

## Contido

- Límites de espazo en disco dos servidores de cálculo
- Directorio para intercambio de información entre os servidores de cálculo
- Actualización, modificación e baixa de aplicacións instaladas
- Aviso de parada programada
  
- Conferencia: Large scale computations and computer requirements for WIEN2k
- Como poñerse en contacto en caso de problemas
- Enlaces esenciais.

### Límites de espazo en disco dos servidores de cálculo.

Co fin de garantir unha distribución equitativa e óptima dos recursos, todos os usuarios teñen asignado un límite máximo de ocupación para o seu directorio home nos servidores de cálculo. Tecnicamente, este límite recibe o nome de "quota".

Estudouse o consumo medio en disco dos usuarios e o espazo dispoñible para determinar este valor. Actualmente as quotas son as seguintes:

Cluster SVG: 6Gb  
Superdome: 10Gb  
Cluster HPC320: 10Gb

Estes datos son por usuario e directorio home

En calquera momento vostede pode coñecer o estado da súa quota, utilizando o comando quota, o que realizará unha saída por pantalla do estilo.

Filesysteme

blocks

quota

limit

grace

---

files

quota

limit

grace

/dev/sdb1

1507204

6000000

9000000

63068

110000

110000

O comando quota encárgase de ler os ficheiros onde reside a quota imposta polos administradores e o espazo actual que ten ocupado, de feito que despois de obter esta saída por pantalla, interpretaremos o seguinte:

Filesystem: onde está aloxado o noso directorio home, pode ser unha ip ou un sistema de arquivos como neste caso

Blocks: tamaño que temos ocupado actualmente, este valor mantén unha aproximación de 1000000 a 1Gb de espazo consumido

Quota: como o seu nome indica, tamaño que ten permitido, neste exemplo equivale a 6Gb aproximadamente

Limit: límite permitido, manexamos sempre unha marxe de erro, neste caso de 9Gb máximo

files: ficheiros que existen, posto que a quota pode establecerse a un número de ficheiros máximo

---

quota e limit: número máximo permitido e marxe, neste exemplo non hai marxe para ficheiros extra.

O sistema avisaríanos cando nos pasáramos do límite, e de como non é posible escribir máis datos.

É posible que para determinadas necesidades de cálculo este espazo en disco non sexa suficiente, e para iso o CESGA ofrece un servizo de almacenamento de datos.

Para acceder a este servizo é necesario presentar unha solicitude de almacenamento para ampliar dita quota. Dita solicitude a pode atopar no seguinte enlace.

En calquera caso e se existe algunha dúbida podería poñerse en contacto connosco en

Directorio para intercambio de información entre os servidores de cálculo.

Cada un dos servidores de cálculo posúe o seu propio espazo de almacenamento de datos ou directorio home, ademais de contar con acceso ao servizo de almacenamento masivo de datos.

Non obstante, nalgúns casos os usuarios teñen que realizar tarefas en varios servidores cos mesmos datos ou, por exemplo, utilizar os resultados producidos nun servidor como datos de entrada noutro servidor. Para permitir este movemento de datos entre os servidores, está dispoñible un directorio COMPARTIDO para cada usuario, cun contido visible entre todos os servidores de cálculo. Isto evita ter que realizar transferencias de datos utilizando protocolos como sftp ou scp entre os servidores.

En caso de querer dispoñer deste directorio, é suficiente con enviar un email a solicitándoo, xa que por defecto non está configurado nas contas de usuario.

Actualización, modificación e baixa de aplicacións instaladas.

Para unha mellor cobertura das necesidades dos seus usuarios, o CESGA ten xa a disposición dos mesmos tres novos paquetes de software científico instalados nos seus servidores.

- Instalada nova versión de Migrate, software relevante en Bioinformática e que permite estimar velocidades de migración e tamaños efectivos de poboación. A versión 2.0.6 deste programa foi instalada en todos os servidores de cálculo do CESGA (Superdome/HPC320/SVGD).

- Instalados os programas de simulación SPIDER versión 13.00 Oct 2005 e BSOFTEC versión 1.3.0 no SVGD e no HPC320. Estes programas de procesamento de imaxes obtidas por técnicas de microscopía electrónica complementan ao xa instalado EMAN dentro deste campo.

O CESGA procederá a dar de baixa a un total de once aplicacións de cálculo científico debido á falta de demanda das mesmas entre os usuarios do Centro. Estas aplicacións, revisada a súa funcionalidade, apenas tiveron uso nos últimos dous anos.

Como un dos servizos prestados aos usuarios do CESGA está a instalación e mantemento das aplicacións de cálculo científico usadas nos superordenadores do centro. Para mellorar o servizo, é necesario revisar o grado de uso das aplicacións instaladas e, periodicamente, actualizar a lista de aplicacións soportadas. Dentro desta revisión atopouse que as seguintes aplicacións instaladas e soportadas polo CESGA non tiveron uso durante os dous últimos anos:

- amsol
- clustalw
- combiner

- gamesol
- genehunter
- genscan
- glimmerm
- mopac
- mumer
- phylip
- superlink

Por este motivo, procederáse a dar de baixa ás mesmas a partir do 1 de abril de 2006. Se por algún motivo esta acción puidese repercutir no seu traballo, por favor, pónase en contacto co Departamento de Aplicacións e Proxectos a través de correo electrónico ou vía telefónica (981 569816)

Aviso de parada programada.

O vindeiro martes 4 de abril realizaremos unha parada programada de todos os servidores de cálculo e almacenamento do centro, polo que o servizo non estará dispoñible entre as 7:00 e as 13:00 dese día.

Desculpen as molestias.

Conferencia: Large scale computations and computer requirements for WIEN2k.

Data: 27.03.2006

Horario: de 11:00 a 13:00h

Lugar :: CESGA, Avda. de Vigo, s/n (Campus Sur) - Santiago de Compostela

Contacto ::

WIEN2k is a widely used application in materials science and allows to compute the electronic structure of solids on the basis of quantum mechanics and density functional theory. It uses augmented plane waves as basis set and the equations lead to a large eigenvalue problem, which must be solved self-consistently.

A realistic simulation of modern materials may require large system sizes (typically, matrices range from a trivial size of 5000x5000 up to 50000x50000 depending on the specific problem) and thus significant computational power. A grid environment can provide a proper platform but must deal with the complexity of an application like WIEN2k. The newly developed W2GRID attempts to provide the necessary middleware with a specific functionality for WIEN2k.

Como poñerse en contacto en caso de problemas.

Cando exista algún problema tanto a nivel de aplicacións como de sistemas pode poñerse en contacto cos departamentos usando o correo electrónico e .

Para unha mellor e rápida axuda aos seus problemas lle recordamos que nos detalle ao máximo o qué e o cómo acontece.

Exemplo malo:

---

correo de xxx@yyyy.zz a  
Ola teño un problema cos meus traballos, ¿poderían botarme unha man?  
Atentamente XXX

Exemplo bo:

correo de xxx@yyyy.zz a

Ola, son o usuario XXX, ultimamente cando envio un traballo ao SVGD non saen os resultados desexados ou en moitas ocasións non obteño nin resultados, algúns traballos que erraron foron os seguintes:

254157  
214578  
124586

Mirei nos ficheiros de saída que xera (ficheiro.e254157 e STDIN.o254157) e non consigo ver o problema.  
¿Algunha idea?  
Atentamente XXX

Para máis información de como enviar as súas consultas poden acudir ao seguinte enlace FAQ.

Enlaces esenciais.

Documentación e manuais dos sistemas de cálculo, almacenamento e aplicacións:  
<http://doc.cesga.es>

Uso do sistema de colas no CESGA:  
<http://www.cesga.es/content/view/431/53>

Guía básica de Unix:  
<http://iie.fing.edu.uy/~vagonbar/unixbas/>

FAQs de computación:  
[http://www.cesga.es/component/option,com\\_simplefaq/Itemid,16](http://www.cesga.es/component/option,com_simplefaq/Itemid,16)

Monitorización en tempo real (máximo 30 minutos de retardo) do estado dos servidores e as colas:  
Estado sistemas

Como solicitar axuda:

: para calquera aspecto relacionado cos servidores de cálculo, sistemas de colas, almacenamento, etc&hellip;

: en caso de consultas relacionadas co uso de aplicacións, peticións de novas aplicacións, etc&hellip;