

## Contido

- Nova versión (beta 0.2) da utilidade g03mem para o cálculo dos recursos necesarios en traballos Gaussian 03
- Instaladas versions optimizadas das librerías BLAS/LAPACK para todas as arquitecturas presentes no servidor SVGD
- Traballos que non terminan correctamente por falta de tempo de execución
- CURSO  
"Programación paralela do superdome mediante directivas OPENMP"
- Resultados da enquisa de satisfaccion dos usuarios
- Enlaces  
esenciais.

Nova versión (beta 0.2) da utilidade g03mem para o cálculo dos recursos necesarios en traballos Gaussian 03.

g03mem da unha estimación aproximada da memoria requerida por un traballo de Gaussian 03 en concreto.

A sintaxe de este comando é:

```
g03mem gaussian_input_file
```

Esta utilidade calcula o número de bases e da unha estimación de CPU/memoria/disco requeridos para a execución con diferentes algoritmos. Adicionalmente cando encontra a palabra clave freq dentro da ruta do traballo executa a utilidade freqmem adecuadamente.

Exemplo:

```
g03mem /opt/cesga/g03/tests/com/test135.com
```

Este script está en fase experimental e existen casos aún non soportados (oniom, force ...).

Información adicional

---

Adicionalmente non é descartable a presenza de bugs polo que si se encontra algún comportamento erróneo así como

---

para calquera suxestión o respecto, por favor non dude é comuníquenolo.

Instaladas versións optimizadas das librerías BLAS/LAPACK para todas as arquitecturas presentes no servidor SVGD.

Recientemente instalouse a versión 3.6.0 de ATLAS (Automatically Tuned Linear Algebra Software) para as arquitecturas INTEL de 32 y 64bits presentes nos nodos de cálculo do SVGD e os compiladores gnu (gcc/g77/gfortran).

Maís información

No caso da arquitectura AMD opteron tamén presente nun dos nodos do SVGD procedeuse a instalación das librerías ACML (AMD Core Math Library) para 64bits e os compiladores dispoñibles (gcc/g77/gfortran y pathscale).

Maís información

Traballos que non terminan correctamente por falta de tempo de execución.

No caso de que algúns dos seus traballos terminen con exit\_status 138 no SVGD, 158 no HPC320 ou 144 no SuperDome e o facer un qacct -j do traballo aparezca failed 100, agradeceríamoslle que se puxera en contacto con nos no ou no 981 56 98 10 indicándonos o job\_id para consultalo exit\_status, aínda que en principio este exit\_status é por falta de tempo, é dicir, foi matado polo sistema de colas, o superar o tempo de execución pedido no qsub, e o recomendable sería volver a lanzarlo pedindo máis horas de execución.

Para traballos que necesiten máis tempo de execución que o permitido, 300 horas no SVGD (svgd.cesga.es), 360 horas no HPC320 (sc.cesga.es) e 300 horas no SuperDome (sd.cesga.es), dispoñemos dunha cola especial, que permite a execución para traballos longos. Se necesita acceso a esta cola, pónase en contacto no , onde lle indicaremos como facer a solicitude.

---

En calquera caso, tamén lle agradeceríamos que nos consulte calquera duda que lle poda surxir na saída dun traballo.

## CURSO

"Programación paralela do superdome mediante directivas OPENMP".

Datas: 13.12.2006 ó 14.12.2006

Horario: de 10:00 a 18:30h

Organiza: CESGA

Colabora: Departamento de Electrónica y Sistemas. UDC

Nº horas: 14

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

Contacto: cursos

Dirixido a: Usuarios con grandes demandas de recursos computacionais que desenvolvenos seus propios códigos (en C e/ou en Fortran) en diferentes campos da ciencia e a enxeñería, e que desexan coñecer técnicas básicas de programación paralela para a execución dos seus programas no supercomputador HP Superdome

[Continua]

---

Resultados das enquisas de satisfacción dos usuarios.

Dende 1993 vimos realizando un constante esforzo por incrementar o nivel de calidade dos servizos que facilitamos ós investigadores. Os comentarios, suxestións e opinións dos usuarios foron claves para poder mellorar e ofrecer o servizo demandado.

O resultado da enquisa de usuarios calificaron como boa os servizos de computación e almacenamento (4.2 sobre 5) e de excelente o servizo de soporte aos usuarios (4.6 sobre 5). Máis interesantes resultan os comentarios entre os que como aspectos a mellorar atopanse os tempos de espera na cola e a asignación de prioridades, así como a forma de determinar os recursos necesarios antes de enviar os traballos. Tamén está o aspecto case permanente da falta de recursos para poder realizar os cálculos necesarios para as investigacións dos usuarios nun tempo razoable.

Neste sentido traballamos na mellora do servizo prestado e a información sobre prioridades e tempos de espera na cola e o próximo ano contaremos coa incorporación do servidor de cálculo Finisterrae que contará con máis de 2000 procesadores Itanium2 e 19 TB de memoria principal e confiamos permita dar un salto cualitativo nos servizos prestados polo centro.

Como sempre estamos dispostos a escoitar calquera comentario ou petición que permita mellorar os servizos prestados a través dos nosos servizos de soporte e atención a usuarios.

Enlaces  
esenciales.

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

Cómo 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;