

Astrofizyka: InSilicoLab for Astrophysics (wycofana)



Usługa Astrofizyka: InSilicoLab for Astrophysics została wycofana

Krótki opis usługi

Usługa *InSilicoLab* ma na celu wsparcie uruchamiania złożonych astrofizycznych eksperymentów obliczeniowych na infrastrukturze PL-Grid. Pozwala na przygotowanie niezbędnych danych wejściowych (t.j. modułów zadających warunki początkowy i parametry symulacji) dla wspieranych kodów obliczeniowych, wysłanie przygotowanych zadań na grid i ich uruchomienie, a następnie zebranie plików wynikowych i ich wstępną analizę.

Dzięki zapisywaniu danych w katalogach sieciowych, możliwe jest przekazywanie danych z jednego eksperymentu obliczeniowego do drugiego oraz dostęp do nich niezależnie od komputera, z którego zlecono zadania. Możliwość zapamiętania eksperymentu pozwala na łatwe odtworzenie cyklu obliczeniowego.

Eksperymenty usługi InSilicoLab for Astrophysics ułatwiają przeprowadzanie symulacji numerycznych bez konieczności własnoręcznej i często bardzo skomplikowanej kompilacji kodów astrofizycznych. Usługa przeznaczona jest dla osób początkujących.

Obecnie wspierane jest przeprowadzanie eksperymentów kodem obliczeniowym **Piemik**.

Aktywowanie usługi

Aby skorzystać z usługi *InSilicoLab for Astrophysics* należy aktywować ją w [Portalu PL-Grid](#). Jest ona dostępna w katalogu usług w dziale "Platforma dziedzinowa: AstroGrid-PL".

Dodatkowo wymagane jest aktywowanie usługi "Globalny dostęp gLite" dostępnej w katalogu usług w dziale "Usługi globalne". **Uwaga:** Zaraz po aktywowaniu usługi "Globalny dostęp gLite" informacje na temat konta użytkownika muszą zostać przekazane do infrastruktury - ten proces może trwać maksymalnie do 6 godzin. W tym czasie może nie być dostępna pełna funkcjonalność (uruchamianie eksperymentów oraz pobieranie danych).

Informacje dotyczące usług i ich aktywowania można znaleźć w rozdziale "Usługi" niniejszego podręcznika.

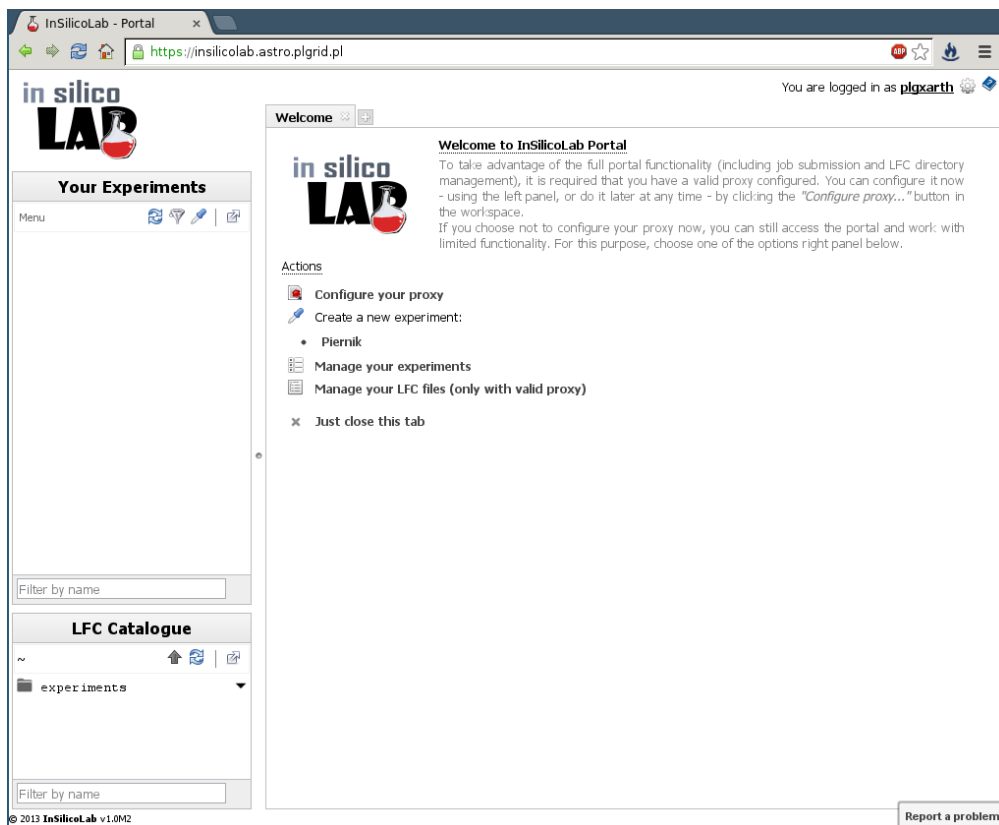
Pierwsze kroki

Należy połączyć się z serwerem usługi

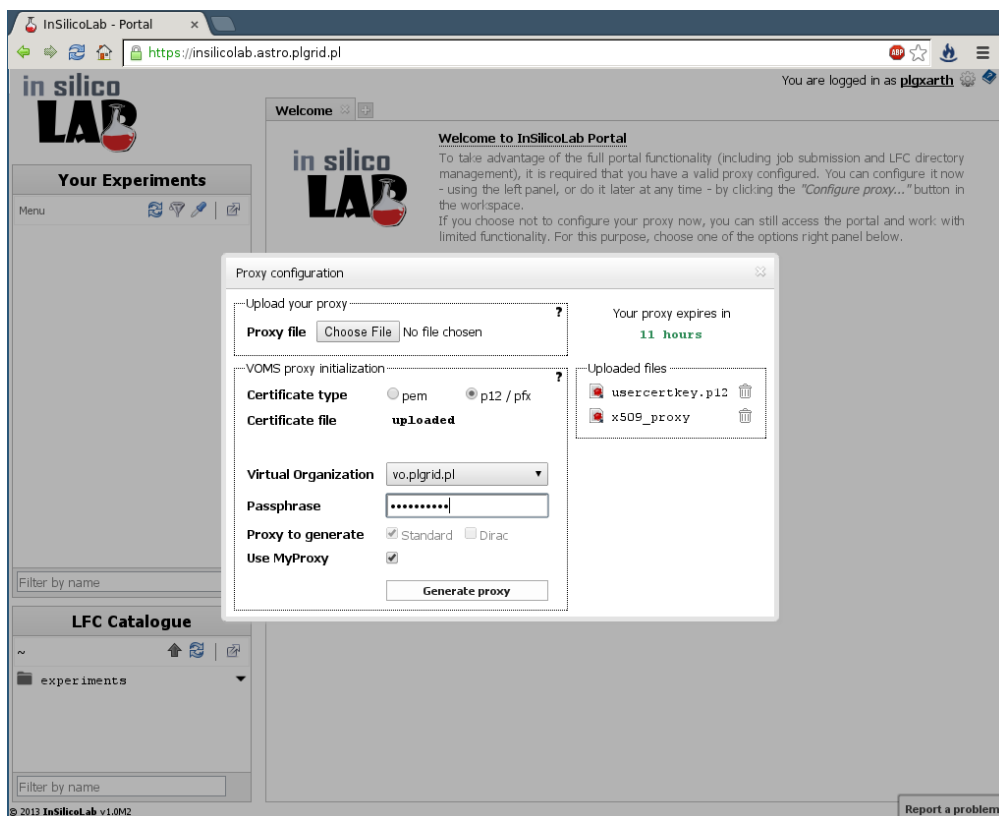
<http://insilicolab.astro.plgrid.pl/>

Po wejściu do usługi otwiera się ekran. Jeśli nie byliśmy wcześniej zalogowani do usługi, dostępny jest dla nas jedynie ekran anonimowego użytkownika. Logowanie do własnego konta następuje po przyciśnięciu przycisku **Log in...** i jest możliwe jest na dwa sposoby:

- Logowanie poprzez certyfikat zarejestrowany w przeglądarce użytkownika (nasze dane zostaną sczytane z certyfikatu)
- Logowanie poprzez zintegrowany system dostępowy (OpenID) dla infrastruktury PL-Grid. W tym wypadku zostaniemy przekierowani na stronę OpenID dla PL-Grid i poproszeni o wpisanie nazwy użytkownika i hasła (tych samych które podajemy w [Portalu PL-Grid](#)) lub wysłany zostanie automatycznie certyfikat umieszczony w przeglądarce. Jeśli usługa *InSilicoLab for Astrophysics* nie była aktywna wcześniej, zostanie ona aktywowana automatycznie po zaakceptowaniu odpowiedniego komunikatu. Po zalogowaniu zostaniemy automatycznie przekierowani z powrotem na stronę usługi.



W celu przeprowadzenia obliczeń niezbędne będzie skonfigurowanie odpowiedniego certyfikatu *proxy* przez kliknięcie na link **Configure your proxy**:



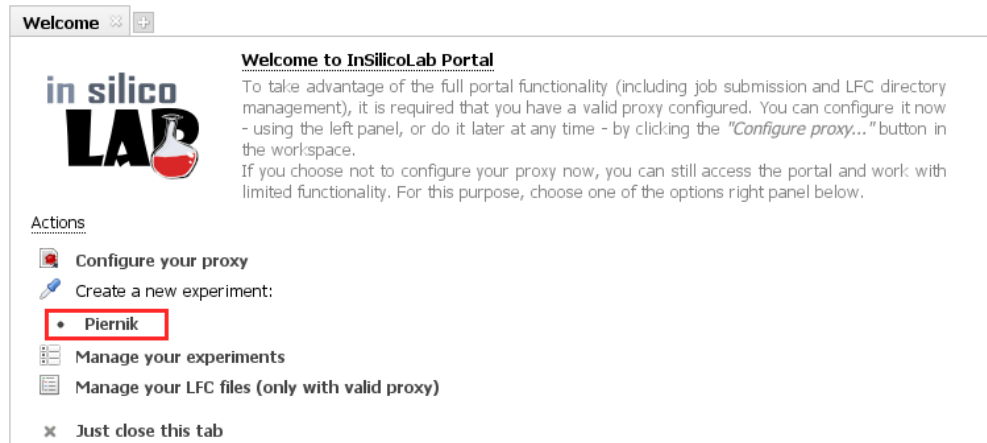
Certyfikat proxy konieczny jest do przeprowadzania obliczeń z wykorzystaniem infrastruktury PL-Grid, a także przeglądania danych zgromadzonych w zasobach tej infrastruktury. Nie jest natomiast konieczny do przeglądania konta użytkownika i zapisanych przez niego analiz, ani do wstępnego przygotowania eksperymentu przy użyciu astrofizycznych kodów numerycznych.

Istnieją dwie możliwości konfiguracji proxy w portalu:

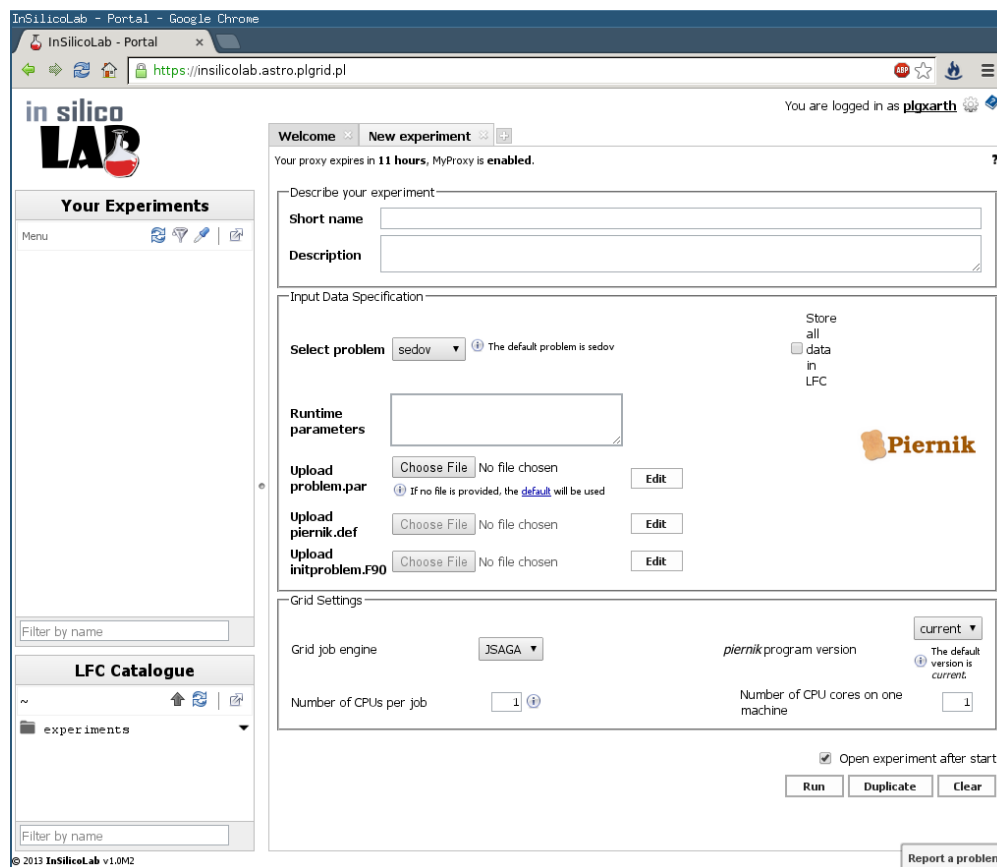
1. Załadowanie istniejącego proxy - wygenerowanego uprzednio na infrastrukturze. Instrukcja, jak wygenerować takie proxy, dostępna jest po kliknięciu w pytajnik w polu **Upload your proxy**. Jest to opcja bezpieczniejsza dla użytkownika, ale wymaga każdorazowego ładowania proxy po upływie jego ważności (12 godzin).
2. Generacja proxy z poziomu portalu. Aby wygenerować proxy w portalu, należy załadować do niego pliki certyfikatu i klucza w formacie PEM (najczęściej są to *usercert.pem* i *userkey.pem*) lub PKCS12 (np. *usercert.p12*). Jest to czynność jednorazowa i nie będzie potrzeby ponawiania jej w przyszłości, jeśli certyfikat użytkownika nie ulegnie zmianie. Następnie należy wybrać wirtualną organizację - dla infrastruktury PL-Grid jest to **vo.plgrid.pl**, podać hasło do załadowanego klucza (UWAGA: hasło nie jest przechowywane nigdzie w systemie) oraz kliknąć przycisk **Generate proxy**. Zaznaczenie opcji **Use MyProxy** da nam możliwość automatycznego przedłużania certyfikatu proxy dla uruchomionych zadań do 7 dni. Dodatkowe instrukcje (m. in. instrukcje postępowania w przypadku, kiedy certyfikat użytkownika jest w formacie innym niż PEM) dostępne są po kliknięciu w pytajnik w polu **VOMS proxy initialization**.

W obu przypadkach, jeśli proxy zostało skonfigurowane poprawnie, zostanie wyświetlona na zielono ilość pozostałego czasu ważności proxy w portalu (w polu **Your proxy expires in**).

Po skonfigurowaniu certyfikatu proxy można przystąpić do właściwego eksperymentu. W celu uruchomienia symulacji numerycznej z menu **Create a new experiment** należy wybrać pozycję **Piernik**.



W przeglądarce otworzy się karta nowego eksperymentu



Identyfikację eksperymentu wprowadzamy podając jego krótką nazwę oraz (opcjonalnie) dłuższy opis. W przypadku niepodania krótkiej nazwy wykorzystane zostanie pole **Title** formatki aplikacji kwantowochemicznej. Jeśli oba pola zostaną puste, jako krótka nazwa użyty zostanie tekst "(no title)".

Describe your experiment

Short name

Description

Podstawowy eksperyment umożliwia uruchomienie predefiniowanego testowego problemu numerycznego z listy **Select Problem**:

- *sedov* - warunkiem początkowym jest porcja energii umieszczona w jednorodnym gazie. W rezultacie w domenie obliczeniowej powstaje sferycznie symetryczna fala uderzeniowa.
- *otvortex* - sinusoidalne zaburzenie pola prędkości gazu i pola magnetycznego prowadzące do wzbudzenia silnych fal uderzeniowych i turbulencji - wir Orszaga-Tanga jest dobrze znanym problem do testowania naddźwiękowej turbulencji magneto hydrodynamicznej.
- *tearing* - warunek początkowy zawiera dwie płaszczyzny prądowe (przeciwnie skierowane wektory pola magnetycznego). Test sprawdza działanie modułu rezystancji magnetycznej, prowadzi do utworzenia się charakterystycznych "wysp magnetycznych".

W trakcie wykonywania eksperymentu następuje zdalne uruchomienie zadania wsadowego, które ściąga bieżącą wersję kodu Piernik z repozytorium, kompiluje go, a następnie uruchamia zadanie zgodnie z podanymi parametrami eksperymentu.

Po wybraniu jednego z trzech możliwych eksperymentów testowych (*otvortex* na poniższym przykładzie)

Input Data Specification

Select problem The default problem is sedov

Runtime parameters

Upload problem.par No file chosen If no file is provided, the default will be used

Upload piernik.def No file chosen

Upload initproblem.F90 No file chosen

Store all data in LFC



dane wejściowe niezbędne do uruchomienia eksperymentu numerycznego kodem **Piernik**, t.j.:

1. plik *piernik.def* konfigurujący używane moduły fizyczne wybierane na etapie kompilacji kodu,
2. plik *initproblem.F90* zawierający moduł w języku FORTRAN 2003 opisujący warunek początkowy,
3. plik *problem.par* z parametrami używanymi przez kod na etapie wykonywania symulacji,

zostaną ściągnięte z zewnętrznego repozytorium. Pliki domyślne można obejrzeć i edytować bezpośrednio w portalu przy pomocy odpowiedniego przycisku **Edit**.

Input Data Specification

Select problem The default problem is sedov

Runtime parameters

Upload problem.par No file chosen If no file is provided, the default will be used

Upload piernik.def No file chosen

Upload initproblem.F90 No file chosen

Store all data in LFC



Edit uploaded problem.par

Po jego naciśnięciu zostanie otworzone okno zawierające zawartość danego pliku

```

$BASE_DOMAIN
  n_d = 64, 64, 64
  bnd_xl = 'per'
  bnd_xr = 'per'
  bnd_yl = 'per'
  bnd_yr = 'per'
  bnd_zl = 'per'
  bnd_zr = 'per'
  xmin  = -1.0
  xmax  = 1.0
  ymin  = -1.0
  ymax  = 1.0
  zmin  = -1.0
  zmax  = 1.0
/

$MPI_BLOCKS
  psize = 1, 1, 1
/

$UNITS
  units_set = 'cgs'
/

$RESTART_CONTROL
/

$END_CONTROL

```

Save

Wszelkie modyfikacje należy zatwierdzić klikając na pole **Save** w prawym dolnym rogu okna.

Eksperyment uruchomiony z domyślnymi ustawieniami jako rezultat udostępni tylko ostatni plik wynikowy z kodu **Piernik** oraz szereg plików z wizualizacją danych. W celu zebrania w katalogu LFC wszystkich plików wynikowych należy zaznaczyć pole wyboru **Store all data in LFC**.

Przed uruchomieniem eksperymentu należy wybrać żadaną liczbę rdzeni obliczeniowych w polu **Grid Settings**.

Grid Settings

Grid job engine	JSAGA ▼	<i>piernik</i> program version	current ▼ The default version is current.
Number of CPUs per job	5 ⓘ	Number of CPU cores on one machine	1

Kliknięciem przycisku **Run** wydajemy polecenie wysłania zadania do wykonania na infrastrukturze PL-Grid. Aktualny stan zadania możemy śledzić w polu **Job Execution Status**.

Job Execution Status

Job 01: RUNNING ×	Input File	Index 1 Job ID https://lb02.grid.cyf-kr.edu.pl:9000/AL3poWA_gsFrtHBWUhRIew Status running ⓘ Additional status JSAGA:RUNNING_QUEUED Live log http://chemportal.grid.cyfronet.pl:8080/livelogging/view.php?id=1374490962032-job1 LFC location /grid/v0.plgrid.pl/insilicolab-test/c.PL_o.PL-Grid_o.Uzytkownik_o.CYFRONET_cn.Kacper_Kowalik_cn.plgxarth/experiments/experiment-1374490962032/job-01 ▶ Download job files
--	--	--

Po zakończeniu zadania (*Status: finished*) wyniki są dostępne po rozwinięciu pola **Download job files**, natomiast predefiniowane wizualizację pojawiają się w polu **Results**. Ponadto standardowe wyjście oraz standardowe wyjście błędu (*stdout* oraz *stderr*) są dostępne ikonki "notesika" znajdującej się obok statusu zadania, a także w polu **Download job files**, jako plik *output.txt*.

Job Execution Status

Input File

Job 01: **FINISHED**

Index

1

Job ID

https://lb02.grid.cyf-kr.edu.pl:9000/t33cKJzBG2TLyok3AMKdDA

Status

finished

Additional status

JSAGA:RUNNING_POST_STAGING

Live log

http://chemportal.grid.cyfronet.pl/livelogging/view.php?id=1375269380520-job1

LFC location

/grid/vo.plgrid.pl/insilicolab-test/c.PL_o.PL-Grid_o.Uzytkownik_o.CYFRONET_cn.Kacper_Kowalik_cn.plgxarth/experiments/experiment-1375269380520/job-01

Download job files

Collapse

Collapse

Abort all jobs

Download All Job IDs

Results

Job No.	Result
1	Result files available

otvortex_rs4_0004_prei.png

otvortex_rs4_0003_prei.png

otvortex_rs4_0000_prei.png

otvortex_rs4_0002_prei.png

otvortex_rs4_0001_prei.png

otvortex_rs4_0005_prei.png

Domyślnie, pliki wynikowe są dostępne do odczytu dla każdego użytkownika mającego uprawnienia do korzystania z katalogu LFC. Jeżeli jest to sytuacja niepożądana istnieje możliwość zmiany uprawnień, np. przy użyciu polecenia `lfc-chmod` na serwerze UI, bądź korzystając z **LFC Catalogue**:

Welcome

LFC Catalogue

Start in Home directory

Custom path (absolute):

Upload file

File to upload

Wybierz plik

Nie wybrano pliku

☐ Upload to home directory

Refresh

Contents of /grid/vo.plgrid.pl/insilicolab-test/c.PL_o.PL-Grid_o.Uzytkownik_o.CYFRONET_cn.Kacper_Kowalik_cn.plgxarth

experiments

experiment-1368949793511

experiment-1368949826842

experiment-1368950004002

experiment-1368958175636

job-01

output.txt

sedov_final_tst_0008.h5

sedov_final_tst_0008_denn.png

sedov_final_tst_0008_enen.png

sedov_tst_000.log

sedov_tst_000.ts1

sedov_tst_0000_denn.png

sedov_tst_0000_enen.png

sedov_tst_0001_denn.png

sedov_final_tst_0008.h5 details

Download

Rename

Move...

Change permissions

Delete

Owner

/C=PL/O=PL-Grid/O=UzKowalik/CN=plgxarth

Group

vo.plgrid.pl

Permissions

rw-rw-r--

Size

544 KB

Last modified

2013 May 19 12:15:39

Physical replicas

srm://dpm.cyf-kr.edu.pl/dpm/cyf-kr.edu.pl/home/vo.plgrid.pl/generated/2013-05-19/file338803ee-2a09-48f5-9c2a-02f9956bf8d9

Metadata information

No metadata information associated with this file.

Zaawansowane użycie

Wybranie w opcji **USER** z listy **Select Problem** pozwala uruchomić dowolny problem numeryczny użytkownika, pod warunkiem wysłania poprawnych plików: `problem.par`, `piernik.def`, `initproblem.F90`.

Gdzie szukać dalszych informacji?

- Strony pomocy dla użytkowników PL-Grid
- Strona główna kodu Piernik