



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

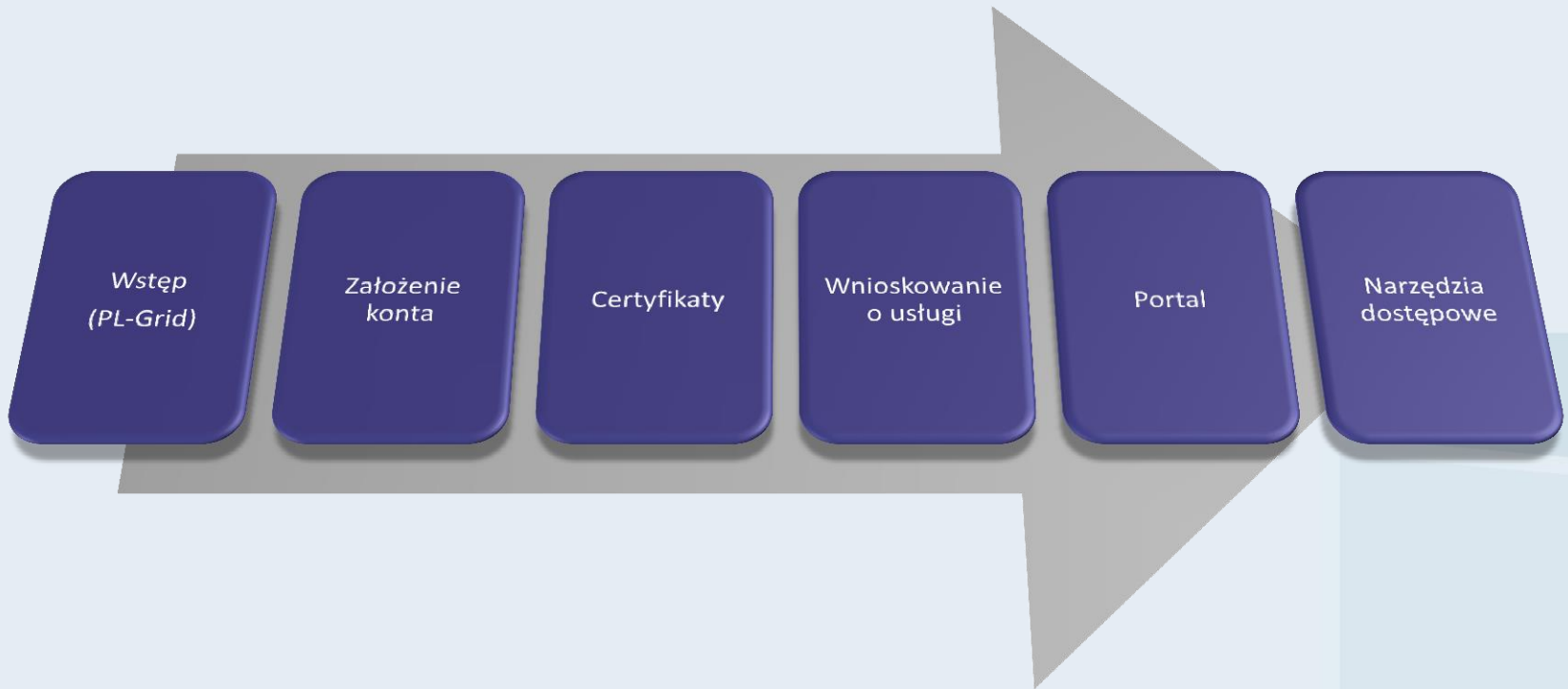


Wprowadzenie do użytkowania infrastruktury PL Grid

Bartosz Bosak
Piotr Kopta
Tomasz Piontek



Agenda



Wstęp
(PL-Grid)

Założenie
konta

Certyfikaty

Wnioskowanie
o usługi

Portal

Narzędzia
dostępowe





WSTĘP (PL-GRID)

Konsorcjum PL-Grid



Centrum Informatyczne
Trójmiejskiej Akademickiej Sieci
Komputerowej w Gdańsku



Poznańskie Centrum
Superkomputerowo
Sieciowe w Poznaniu



Interdyscyplinarne Centrum
Modelowania
Matematycznego i
Komputerowego w Warszawie



Wrocławskie Centrum
Sieciowo - Superkomputerowe
we Wrocławiu



Akademickie Centrum
Komputerowe
CYFRONET AGH w Krakowie

40177 rdzeni

610 Tflops

8.38 PB pamięci

154 aplikacje



Kto może korzystać z PL-Gridu?



- Użytkownikiem PL-Gridu może zostać każda osoba prowadząca działalność naukową, związaną z uczelnią lub instytutem naukowym w Polsce.
- Jeśli jest zarejestrowana w bazie "Ludzie nauki" prowadzonej przez Ośrodek Przetwarzania Informacji - OPI - wystarczy, że podczas rejestracji poda swój numer.
- Jeśli osoba nie posiada własnego numeru OPI musi wskazać numer OPI osoby, pełniącej rolę opiekuna naukowego.



Regulamin



- Z konta dostępowego do infrastruktury ma prawo korzystać wyłącznie właściciel tego konta.
- Zabronione jest udostępnianie konta osobom trzecim.
- Użytkownik jest zobowiązany należycie zabezpieczyć swoje konto oraz inne dane służące do autoryzacji przed niepowołanym dostępem
- Użytkownik jest uprawniony do korzystania z zasobów infrastruktury PL-Grid jedynie w celu wykonywania obliczeń oraz przechowywania danych zgodnie z zadeklarowanym tematem badań.



Regulamin (c.d.)



- Zabrania się wykorzystywania zasobów niezgodnie z prawem oraz wszelkich działań umyślnych, które mogą zakłócić poprawne funkcjonowanie infrastruktury.
- Projekt PL-Grid nie ponosi odpowiedzialności za wadliwe działanie infrastruktury, poprawność wyników obliczeń oraz ewentualne szkody powstałe w wyniku wykorzystania zasobów projektu.
- Użytkownik jest zobligowany do załączenia informacji o wykorzystaniu infrastruktury PL-Grid w publikacjach, które powstały w oparciu o wyniki uzyskane przy użyciu tej infrastruktury.



Regulamin (c.d.)



Akceptacja całego regulaminu jest konieczna do uzyskania konta w infrastrukturze PL-Grid.

Regulamin użytkownika Infrastruktury PL-Grid wersja 1.0

1. UŻYTKOWNICY INFRASTRUKTURY PL-GRID

- Użytkownikiem infrastruktury PL-Grid może być każda osoba prowadząca badania naukowe, związana z jednostką naukową w rozumieniu ustawy z dnia 8 października 2004 r. o zasadach finansowania nauki.

2. DOSTĘP DO INFRASTRUKTURY PL-GRID

- Dostęp do infrastruktury odbywa się poprzez usługi dostępne, których adresy sieciowe użytkownik otrzyma po rejestracji.
- Z konta dostępowego do infrastruktury ma prawo korzystać wyłącznie właściciel tego konta. Zabronione jest udostępnianie konta osobom trzecim.
- Użytkownik jest zobowiązany należyście zabezpieczyć swoje konto oraz inne dane służące do autoryzacji przed niepożądanym dostępem m.in. przez stosowanie trudnych do odgadnięcia haseł, odpowiednich praw dostępu oraz szyfrowania.

3. WYKORZYSTANIE ZASOBÓW INFRASTRUKTURY PL-GRID

- Użytkownik jest uprawniony do korzystania z zasobów infrastruktury PL-Grid jedynie w celu wykonywania obliczeń oraz przechowywania danych zgodnie z zadeklarowanym tematem badań.
- Zabrania się wykorzystywania zasobów niezgodnie z prawem oraz wszelkich działań umyślnych, które mogą zakłócić poprawne funkcjonowanie infrastruktury PL-Grid.
- Użytkownik jest zobowiązany do niezwłocznego poinformowania Operatora PL-Grid (operator@nlgrid.pl) o znanych lub podejrzanym nadużyciach i



Granty



Dostęp do zasobów infrastruktury kontrolowany jest poprzez system grantów.

- Każdemu użytkownikowi przysługuje odnawialny **grant osobisty** (1000 „rdzenio – godzin” obliczeń, 40 GB) udzielany na 6 miesięcy.
- Aktywacja grantu osobistego przeprowadzana jest automatycznie.
- Większa ilość zasobów może być wykorzystywana przez uzyskanie **grantu właściwego**.
- Zużycie zasobów można sprawdzić w zakładce **Accounting** w Portalu PL-Grid

1000 rdzenio-godzin =
= 1000 godzin obliczeń na 1 rdzeniu =
= 1 godzina obliczeń na 1000 rdzeniach

Dokładny opis w podręczniku użytkownika





ZAŁOŻENIE KONTA



Założenie konta



<https://portal.plgrid.pl>

The screenshot shows the PL-Grid portal interface. At the top, there is a navigation bar with the PL-Grid logo and a 'Witaj!' (Welcome!) button. Below the navigation bar, there are three main sections: 'Logowanie i rejestracja' (Login and registration), 'Ogłoszenia' (Announcements), and 'Wpisy' (Posts). The 'Logowanie i rejestracja' section contains a login form with fields for 'Login' and 'Hasło' (Password), a 'Zaloguj się' (Log in) button, and links for 'Rejestracja' (Registration), 'Zapomniałem hasła' (Forgot password), and 'Zaloguj za pomocą certyfikatu' (Log in with certificate). The 'Ogłoszenia' section features a 'Wpisy' (Posts) tab and a main announcement titled 'Nowe funkcjonalności: zespoły użytkowników, granty i bazy danych' (New functionalities: user groups, grants and databases). The announcement text states: 'W ostatnim czasie wprowadziliśmy trzy nowe ważne funkcjonalności.' (In the last time we introduced three new important functionalities.) It then describes the 'Zespoły Użytkowników' (User Groups) and 'Granty Obliczeniowe' (Computational Grants) features.



Założenie konta



Logowanie i rejestracja

Proszę uzupełnić poniższy formularz rejestracyjny (wszystkie pola są wymagane)

Imię

Nazwisko

Login
plg

Obywatelstwo
 polskie
 inne

Pesel

Adres e-mail

Adres e-mail ponownie

Numer telefonu

Hasło

Hasło ponownie



Tekst kontrolny Zmień obrazek

- Typ rejestracji
- Użytkownik
 - Pracownik
 - Szkolenie

Logowanie i rejestracja

Proszę uzupełnić poniższy formularz użytkownika (wszystkie pola są wymagane)

Typ OPI <http://www.opi.org.pl/>
 Posiadam własny numer w bazie OPI
 Jestem podopiecznym osoby zarejestrowanej w bazie OPI

Nr OPI opiekuna

Imię i nazwisko opiekuna

Organizacja

Strona WWW organizacji

Dziedzina nauki

Temat badań

Akceptacja [regulaminu](#)

Hasło nie może zawierać nazwy użytkownika, musi zawierać minimum 10 znaków, co najmniej jedną dużą literę i co najmniej jedną cyfrę. Dopuszczalne znaki to znaki alfanumeryczne i następujące znaki specjalne: @ . _

8353
(można zmienić via helpdesk)
Prof. Jacek Komasa

UAM

<http://www.amu.edu.pl/>





GENEROWANIE CERTYFIKATU

Generowanie certyfikatu



Strona główna Podręcznik użytkownika Helpdesk PL-Grid **Moje konto**

Platforma dziedzinowa: Nanotechnologie

Certyfikaty SimpleCA

Portal PL-Grid umożliwia uzyskanie on-line osobistego certyfikatu X.509 o krajowym zasięgu działania ([więcej informacji](#)).

[Chcę wygenerować certyfikat SimpleCA](#)

Zarządzanie certyfikatami

Portal pozwala na zarejestrowanie certyfikatów wystawionych przez Polish Grid CA i Simple CA

W Portalu zostały zarejestrowane następujące certyfikaty:

Autologin	DN	LDAP
<input checked="" type="checkbox"/>	CN=Tomasz Piontek,O=PSNC,O=GRID,C=PL	

Katalog usług

Usługi

Nazwa
Globalny
Globalny
Globalny

Usługi

Nazwa
Dostęp do
Dostęp do



Generowanie certyfikatu



Certyfikaty SimpleCA

Proszę podać hasło dla generowanego certyfikatu. Wygenerowany certyfikat jest ważny przez 1 rok. W tym czasie nie jest możliwe powtórne wygenerowanie certyfikatu.

Podaj hasło do konta : plgpiontek:

Ustaw hasło zabezpieczające certyfikat:

Akceptuję [politykę](#)

Wróć do [strony głównej](#).

Powtórz hasło zabezpieczające certyfikat:

Generuj certyfikat

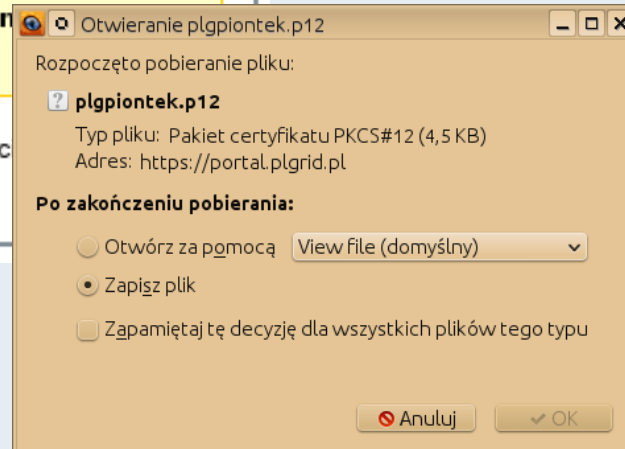
Certyfikaty SimpleCA

[Wróć do pełnej strony](#)

UWAGA! Trwa generowanie certyfikatu...

Proces może potrwać ponad minutę. Nie wolno korzystać z żadnych funkcji portalu.

Po otrzymaniu certyfikatu można powrócić do [strony głównej](#).





WNIOSKOWANIE O DOSTĘP DO ZASOBÓW

Aplikowanie o dostęp do zasobów



Moje konto Administrator Usług Zarządzanie Szkoleniami Zespoły i granty Narzędzia

Katalog usług

Usługi globalne [Zwiń](#)

Nazwa	Zasięg	Usługa nadrzędna	Status	Strona z informacjami
Globalny dostęp gLite	GLOBAL	(brak)	Aktywna (Wypisz z usługi)	Informacje
<input checked="" type="checkbox"/> Globalny dostęp QosCosGrid	GLOBAL	(brak)	Aktywna (Wypisz z usługi)	Informacje
<input checked="" type="checkbox"/> Globalny dostęp UNICORE	GLOBAL	(brak)	Aktywna (Wypisz z usługi)	Informacje

Usługi dostępne [Zwiń](#)

Nazwa	Zasięg	Usługa nadrzędna	Status	Strona z informacjami
Dostęp do GPGPU - Cyfronet	ACK	Dostęp do klastra ZEUS	Wypełnij motywację	Informacje
Dostęp do klastra Galera PLUS	TASK	(brak)	Aktywna (Wypisz z usługi)	Informacje
Dostęp do klastra HYDRA	ICM	(brak)	Aplikuj o usługę	Informacje
			Aktywna (Wypisz z usługi)	





PORTAL

Nowy certyfikat



- Wygaśnięcie certyfikatu
- Zgubienie
- Brak hasła

The screenshot shows the PL-Grid portal interface. At the top, there is a navigation bar with links: "Strona główna", "Podręcznik użytkownika", "Helpdesk PL-Grid", and "Moje konto". Below this, a window titled "Certyfikaty SimpleCA" contains the following text:

Portal PL-Grid umożliwia uzyskanie on-line osobistego certyfikatu X.509 o krajowym zasięgu działania ([więcej informacji](#)).

System wykrył, że aktualnie posiada Pani/Pan wygenerowany certyfikat. Możliwość generowania certyfikatu została zablokowana aż do momentu, gdy posiadany certyfikat utraci ważność.

Below the notification, a red box highlights a button with the text: [Chcę odwołać mój certyfikat SimpleCA](#) with a question mark icon.



Zużycie zasobów



Strona główna Podręcznik użytkownika Helpdesk PL-Grid Moje konto Zarządzanie Szkoleniami Zespoły i granty Narzędzia **Accounting**

Normalizacja

Accounting

Raporty wykorzystania zasobów

- [Raport osobisty](#)
- [Raport wykorzystania zasobów przez zespół plgqgocos](#)
- [Raport wykorzystania zasobów przez zespół plgqquantum](#)

Pokaż wykorzystanie od: 2014-01 do: 2014-03 Pokaż informacje o wykorzystaniu w ośrodkach | Pokaż dostępne zasoby | Pokaż ile zasobów pozostało w grantach | Pokaż wykorzystanie przez wszystkich korzystających z grantów użytkownika

Nazwa grantu	Miesiąc	Wykorzystanie [godziny znormalizowane]								Wykorzystanie					
		W miesiącu	Łączne w grantcie	Łączne w grantcie (tylko wykorzystanie z właściwą datą)	CYFRONET-LCG2	ICM	PSNC	TASK	WCSS64	Całościowe		CYFRONET-LCG2		ICM	
										Wykorzystanie z właściwą datą	Całościowe	Wykorzystanie z właściwą datą	Całościowe	Wykorzystanie z właściwą datą	Całościowe
(null)	2014-01	0					0					-	-	-	-
plgkopta2013b	2014-01	463	1 999	1 999	48	415	0	0	0	200	200	30	30	80	80
plgkopta2014a	2014-02	0	0	0				0		0	0	0	0	0	0
(null)	2014-03	59					59					-	-	-	-
plgkopta2014a	2014-03	3	3	3	2	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
plgkopta2013b	2014-03	0	1 999	1 999		0				200	200	30	30	80	80
							525			50	415	59	1	0	



Grupy użytkowników



- Współdzielenie grantu obliczeniowego
- Współdzielony katalog na zasobach obliczeniowych
- Grant można założyć tylko dla grupy użytkowników
- Instrukcja krok po kroku:

<https://docs.cyfronet.pl/pages/viewpage.action?pageId=4260612>



Grant właściwy



- > 1000 h / 6 miesięcy
- > 40 GB
- Rozliczenie za pomocą publikacji
- Z jednego grantu może korzystać zespół użytkowników
- Instrukcja krok po kroku:

<https://docs.cyfronet.pl/pages/viewpage.action?pageId=4260617>





NARZĘDZIA DOSTĘPowe

Aplikacje i zasoby PL-Grid



QCG-Icon



- Aplikacja graficzna napisana dla systemów Windows, Linux oraz Mac OS.
- Umożliwia zlecanie zadań w bardzo prosty i intuicyjny dla użytkownika sposób.
- Aktualnie obsługuje aplikacje: **Matlab, Mathematica, Gamess, LAMMPS, Molpro, Ansys-Fluent, NAMD, Gaussian-09, Ansys-CFX**, skrypty języka **R**, a także dowolne skrypty **BASH**.
- Istnieje możliwość dodania innych aplikacji w zależności od potrzeb użytkowników.
- Pozwala m.in. na podgląd plików wyjściowych w trakcie działania aplikacji, śledzenie zużycia pamięci i monitorowanie efektywności obliczeń.

<http://www.qoscosgrid.org/trac/qcg-icon/>



QCG-Icon



The screenshot displays the QCG-Icon software interface with several windows open:

- Zlecenie zadania Bar23PBC13.gjf**: Shows task name and a list of files to be processed.
- Zlecenie zadania apoa1.namd**: Shows task name and a list of files to be processed, including application and resource settings.
- QCG-Icon**: Main window showing a file list and task parameters.
- Task Execution Log**: Shows a table of task execution times.

z rozpoczęciem	Zakończenie
5 13:40:05	2013.05.15 13:44:37
5 14:01:34	2013.05.15 14:06:36
5 14:07:51	2013.05.15 14:24:57
7 14:38:48	2013.05.17 15:01:56
7 15:09:14	

Zlecenie zadania apoa1.namd configuration details:

- Nazwa zadania: apoa1.namd
- Lista plików:

Nazwa	Rozmiar
apoa1_namd_2013_05_17__14_38_48	
apoa1.namd	794 B
apoa1.pdb	6 MB
apoa1.psf	12 MB
par_all22_popc.xplor	460 B
par_all22_prot_lipid.xplor	152 KB
- Podstawowe Parametry Zadania: Aplikacja: NAMD, Zasób: Hydra (ICM), Kolejka: Wybór automatyczny, Limit czasu: 00:30:00, Limit pamięci: Domyślny.
- Rodzaj aplikacji: Sekwencyjna Równoległa
- Węzłów: 1, Rdzeni na węzeł: 1



QCG-Icon - instalacja



- Paczki instalacyjne programu QCG-Icon można pobrać ze strony <http://www.qoscosgrid.org/trac/qcg-icon/downloads>
- Do używania QCG-Icon wymagane jest posiadanie zainstalowanego oprogramowania **Java Runtime Environment >= 1.6** (<http://www.java.com>)
- Sama procedura instalacji QCG-Icon jest zautomatyzowana, w zasadzie nie wymaga wiedzy informatycznej.
- Przy pierwszym uruchomieniu QCG-Icon należy **wybrać** odpowiednią **domenę obliczeniową** (domyślnie **PLGrid**) oraz **zimportować certyfikat użytkownika** (z pliku lub z usługi KeyFS).



QCG-Icon – zlecenie



Pliki potrzebne do testów udostępnione są pod adresem:

<https://www.qoscosgrid.org/trac/qcg-icon/downloads>

(qcg-icon-examples.zip)

Zlecenie zadania QCG-Icon sprowadza się do następujących kroków:

- Wybrania z menu aplikacji: **Plik -> Zleć Zadanie...**
- Wybrania odpowiedniego (głównego) pliku wejściowego dla wybranej aplikacji (np. pliku z rozszerzeniem *.namd dla aplikacji NAMMD).
- Określenia parametrów dla zadania w oknie zlecenia, takich jak: dodatkowe pliki, wymagania zasobowe, czas obliczeń itd. (większość jest ustawiona na wartości domyślne).
- Naciśnięcia przycisku **Zleć zadanie**.



QCG-Icon (podstawowe parametry zadania)



Zlecenie zadania simplePlot.m

Nazwa zadania

	Nazwa ▲	Rozmiar
<input type="checkbox"/>	simplePlot.m	333 B

Podstawowe Parametry Zadania | Zaawansowane Parametry Zadania | Parameter Sweep

Aplikacja

Zasób

Kolejka

Limit czasu

Limit pamięci

Rodzaj aplikacji Sekwencyjna Równoległa

Węzłów: Rdzeni na węzeł:



QCG-Icon (zaawansowane parametry zadania)



Zlecenie zadania simplePlot.m

Nazwa zadania Dodaj plik...

	Nazwa ▲	Rozmiar
<input type="checkbox"/>	simplePlot.m	333 B

Podstawowe Parametry Zadania | Zaawansowane Parametry Zadania | Parameter Sweep

Grant

Atrybuty węzłów

Licencje

Opis natywny

Identyfikator rezerwacji

Skrypty pomocnicze <brak>

Pozostaw wyniki na zdalnym zasobie

Pobieraj wyniki po zakończeniu zadania

Zleć zadanie Anuluj

Skrypt preprocessingu

Skrypt monitorujący

Skrypt postprocessingu

Ok Anuluj



QCG-Icon – stan zadania i wyniki



- Stan zadań można śledzić korzystając z tabeli głównego okna programu.
 - ✓ Część informacji prezentowana jest w komórkach tabeli.
 - ✓ Dodatkowe informacje można uzyskać korzystając z dymków po ustawieniu kursora myszy na wybranym wierszu.
 - ✓ Klikając 2-krotnie lewym przyciskiem myszy na wybranym wierszu uzyskuje się aktualny podgląd pliku wynikowego aplikacji (stdout).
- Po zakończeniu zadania, podwójne kliknięcie na odpowiadającym mu wierszu powoduje przejście do katalogu z wynikami



QCG-Icon (zarządzanie zadaniami)



Stan zadania	Katalog roboczy	Zasób
Zakończone	C:\Document...ples\matlab	Nova (WCSS)
Uruchomione	C:\Documen... \namd\anna1	Nova (WCSS)

- Skopiuj ID zadania
- Sprawdź stan zadania
- Podgląd
- Skopiuj ścieżkę do zdalnego katalogu
- Zleć ponownie zadanie
- Zleć ponownie zadanie...

Przerwij zadanie



QCG-Icon (informacje o zadaniu)



Wzrosty robocze	Zasób	Czas zlecenia ▲	Rozpoczęcie
t...ples\matlab	Nova (WCSS)	2014.02.14 11:53:05	2014.02.14 11:56:44
... \namd\apoa1	Nova (WCSS)	2014.02.14 13:37:19	2014.02.14 13:40:38

Nazwa: apoa1.namd

ID: 407ec485-5935-4c6d-bb21-ff54586f38f9

Aplikacja równoległa z topologią:

1 węzłów

2 rdzeni na węzeł

Limit czasu: 00:20:00

Limit pamięci: 12G

Kolejka: plgrid

Zdalny katalog: qcg-apoa1_namd-1392381432731

Automatycznie pobierz wyniki: Tak

Komentarz: Job run at Fri Feb 14 at 13:41 on (wn722:ncpus=2:mem=12582912kb)

Węzły robocze: wn722:2

Efektywność [%]: 94

Zajętość pamięci [MB]: 351



QCG-Icon i GaussView (gv-qcg)

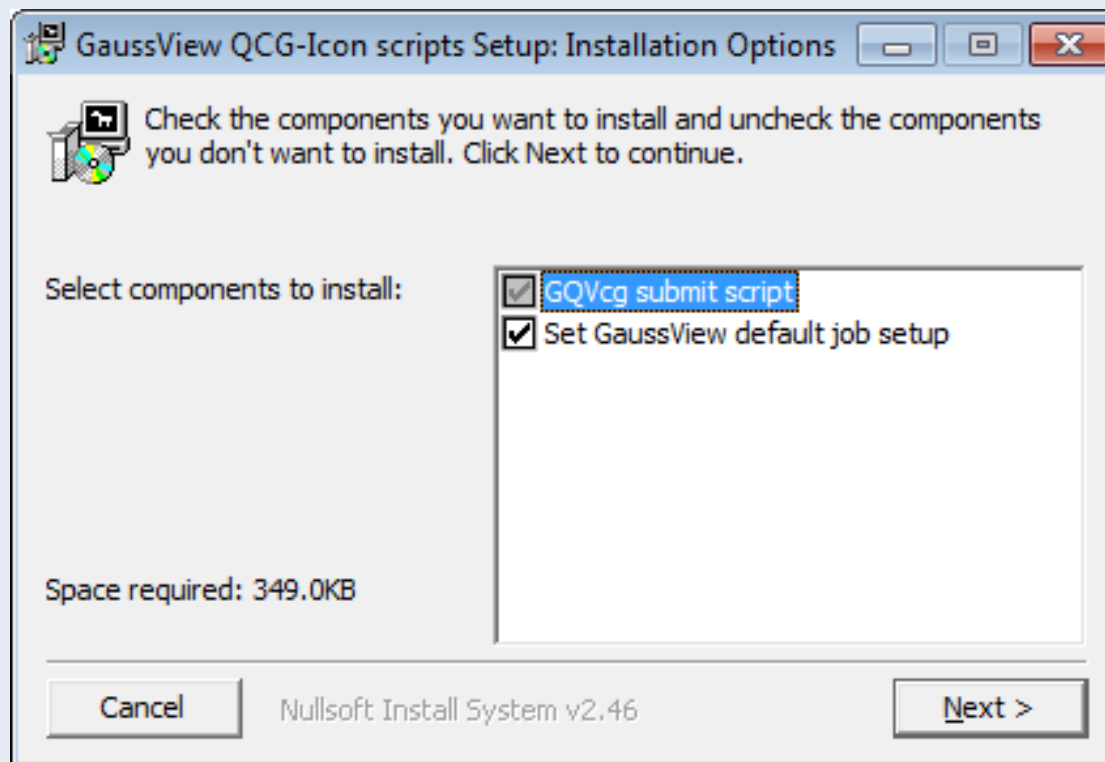


- Aplikacja umożliwia skonfigurowanie GaussView, tak aby obliczenia były zlecane poprzez klienta QCG-Icon
- **Zmienia sposób domyślnego zlecania zadań**
- Transparentny dla GaussView
- Testowany z wersją 5 aplikacji GaussView

<http://www.qoscosgrid.org/trac/qcg-icon/>



gv-qcg instalacja



gv-qcg zlecenie zadania



G2:M1:V1 - Gaussian Calculation Setup

Title: **Naphthalene**

Keywords: **# opt hf/6-31g geom=connectivity**

Charge/Mult.: **0 1**

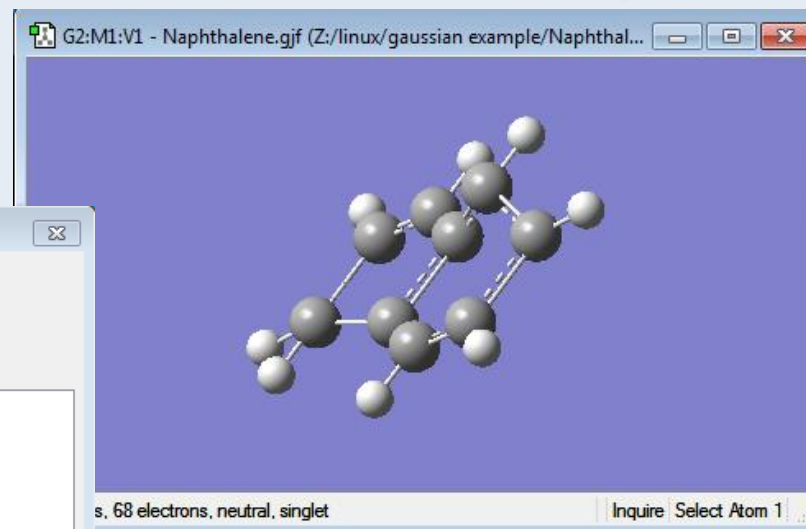
Job Type	Method	Title	Link 0	General	Guess	NBO	PBC	Solvation	Add. Inp.
Optimization									

Optimize to a Use RFO step Use Quadratic Macrostep

Calculate Force Constants Use tight convergence criteria

Additional Keywords:

Scheme:



gv-qcg zlecenie zadania



Submitting Naphthalene.gjf

Task name

Name	Size
<input type="checkbox"/> Naphthalene.gjf	2 KB

Basic Task Properties | Advanced Task Properties | Parameter Sweep

Application:

Resource:

Queue:

Wall time:

Memory limit:

Application type: Sequential Parallel



gv-qcg wykonywania zadania



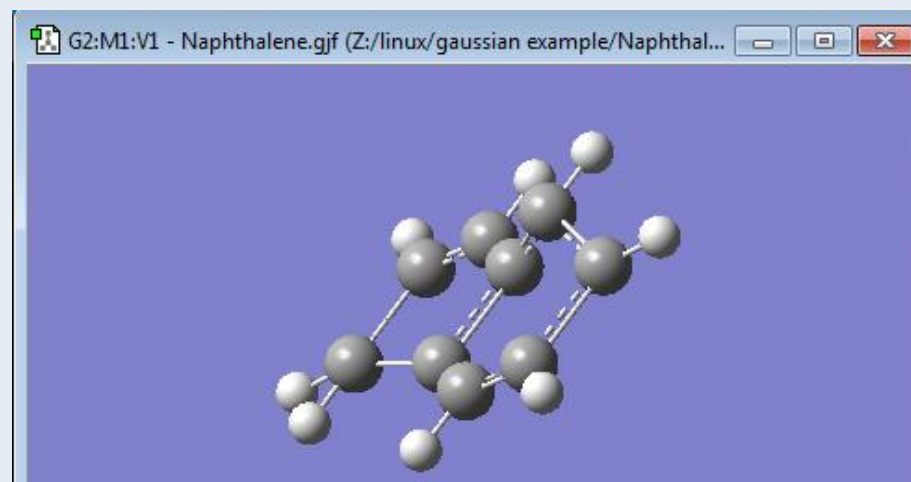
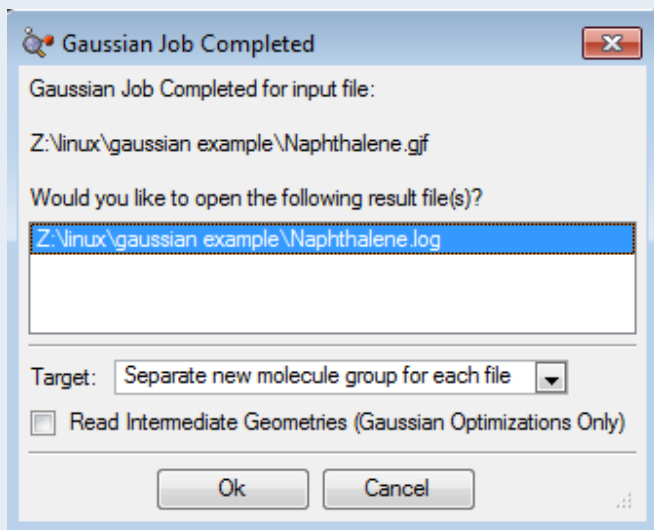
QCG-Icon

File View Help

ID	Name	Application	Application's ver...	Main File	Status	Work dir	Resource	Submission time	Start time	End time	Sweep Idx
2fd5e05...5f382573	Naphthalene.gjf	Gaussian-09		Naphthalene.gjf	Finished	C:\Users...phtalene	Hydra (ICM)	2014.01...09:39:11	2014.01...09:39:11	2014.01...09:41:29	
129f315...b658c5b6	Naphthalene.gjf	Gaussian-09		Naphthalene.gjf	Executing	C:\User...-wd-4404	Hydra (ICM)	2014.03...16:22:00	2014.03...16:22:43		



gv-qcg zakończenie zadania



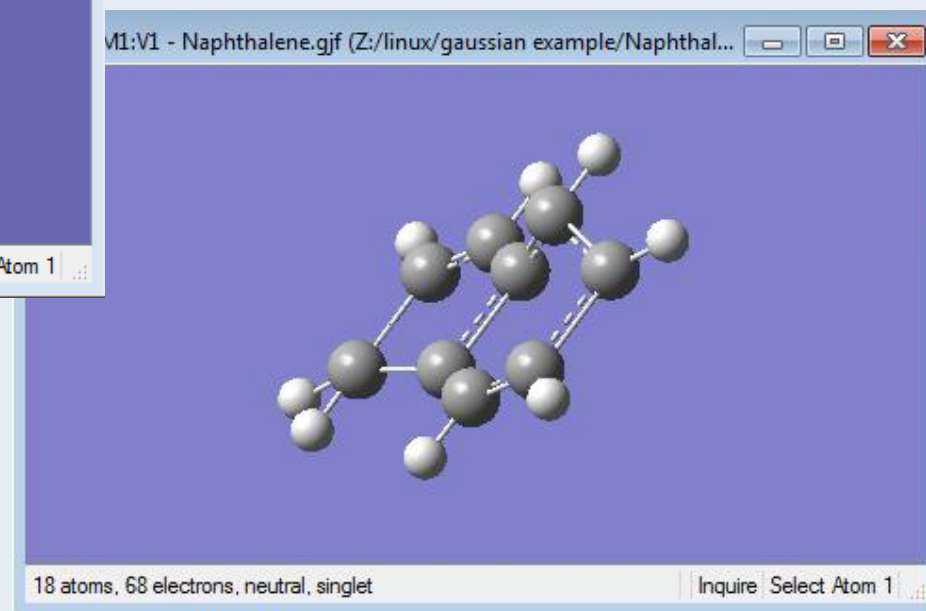
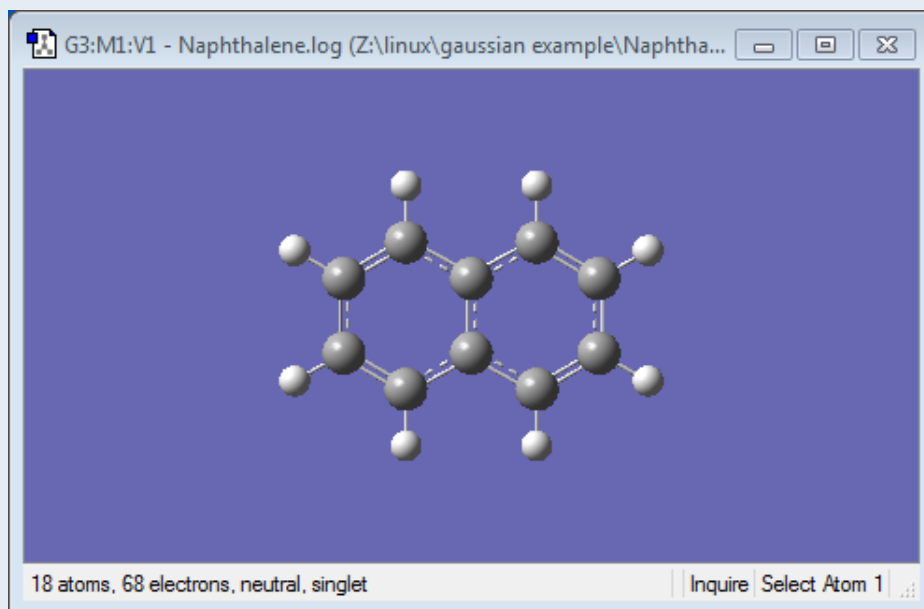
QCG-Icon

File View Help

ID	Name	Application	Application's ver...	Main File	Status	Work dir	Resource	Submission time	Start time	End time	Sweep Idx
2fd5e05...5f382573	Naphthalene.gjf	Gaussian-09		Naphthalene.gjf	Finished	C:\Users...pthalene	Hydra (ICM)	2014.01...09:39:11	2014.01...09:39:11	2014.01...09:41:29	
129f315...b658c5b6	Naphthalene.gjf	Gaussian-09		Naphthalene.gjf	Finished	C:\User...-wd-4404	Hydra (ICM)	2014.03...16:22:00	2014.03...16:22:43	2014.03...16:23:47	



gv-qcg wyniki



QCG-SimpleClient (klient tekstowy)



- Obsługa zbliżona do poleceń systemu kolejkowego, oparta na intuicyjnych dyrektywach **#QCG**
- Umożliwia większą kontrolę nad zleceniem zadania, transferem plików we/wy, wykorzystaniem modułów oraz ustawień środowiska.
- Wykorzystuje zaawansowane mechanizmy wyboru optymalnych zasobów do wykonania zadania.
- Możliwość uruchamiania zadań interaktywnych oraz „podłączania się” do aktualnie wykonywanych zadań
- Monitorowanie wyjścia i stanu zadań - notyfikacje poprzez e-mail oraz XMPP (Jabber)

```
### QCG Application Monitoring Message ###  
Content is:  
ENERGY:3230068.2854  
  
Activity ID: J1372278050682_apoa1-test_ntf_9901  
User: plgbosak  
Timestamp: 2013-06-26T20:23:39Z
```

```
### QCG-Broker Event Message ###  
Job ID: J1372278050682_apoa1-test_ntf_9901  
Task ID: task  
- Note: Apoa1 with notifications  
- Timestamp: 2013-06-26T22:21:29.507+02:00  
- Status: RUNNING
```

Dokumentacja w podręczniku użytkownika

<http://docs.plgrid.pl/qcg-client>



QCG-SimpleClient (klient tekstowy)



Polecenia

qcg-cancel

qcg-clean

qcg-connect

qcg-info

qcg-list

qcg-peek

qcg-proxy

qcg-refetch

qcg-resub

qcg-sub

qcg-rcancel

qcg-reserve

qcg-rinfo

qcg-rlist

Dyrektywy #QCG

application

argument

environment

error/output

grant

host

memory

nodes / procs

note

notify / watch-output

preprocess / postprocess

queue

reservation

stage-in-dir/file

stage-out-dir/file

walltime

... więcej

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

```
#QCG host=nova
```

```
#QCG queue=plgrid
```

```
#QCG note=Naphthalene
```

```
#QCG output=${JOB_ID}.output
```

```
#QCG error=${JOB_ID}.error
```

```
#QCG stage-in-file=Naphthalene.gjf
```

```
#QCG stage-in-file=gaussian.ntf
```

```
#QCG stage-out-dir=->result
```

```
#QCG nodes=1:1
```

```
#QCG walltime=PT10M
```

```
#QCG notify=xmpp:tomasz.piontek@plgrid.pl
```

```
#QCG watch-output=20,gaussian.ntf
```

```
#QCG application=g09
```

```
#QCG argument=Naphthalene.gjf
```





USŁUGI QCG



QCG-Monitoring



- Pozwala na bieżąco monitorować postęp długotrwałych eksperymentów
- Wspiera prezentację wyników w postaci tekstowej, tabel, wykresów, obrazów itd.
- Dostępny schemat dla monitorowania aplikacji Gaussian
- Dostęp poprzez portal PL-Grid



QCG-Monitoring



Rezerwacja zasobów



W uzasadnionych przypadkach możliwe jest uzyskanie gwarancji dostępu do zasobów obliczeniowych w określonym przedziale czasowym (rezerwacja).

Rezerwacja zasobów możliwa jest przy użyciu:

- QCG-SimpleClient
- QCG-Reservation Portal (QCG-QoS-Access)



Rezerwacja zasobów



QosCosGrid Tools & Services

QCG-Access QCG-Monitoring Configuration

Count of Reservations on the screen: Reservation range: Refresh Create Reservation

Reservation ID	Start time	End time	Resource	Status
R1368515738190_RESERVATION_9226	Tue May 14 11:20:00 GMT+0200 2013	Tue May 14 11:22:00 GMT+0200 2013	6	FINISHED
R1368453492238_RESERVATION_9226				FINISHED
R1368452105122_RESERVATION_9226				FINISHED
R1368451751472_RESERVATION_9226				FAILED
R1368451596571_RESERVATION_9226				FAILED

Cancel Selected Reservation

Reservation information:

ID: R1368515738190
Start time: Tue May 14 11:20:00 GMT+0200 2013
End time: Tue May 14 11:22:00 GMT+0200 2013
Status: FINISHED
Slots: 6
Resources:
Host: grass1-dev.ma
Slots: 6
Local ID: R2466
Nodes: 1
Node: grass1 Slots: 6

Create Reservation

Time Window:
Start: :
End: :

Reservation Duration:
Hours: Minutes:

Resources:
Cluster:

Reserve Slots:
 Reserve Nodes: Slots per Node:

Create Reservation Close

Reservation information:

ID: R1368528549154_RESERVATION_7716
Start time: Wed May 15 16:37:00 GMT+0200 2013
End time: Wed May 15 16:39:00 GMT+0200 2013
Status: RESERVED
Slots: 1
Resources:
Host: galera.task.gda.pl
Slots: 1
Local ID: plgrabowski.0
Nodes: 1
Node: gp0254 Slots: 1





CZĘŚĆ PRAKTYCZNA

<https://www.qoscosgrid.org/trac/qcg-icon/downloads>

Gdzie znaleźć informacje



- **PLGrid Plus**

Strona główna <http://plgrid.pl/plus>

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

Podręczniki http://www.plgrid.pl/podrecznik_uzytkownika

- **QCG**

Strona główna <http://www.qoscosgrid.org/>

Podręcznik użycia w PL-Grid <http://docs.plgrid.pl/qcg>

QCG-Icon <http://www.qoscosgrid.org/trac/qcg-icon>

QCG-Client <http://docs.plgrid.pl/qcg-client>



qcg@plgrid.pl

