlet Gp-Job-Submission

Para poder hacer uso de este portlet, dar click en el portlet gp-job-submission. Para mostrar el funcionamiento de este portlet y su interacción con el equipo de supercómputo, ejecutaremos el siguiente programa:

```
#!/bin/sh
/bin/pwd
/usr/bin/whoami
/bin/hostname
/bin/date
if [ $# -eq 2 ]
then
  echo ''/bin/sleep $1''
  /bin/sleep $1
  echo ''wake up''
  /bin/date
  for ((i=1; i<=$2; i++))</pre>
  do
        echo $i
  done
else
  echo ''Para ejectar este script introduzca dos numeros''
fi
```

Para ejecutar el programa, en el portlet de gp-job-submission, seleccionar el host balam-ln2. supercomputo.unam.mx, completar los parámetros necesarios y solicitar la ejecución del programa dando click en el botón *Submit*, como se muestra a continuación:

Most Visited 📘 Ge	tting Started 🔝 Latest Headlines	
OGCE Grid Portal	*	
pen Grid Co		Logout Welcome, Irvin Alvarez
lcome Adminis	ration file-manager proxymanager-portlet <b>gp-job-submission</b>	
Batch Job Submis	GridPort Job Submission	E
Job Submissi	on	
Host	balam-ln2.supercomputo.un	
Port	2119	
Executable	script.serial	
Arguments	60 9	
Standard Input		
Standard Output	output.serial	
Standard Error	error.serial	
Directory		
CPU Count	1	
Wall Clock Time		
(min)	single	
Job I ype	pruebas	
Queue	Submit	

Figura 4.18: Portlet de Envío de Jobs

Una vez solicitada la ejecución del programa, el portal genera un RSL (*Resource Standar Language*), el cual contiene los parámetros de ejecución del programa en lenguaje del middleware de grid para su ejecución. A continuación se muestra el RSL generado por el portal:

```
El rsl es: &(executable=script.serial)(arguments=60 9)(count=1)
(stdout="output.serial")(stderr="error.serial")(jobType="single")
(queue="pruebas")
```

Este RSL es utilizado por el servidor GRAM para solicitar recursos de cálculo a la supercomputadora, esta petición se realiza al Sistema de Calendarización de jobs y Administración de Recursos LSF.

El sistema LSF cuando dispone de los recursos de cómputo, despacha los recursos para la ejecución del programa. Esta asignación de recursos y las propiedades del job se puede verificar vía consola, como se aprecian a continuación:

[ir	ving	@n34	40 ~]\$	bjobs	s -1								
Job	<113	345:	1>, Use	er <ir ( נ נ נ נ נ נ נ נ נ נ נ נ נ נ נ נ נ נ</ir 	Command Command Is Job I -o /hpto cluster, (=''/hpto	Projec <#! /h Managen c_clust /home/i tc>	ct <defa pin/sh;# c;#;#BSU ter/home irving/e</defa 	ult>, ;# LSI B -q ] /irvin rror.s	Statu F batc prueba ng/out serial	s <run h job s;#BSU put.se ;#BSUB</run 	>, Queu script B -i /d rial;#B -n 1;X	e <prue built b ev/null SUB -e 509_USE</prue 	bas>, y Glob ;#BSUB /hptc_ R_PROX
Thu	Jan	13	08:01	:28: S r ] e	Submitte null>, ( L>, Erre equestee	ed from Dutput or File d Resou	n host < File <br e urces <t< td=""><td>n339&gt; hptc_d _clust ype=ar</td><td>, CWD cluste ter/ho ny&gt;;</td><td>&lt;\$HOME r/home me/irv</td><td>&gt;, Inpu /irving ing/err</td><td>t File /output or.seri</td><td>.seria al&gt;, R</td></t<>	n339> hptc_d _clust ype=ar	, CWD cluste ter/ho ny>;	<\$HOME r/home me/irv	>, Inpu /irving ing/err	t File /output or.seri	.seria al>, R
Thu	Jan	13	08:01	:32: S ı r	Started ister/hong>;	on <l: ome/irv</l: 	sfhost.l ving>, E	ocaldo xecut:	omain> ion CW	, Exec D <td>ution H tc_clus</td> <td>ome ter/hom</td> <td>ptc_cl e/irvi</td>	ution H tc_clus	ome ter/hom	ptc_cl e/irvi
Thu	Jan	13	08:01	:32: s	slurm_i	d=54851	13;ncpus	=1;slı	ırm_al	loc=n3	14;		
SC	HEDUI	LING	G PARAN	1ETERS	5:								
			r15s	r1m	r15m	ut	pg	io	ls	it	tmp	swp	mem
10	adScl	ned	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
lo	adSto	сp	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

[irving@n340 ~]\$

Para monitorear el estado del job mediante el portal grid, este portlet muestra en su parte inferior los jobs enviados a ejecución, su estado y las acciones que se pueden realizar a los mismos. Para ver el estado actual del job, dar click en en *refresh*. A continuación se muestran los estados por los que pasa el job:

 https://balam-in2.supercomputo.unam.mx:44393/16145717058644622496/1863408318102375595/
 DONE
 Delete

 https://balam-in2.supercomputo.unam.mx:44393/16145718159368047261/1863408318102399662/
 PENDING
 Cancel
 Delete

Figura 4.19: Estado pendiente del job

#### CAPÍTULO 4. IMPLEMENTACIÓN Y EVALUACIÓN

https://balam-ln2.supercomputo.unam.mx:44393/16145717058644622496/1863408318102375595/ DONE Delete https://balam-ln2.supercomputo.unam.mx:44393/16145718159368047261/1863408318102399662/ ACTIVE Cancel Delete

Figura 4.20: Estado activo del job

https://balam-ln2.supercomputo.unam.mx:44393/16145717058644622496/1863408318102375595/ DONE Delete https://balam-ln2.supercomputo.unam.mx:44393/16145718159368047261/1863408318102399662/ DONE Delete

Figura 4.21: Estado finalizado del job

La salida del job es la siguiente:

```
Sender: LSF System <lsfadmin@lsfhost.localdomain>
Subject: Job 113451: <#! /bin/sh;#;# LSF batch job script built by Globus
Job Manager;#;</pre>
```

```
#BSUB -q pruebas;#BSUB -i /dev/null;
#BSUB -o /hptc_cluster/home/irving/output.serial;
#BSUB -e /hptc_cluster/home/irving/error.serial;
#BSUB -n 1;
```

```
X509_USER_PROXY=''/hptc> Done
```

```
Job <#! /bin/sh;#;# LSF batch job script built by Globus Job Manager;#;
#BSUB -q pruebas;#BSUB -i /dev/null;#BSUB -o /hptc_cluster/home/irving/
output.serial;#BSUB -e /hptc_cluster/home/irving/error.serial;#BSUB -n 1;
X509_USER_PROXY=''/hptc> was submitted from host <n339> by user <irving>.
Job was executed on host(s) <lsfhost.localdomain>, in queue <pruebas>,
as user <irving>.</hptc_cluster/home/irving> was used as the home directory.
</hptc_cluster/home/irving> was used as the working directory.
Started at Thu Jan 13 08:01:32 2011
Results reported at Thu Jan 13 08:02:47 2011
```

Your job looked like:

```
_____
```

# LSBATCH: User input
#! /bin/sh

```
#
# LSF batch job script built by Globus Job Manager
#
#BSUB -q pruebas
#BSUB -i /dev/null
#BSUB -o /hptc_cluster/home/irving/output.serial
#BSUB -e /hptc_cluster/home/irving/error.serial
#BSUB -n 1
X509_USER_PROXY=''/hptc_cluster/home/irving/.globus/job/balam-ln2.supercomputo.
unam.mx/16145718159368047261.1863408318102399662/x509_user_proxy''; export X50
9_USER_PROXY
GLOBUS_LOCATION=''/global/opt/appl/globus-5.0''; export GLOBUS_LOCATION
GLOBUS_GRAM_JOB_CONTACT=''https://balam-ln2.supercomputo.unam.mx:44393/16145718
159368047261/1863408318102399662/''; export GLOBUS_GRAM_JOB_CONTACT
HOME=''/hptc_cluster/home/irving''; export HOME
LOGNAME=''irving''; export LOGNAME
GLOBUS_GASS_CACHE_DEFAULT=''/hptc_cluster/home/irving/.globus/.gass_cache'';
export GLOBUS_GASS_CACHE_DEFAULT
export PATH=/opt/appl/scripts-grid:$PATH
#Change to directory requested by user
cd /hptc_cluster/home/irving
/hptc_cluster/home/irving/script.serial ''60'' ''9''
Successfully completed.
Resource usage summary:
    CPU time :
                     0.12 sec.
    Max Memory :
                       5 MB
    Max Swap :
                       31 MB
```

81

The output (if any) follows:

```
/hptc_cluster/home/irving
irving
n314
Thu Jan 13 08:01:32 CST 2011
/bin/sleep 60
wake up
Thu Jan 13 08:02:32 CST 2011
1
2
3
4
5
6
7
8
```

9

#### PS:

Read file </hptc\_cluster/home/irving/error.serial> for stderr output of this job.

ESTADISTICAS DEL JOB

Duracion:	1.25	minutos
Recursos consumidos:	0.02	horas-cpu
CPU Utilizado:	0.00	minutos
Eficiencia de uso de CPU:	0.13	%

### 4.5. Pruebas de aplicaciones

A continuación se mostrará como utilizar varias aplicaciones mediante el uso del portal grid. Para hacer uso de estas aplicaciones fue necesario modificar un archivo de configuración de Globus Toolkit y crear scripts que carguen el ambiente que utilizan las aplicaciones, esto fue debido a que el middleware no proporciona un ambiente para cada aplicación o usuario específico.

#### 4.5.1. Gaussian

Para el uso de la aplicación de gaussian, se hizo el programa o script "script.gaussian", el fin de este script es cargar el ambiente que necesita la aplicación Gaussian para su correcto funcionamiento. El contendido del script es el siguiente:

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

```
export TMPU="/global/$LOGNAME"
export GAUSS_SCRDIR=$TMPU
export GAUSS_EXEDIR="/opt/appl/g09/bsd:/opt/appl/g09/private:/opt/appl/g09"
export GAUSS_ARCHDIR="/opt/appl/g09/arch"
export GMAIN="/opt/appl/g09/bsd:/opt/appl/g09/private:/opt/appl/g09"
export G03BASIS="/opt/appl/g09/basis"
export F_ERROPT1="271,271,2,1,2,2,2,2"
export PATH="/opt/appl/g09/bsd:/opt/appl/g09/private:/opt/appl/g09:$PATH"
g09 < "$@"</pre>
```

 $Yse \ modifico\ el \ archivo\ \$GLOBUS\_LOCATION/lib/perl/Globus/GRAM/JobManager/lsf.pm:$ 

```
if (-f '/opt/appl/scripts-grid/' . $description->executable) {
  $description->add('executable',
  '/opt/appl/scripts-grid/' . $description->executable);
  }
```

Esta modificación también fue necesaria para Nwchem (ver sección 4.5.2).

Para solicitar la ejecución de la aplicación se colocan los siguientes parámetros en el portal grid:

i 🔿 🔸 🕲 🕄	😰 👻 👫 http://ogce1.super.unam.mx:8080/gridsphere/gridsphere?cid=gp-job-submission
Job Submiss	http://ogce1.super.unam.mx:8080/gridsphere/gridsphere?cid=gp-job-submission
Host	balam-In2.supercomputo.unam.mx 🕶
Port	2119
Executable	script.gaussian
Arguments	pruebaOGCE/g09/test919.com
Standard Input	
Standard Output	pruebaOGCE/g09/t919.o
Standard Error	pruebaOGCE/g09/t919.e
Directory	
CPU Count	4
Wall Clock Time (min)	
JobType	single
Queue	pruebas
	Submit

Figura 4.22: Parámetros para la ejecución de un job de Gaussian

- En el campo *Executable* se proporciona el nombre del programa que carga el ambiente, en nuestro caso script.gaussian.
- En el campo Arguments se proporciona el archivo de entrada de gaussian.
- El campo *Standard output* y *Standar error* corresponden a los archivos de salida y de error estándar respectivamente incluyendo el directorio donde se colocarán.

- En el campo *CPU count* sólo se pueden proporcionar hasta 4 procesadores debido al tipo de licencia que se cuenta de esta aplicación.
- En el campo *Job type* se proporciona single.
- En el campo Queue se proporciona la cola en que se ejecutara la aplicación.

Y finalmente se da click en *Submit* para enviar el job.

#### 4.5.2. Nwchem

El programa que carga el ambiente de nwchem y ejecuta a nwchem es el programa script.nwchem, el contenido de este programa es el siguiente:

#!/bin/bash

```
export PATH=/opt/hptc/bin:/opt/appl/bin:$PATH
```

/opt/hpmpi/bin/mpirun -srun nwchem "\$@"

El archivo de entrada "input2.in" de esta aplicación es el siguiente:

```
title "formaldehyde ECP deck"
start ecpchho
geometry units au
 С
            0.000000 \quad 0.000000 \quad -1.025176
 0
            0.000000 0.000000 1.280289
 Η
            0.000000 1.767475 -2.045628
            0.000000 - 1.767475 - 2.045628
 Η
end
basis
 C SP
  0.1675097360D+02 -0.7812840500D-01 0.3088908800D-01
   0.2888377460D+01 -0.3741108860D+00
                                       0.2645728130D+00
   0.6904575040D+00 0.1229059640D+01 0.8225024920D+00
 C SP
  0.1813976910D+00 0.100000000D+01 0.10000000D+01
 C D
```

```
0.80000000D+00 0.10000000D+01
  C F
  0.10000000D+01 0.10000000D+01
  0 SP
  0.1842936330D+02 -0.1218775590D+00 0.5975796600D-01
  0.4047420810D+01 -0.1962142380D+00
                                      0.3267825930D+00
  0.1093836980D+01 0.1156987900D+01
                                      0.7484058930D+00
  0 SP
  0.2906290230D+00 0.100000000D+01 0.10000000D+01
  0 D
  0.80000000D+00 0.10000000D+01
  0 F
  0.110000000D+01 0.10000000D+01
  H S
  0.1873113696D+02 0.3349460434D-01
  0.2825394365D+01
                    0.2347269535D+00
  0.6401216923D+00 0.8137573262D+00
  H S
  0.1612777588D+00 0.10000000D+01
end
ecp
  C nelec 2
  C ul
       1
               80.0000000
                                -1.6000000
       1
               30.000000
                                -0.4000000
       2
                0.5498205
                                -0.03990210
  Сs
       0
                0.7374760
                                0.63810832
       0
              135.2354832
                                11.00916230
       2
                8.5605569
                                20.13797020
  Сp
       2
               10.6863587
                                -3.24684280
       2
               23.4979897
                                 0.78505765
  O nelec 2
  0 ul
       1
               80.000000
                                -1.6000000
       1
               30.000000
                                -0.4000000
       2
                1.0953760
                                -0.06623814
  0 s
```

	0		0.9212952	0.39552179
	0		28.6481971	2.51654843
	2		9.3033500	17.04478500
Оp				
	2		52.3427019	27.97790770
	2		30.7220233	-16.49630500
end				
scf				
vect	ors	input	hcore	
maxi	ter	20		
end				
task s	cf			

Para ejecutarlo desde el portal grid, se introdujeron los siguientes parámetros:

- En el campo *Executable* se proporciona el programa de script.nwchem.
- En el campo Arguments se proporciona el archivo de entrada de nwchem.
- El campo *CPU count* puede ser variable y depende de la cola seleccionada.

Y finalmente se da click en *Submit* para enviar el job.

; 🔕 🖘 🗧 🗧	😭 🐨 🥞 http://ogce1.super.unam.mx:8080/gridsphere/gridsphere?cid=gp-job-submission-PF&gs_i
– Job Submiss	ion
Host	balam-In2.supercomputo.unam.mx 🕶
Port	2119
Executable	script.nwchem
Arguments	pruebaOGCE/nwchem/input2.in
Standard Input	
Standard Output	pruebaOGCE/nwchem/pin2.o
Standard Error	pruebaOGCE/nwchem/pin2.e
Directory	
CPU Count	4
Wall Clock Time (min)	
JobType	single
Queue	pruebas
	Submit

Figura 4.23: Parámetros para la ejecución de un job de Nwchem

### 4.5.3. MPI

Para ejecutar MPI en Kanbalam, fue necesario hacer modificaciones en el archivo \$GLOBUS\_LOCATION/lib/perl/Globus/GRAM/JobManager/lsf.pm, las modificaciones fueron:

```
print JOB "export PATH=/opt/appl/scripts-grid:/opt/hpmpi/bin:
/opt/hptc/bin:\$PATH\n";
print JOB "export LD_LIBRARY_PATH=/opt/hpmpi/lib/linux_amd64:
\$LD_LIBRARY_PATH\n";
print JOB "$mpirun -srun", '';
```

El código fuente de un programa en mpi es el siguiente:

```
#include<stdio.h>
#include<mpi.h>
int main(int argc, char *argv[])
{
    int rank,nproc,namelen;
    char nombre_proc [MPI_MAX_PROCESSOR_NAME];

MPI_Init(&argc, &argv);
MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD,&nproc);
MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD,&rank);
MPI_Get_processor_name(nombre_proc,&namelen);
printf("Hola proceso %d de %d en %s \n",rank, nproc,nombre_proc);
MPI_Finalize();
return 0;
}
```

WChem UK NW	Chem 🕻 Running G	🛐 Gaussian:	bsub refer	(( OTRS :: Lo	👌 a;o bisiest	💿 Computa
		Grid	Port Job Submis	sion		
Job Submiss	ion ———					
Host	balam-In2.supercompute	o.unam.mx 💌				
Port	2119					
Executable	pruebaOGCE/hola_mpi					
Arguments						
Standard Input		-				
Standard Output	pruebaOGCE/nps19.o					
Standard Error	pruebaOGCE/nps19.o					
Directory						
CPU Count	16	-				
Wall Clock Time (min)						
JobType	mpi					
Queue	pruebas					
	Submit					

Los parámetros para solicitar la ejecutación de este programa de mpi son los siguientes:

Figura 4.24: Parámetros para la ejecución de un job de MPI

- En el campo *Executable* se proporciona el programa de mpi a ejecutar.
- El campo *CPU count* puede ser variable y depende de la cola seleccionada.
- En el campo *Job Type* se proporciona el valor mpi.

### 4.5.4. OpenMP

Para ejecutar correctamente OpenMP en Kanbalam, fue necesario hacer modificaciones en el archivo \$GLOBUS\_LOCATION/lib/perl/Globus/GRAM/JobManager/lsf.pm, las modificaciones fueron las siguientes:

```
if($description->count() lt '4')
{print JOB "export OMP_NUM_THREADS=",$description->count(),"\n";}
else
{print JOB "export OMP_NUM_THREADS=4 \n";}
```

El código fuente del programa que utiliza openmp es el siguiente:

```
#include <omp.h>
#define N
              1000000
main ()
{
int i,tid,c[N];
#pragma omp parallel shared(c) private(i,tid)
  {
  #pragma omp for schedule(dynamic) nowait
  for (i=0; i <= N; i++)</pre>
    {
    c[i] = i*i;
    tid = omp_get_thread_num();
    printf("i = %d, thread = %d, c[i] = %d\n", i, tid, c[i]);
    }
  } /* end of parallel section */
}
```

Para utilizar openmp mediante el portal grid, se tienen que utilizar los siguientes parámetros:

D. C X (	http://ogce1.super.unam.mx:8080/gridsph	ere/gridsphere?cid=gp-job-submis
GOGCE Grid Portal	*	
Open Grid Co		
/elcome 🛛 Adminis	tration 🛛 file-manager 🗍 proxymanager-portlet	gp-job-submission
P Batch Job Submis	sion Portlet	does at table Contention to a
	Gri	aPort Job Submission
Job Submissi	on ———	
Host	balam-In2.supercomputo.un	
Port	2119	
Executable	E/openmp/programa.openmp.o	
Arguments		
Standard Input		
Standard Output	baOGCE/openmp/openmp.15.o	
Standard Error	baOGCE/openmp/openmp.15.e	
Directory		
CPU Count	4	
Wall Clock Time (min)		
JobType	single	
Queue	pruebas	
	Submit	

Figura 4.25: Parámetros para la ejecución de un job de OpenMP

- En el campo *Executable* se proporciona el nombre del programa de openmp.
- En el campo Arguments se proporciona los argumentos que utilice el programa.
- En el campo *CPU count* sólo se pueden proporcionar hasta 4 procesadores debido a que sólo existen 4 procesadores utilizando memoria compartida por nodo.

Y finalmente se da click en *submit* para enviar el job.

### 4.6. Estadísticas del Portal Grid

Se utilizó la herramienta JMeter [26] con el objetivo de realizar pruebas de estrés en el portal grid OGCE y verificar su correcto funcionamiento bajo estas condiciones. Mediante esta herramienta se simuló el ingreso de varios usuarios al portal y de esta manera se caracterizó el comportamiento con los diferentes componentes del portal grid.

A continuación en la Fig. 4.26 la duración (eje x) y el porcentaje de carga del procesador (eje y) para distintos números de usuarios, mientras que en la Fig. 4.27 se muestra la carga en memoria:



Figura 4.26: Carga del CPU al variar los usuarios conectados en el portal

De la gráfica 4.26 se puede apreciar que conforme se aumenta la cantidad de usuarios en el portal se aumenta el tiempo de ejecución de la prueba. El porcentaje de uso del procesador para todos los casos es aproximadamente 100%. Para un usuario la prueba dura 20 segundos aproximandamente y cuando el portal atiende simultaneamente a 50 usuarios el tiempo de la prueba se alarga a cerca de los 19 minutos.

De la figura 4.27 no se aprecia un aumento de carga en memoria considerable al aumentar el número de usuarios, el uso de la memoria fue menor de 30 porciento en todas las pruebas realizadas.



Figura 4.27: Porcentaje de memoria utilizado al incrementar la cantidad de usuarios conectados

A continuación se presentan los tiempos de respuesta obtenidos al variar la cantidad de usuarios que utilizan los difentes componentes del portal:



Figura 4.28: Carga al solicitar un certificado proxy

En la figura 4.28 se muestra que para una carga de 50 usuarios el tiempo promedio para obtener un certificado es de 30 segundos y el tiempo máximo que puede llegar a demorarse es de 1 minuto con 20 segundos aproximadamente.



Figura 4.29: Carga al entrar al portlet de manejo de archivos

De la figura 4.29 se puede apreciar que el tiempo promedio de respuesta para entrar al portlet de manejo de archivos es de 11 segundos aproximadamente cuando se encuentran 50 usuarios utilizando el portal y un tiempo máximo de 25 segundos aproximadamente para 30 usuarios.



Figura 4.30: Carga al entrar al portlet de envío de jobs

En la figura 4.30 se muestra que el tiempo promedio de respuesta es de 1 minuto al acceder al portlet de envío de jobs cuando la carga es de 50 usuarios; y el tiempo máximo de respuesta de este portlet es de casi 3 minutos para una carga de 50 usuarios.

Los tiempos de respuesta en los principales componentes del portal grid son muy grandes al tener una carga mayor a 30 usuarios. Esto puede explicarse por las características del equipo donde se instaló el portal grid, puesto que se encuentra en una máquina virtual con un procesador y dicha máquina fue adquirida hace más de cinco años. Para tener mejores tiempos de respuesta en los diferentes componentes del portal grid, se recomienda instalar el portal grid en un equipo más potente, con varios procesadores y preferentemente en un servidor dedicado.

### 4.7. Resumen

En este capítulo se describieron las caracteristícas en hardware y en software de los equipos donde se instaló el portal grid, el servidor de certificados, el middleware de grid y los recursos de grid (fabric).

También se describió cómo se llevó a cabo la instalación del portal grid 2.5, la configuración de los diferentes componentes del portal, la modificación del código fuente del portal para poder interactuar adecuadamente con la parte de envío de jobs a una supercomputadora, y así mismo se mostraron los archivos de configuración de aplicaciones específicas en el middleware de grid utilizado.

Se mostró el funcionamiento del portal, al probar sus diferentes componentes: manejo de certificados proxy, manejo de archivos, pruebas de ejecución de diferentes aplicaciones (gaussian, nwchem, mpi y openmp).

Y finalmente se realizaron pruebas de carga al utilizar una herramienta que permite simular a usuarios dentro del portal grid. Esta herramienta y los resultados obtenidos, nos permitirán determinar las características en hardware que debe tener una máquina de producción del portal grid para una determinada cantidad de usuarios a atender.