



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Reunión de usuarios de CCAD

CCAD / UNC



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Inquietudes

¿Qué experiencia tienen con el CCAD ?

¿Qué buscan, qué necesitan?

¿Qué *software* emplean habitualmente?

¿Qué *software* necesitan?

Consejos sobre cómo trabajar con los recursos del CCAD



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Uso cotidiano, consejos y buenas prácticas



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

1 - Equipos Disponibles - ¿Qué y para qué?

MENDIETA

10



XEON E5-2680 V2
INTEL IVY BRIDGE



2 x 10 cores

@2.8 GHZ

64 GiB



64 GiB DDR3
1600 MHz



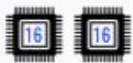
2 x NVIDIA A30
24GB HBM2

MULATONA

7



XEON E5-2683 V4
INTEL BROADWELL



2 x 16 cores

@3.0 GHZ

128 GiB



128 GiB DDR4
2400 MHz

EULOGIA

32



XEON PHI 7210
INTEL KNIGHTS LANDING



1 x 64 cores

@1.5 GHZ

96 GiB



96 GiB DDR4
2400 MHz
+16 GiB MCDRAM

SERAFÍN

60



EPYC 7532
AMD ZEN2(ROME)



2 x 32 cores

@3.3 GHZ

128 GiB



128 GiB DDR4
3200 MHz

ARQUITECTURA | CCAD



Proyección 2022

Mendieta (en desarrollo) - Proyectadas 10 GPUs más - 4 pagadas, en EEUU. Fondos UNC + PFI (CTC+MinCyT)
Nodo de almacenamiento - Adjudicado, comprado. Esperando entrega. Compra comunitaria HDD 8 TiB SAS.
Serafin - 8 nuevos nodos. Fondos SNCAD + UNC

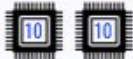
1 - Equipos Disponibles - ¿Qué y para qué?

MENDIETA

10



XEON E5-2680 V2
INTEL IVY BRIDGE



2 x 10 cores

@2.8 GHZ

64 GiB



64 GiB DDR3
1600 MHZ



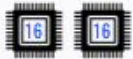
2 x NVIDIA A30
24GB HBM2

MULATONA

7



XEON E5-2683 V4
INTEL BROADWELL



2 x 16 cores

@3.0 GHZ

128 GiB



128 GiB DDR4
2400 MHZ

EULOGIA

32



XEON PHI 7210
INTEL KNIGHTS LANDING



1 x 64 cores

@1.5 GHZ

96 GiB



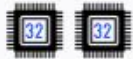
96 GiB DDR4
2400 MHZ
+16 GiB MCDRAM

SERAFÍN

60



EPYC 7532
AMD ZEN2(ROME)



2 x 32 cores

@3.3 GHZ

128 GiB



128 GiB DDR4
3200 MHZ

Mendieta

Aplicaciones que emplean GPU: MD, ML, ect.

Mulatona (IATE)

Trabajos de pocos procesadores (32 p/n)

Eulogia y Serafín

Trabajos altamente paralelizables.
64 p/n - uso todo el nodo o por MPI.



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

¿Cómo largar los trabajos? - SLURM

SLURM maneja una sistema de colas. Es como ir a “cobrar al banco”. Para cobrar debo esperar para llegar a la ventanilla

Comandos:

- sbatch
- squeue
- scancel





CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

¿Cómo largar los trabajos? - SLURM

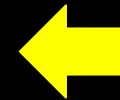
Comandos:

- **sbatch**
- squeue
- scancel

Enviar un trabajo

-> sbatch trabajo.sge

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=C4
#SBATCH --ntasks=1
#SBATCH --cpus-per-task=32
#SBATCH --time 2-0:00
#SBATCH -partition=multi
export OMP_NUM_THREADS=32
. /etc/profile
g16root=/home/shared/gaussian/G16_AVX2
export g16root
. $g16root/g16/bsd/g16.profile
export GAUSS_SCRDIR=/scratch
g16 tetraH-larga-cav-1481n.gjf
```



Contenido
del archivo

Variables de slurm
comienzan con #

órdenes de bash
sin #

comentarios ##



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

¿Cómo largar los trabajos? - SLURM

Comandos:

- sbatch
- **squeue**
- scancel

Estado de la cola

-> squeue

| JOBID | PARTITION | NAME | USER | ST | TIME | NODES | NODELIST (REASON) |
|-------|-----------|----------|----------|----|---------|-------|-------------------|
| 23811 | multi | SnSi69_e | aruderma | PD | 0:00 | 2 | (Priority) |
| 23812 | multi | SnSi69re | aruderma | PD | 0:00 | 2 | (Priority) |
| 23820 | multi | 110THTdi | ggrad | PD | 0:00 | 1 | (Priority) |
| 23822 | multi | CAM7 | pcamargo | PD | 0:00 | 1 | (Priority) |
| 23823 | multi | ADA5 | pcamargo | PD | 0:00 | 1 | (Priority) |
| 23783 | multi | Sergio3 | srodrigu | R | 2:58:32 | 1 | kn109 |
| 23782 | multi | Sergio5 | srodrigu | R | 3:17:34 | 1 | kn118 |
| 23793 | multi | c3n3p35z | cvillagr | R | 1:25:53 | 3 | kn1[03,06,14] |
| 23790 | multi | c3n3p35z | cvillagr | R | 2:58:32 | 3 | kn1[25-27] |

Número del Job

Nombre de cola

Nombre del Job

Usuario

Estado del Job

PD-pending - R-running

Tiempo corriendo

Número y nombre de nodos en los que corre el job



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

¿Cómo largar los trabajos? - SLURM

Comandos:

- sbatch
- squeue
- **scancel**

Cancela trabajos

No hay problema si
me equivoco.
No puedo borrar
tareas de otros.

-> scancel JOBID

| JOBID | PARTITION | NAME | USER | ST | TIME | NODES | NODELIST (REASON) |
|-------|-----------|----------|----------|----|---------|-------|-------------------|
| 23811 | multi | SnSi69_e | aruderma | PD | 0:00 | 2 | (Priority) |
| 23812 | multi | SnSi69re | aruderma | PD | 0:00 | 2 | (Priority) |
| 23820 | multi | 110THTdi | ggrad | PD | 0:00 | 1 | (Priority) |
| 23822 | multi | CAM7 | pcamargo | PD | 0:00 | 1 | (Priority) |
| 23823 | multi | ADA5 | pcamargo | PD | 0:00 | 1 | (Priority) |
| 23783 | multi | Sergio3 | srodrigu | R | 2:58:32 | 1 | kn109 |
| 23782 | multi | Sergio5 | srodrigu | R | 3:17:34 | 1 | kn118 |
| 23793 | multi | c3n3p35z | cvillagr | R | 1:25:53 | 3 | kn1[03,06,14] |
| 23790 | multi | c3n3p35z | cvillagr | R | 2:58:32 | 3 | kn1[25-27] |

Número
del Job

Nombre
de cola

Nombre
del Job

Usuario

Estado del Job
PD-pending - R-running

Tiempo
corriendo

Número y nombre de nodos
en los que corre el job



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

¿Todo bien en los nodos?

Verificar que todo esté ok mientras corre:

\$ ssh knl09

\$ htop

Todos los cores a pleno y en verde.

Si no: scancel!

-> scancel JOBID

| JOBID | PARTITION | NAME | USER | ST | TIME | NODES | NODELIST (REASON) |
|-------|-----------|----------|----------|----|---------|-------|-------------------|
| 23811 | multi | SnSi69_e | aruderma | PD | 0:00 | 2 | (Priority) |
| 23812 | multi | SnSi69re | aruderma | PD | 0:00 | 2 | (Priority) |
| 23820 | multi | 110THTdi | ggrad | PD | 0:00 | 1 | (Priority) |
| 23822 | multi | CAM7 | pcamargo | PD | 0:00 | 1 | (Priority) |
| 23823 | multi | ADA5 | pcamargo | PD | 0:00 | 1 | (Priority) |
| 23783 | multi | Sergio3 | srodrigu | R | 2:58:32 | 1 | knl09 |
| 23782 | multi | Sergio5 | srodrigu | R | 3:17:34 | 1 | knl18 |
| 23793 | multi | c3n3p35z | cvillagr | R | 1:25:53 | 3 | knl[03,06,14] |
| 23790 | multi | c3n3p35z | cvillagr | R | 2:58:32 | 3 | knl[25-27] |

Número del Job

Nombre de cola

Nombre del Job

Usuario

Estado del Job
PD-pending - R-running

Tiempo corriendo

Número y nombre de nodos en los que corre el job



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

¿Todo bien en los nodos?

Verificar que todo esté ok mientras corre:

```
$ ssh ivb10
$ nvidia-smi
```

Las placas de video con actividad (mendieta).

Si no: scancel!

-> nvidia-smi

```

Tue Apr  5 13:06:23 2022
-----+-----
NVIDIA-SMI 510.47.03   Driver Version: 510.47.03   CUDA Version: 11.6
-----+-----
 GPU   Name Persistence-M   Bus-Id        Disp.A | Volatile Uncorr. ECC
 Fan  Temp  Perf    Pwr:Usage/Cap |      Memory-Usage | GPU-Util  Compute M.
-----+-----+-----
    0   NVIDIA A30          On   00000000:03:00.0 Off  |  315MiB / 24576MiB |    52%      Default
      N/A   27C    P0      74W / 165W |                    |                    | Disabled
-----+-----+-----
    1   NVIDIA A30          On   00000000:85:00.0 Off  |    0MiB / 24576MiB |     0%      Default
      N/A   13C    P0      24W / 165W |                    |                    | Disabled
-----+-----+-----

Processes:
 GPU   GI   CI          PID  Type  Process name                        GPU Memory
  ID   ID   ID                                Usage
-----+-----+-----
    0   N/A  N/A      479437   C   ..._64-multicore-CUDA/namd2         313MiB
-----+-----

```

Ejemplo

Utiliza 1 placa de video



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Software

Software Instalado por Administradores

Comando -> module avail

module:

- avail
- load
- list
- purge

```

$ module avail
----- /opt/modules/aplicaciones -----
ambertools/21      dftbplus/19.1      lammmps/2020.10.29  openfoam/v2006      rdock/2013.1
beast/1.10.0       gromacs/2018.4-mpi namd/2.13            qe/6.2              siesta/4.0.2
beast/1.10.4       gromacs/2019.3-mpi (default) openfoam/6 (default) qe/6.2.1 (default) star/2.7.0e
beast/1.10.5pre    lammmps/2018.03.16 openfoam/v1812      qe/6.7              vinardo/2.2.2
----- /opt/modules/compiladores -----
gcc/7  intel/2018
----- /opt/modules/herramientas -----
autoconf/2.69      bison/3.0.5  gdb/8.2  libtool/2.4.6  pkg-config/0.29.2  vtune/2018
automake/1.15.1    flex/2.6.4   jdk/17   m4/1.4.18     tcl/8.6.8

```



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Software

Software Instalado por Administradores

Comando
module:

- avail
- load
- list
- purge

```
$ module load lammmps/2020.10.29
*****
- Add "kspace_modify diff ad" to the input script
- The command-line option should be changed to :
"-pk intel 0 -sf intel"
- Do not use thread affinity (set KMP_AFFINITY=none)
- The "newton off" setting may provide better scalability
*****
$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
  1) /opt/modules/sistema/licencias/intel          4) openmpi/3              7) lammmps/2020.10.29
  2) intel/2018                                  5) mkl/2018(default)
  3) /opt/modules/sistema/ucx/1.6.1-mt-intel_18  6) tbb/2018
$ module purge
$ module list
No Modulefiles Currently Loaded.
```



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

¿Qué debo hacer para comenzar a trabajar?

Instalar software - Administradores o gestores de paquetes - Spack

Spack enables Software distribution for HPC

- Spack automates the build and installation of scientific software
- Packages are *parameterized*, so that users can easily tweak and tune configuration

No installation required: clone and go

```
$ git clone https://github.com/spack/spack
$ spack install hdf5
```

Simple syntax enables complex installs

```
$ spack install hdf5@1.10.5
$ spack install hdf5@1.10.5 %clang@6.0
$ spack install hdf5@1.10.5 +threadssafe
$ spack install hdf5@1.10.5 cxxflags="-O3 -g3"
$ spack install hdf5@1.10.5 target=haswell
$ spack install hdf5@1.10.5 +mpi ^mpich@3.2
```



 github.com/spack/spack

- Ease of use of mainstream tools, with flexibility needed for HPC

Fuente: <https://spack-tutorial.readthedocs.io/en/latest/>



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Spack

Spack

Iniciación:

- list

- install

- load

- info

- compilers

```
$ git clone https://github.com/spack/spack.git ~/spack
```

Clono la carpeta de spack en mi filesystem

```
$ cd ~/spack
```

```
$ ./share/spack/setup-env.sh
```

Cargo las variables de entorno para usar spack

```
$ spack list
```

Lista todos los programas disponibles para instalar

```
$ spack list py-*
```

Lista con condiciones, resultados directos

Spack

Spack

-> `spack info paquete`

Información sobre un paquete

Iniciación:

- list
- install
- load
- info
- compilers

```
$ spack info $paquete - ejemplo namd -
$ spack info namd
MakefilePackage:  namd
Description:
  NAMDis a parallel molecular dynamics code designed for high-performance
  simulation of large biomolecular systems.
Homepage: https://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/
Externally Detectable:
  False
Tags:
  None
Preferred version:
  2.14      file:///home/mpuiatti/soft/NAMD_2.14_Source.tar.gz

Safe versions:
  master   [git] https://charm.cs.illinois.edu/gerrit/namd.git on branch master
  2.15a1   [git] https://charm.cs.illinois.edu/gerrit/namd.git at tag release-2-15-alpha-1
  2.14     file:///home/mpuiatti/soft/NAMD_2.14_Source.tar.gz
  2.13     file:///home/mpuiatti/soft/NAMD_2.13_Source.tar.gz
```


Spack

Spack

Iniciación:

- list
- install
- load
- info
- compilers

```

$ spack info namd
... ..
Deprecated versions:
  None
Variants:
  Name [Default]      When      Allowed values      Description
  =====
  cuda [off]          --        on, off             Build with CUDA
  cuda_arch [none]    +cuda    none, 10, 86, 50,  CUDA architecture
                                     80, 70, 72, 52, 60,
  fftw [3]            --        none, 2, 3, mkl,   Enable the use of FFTW/FFTW3/MKL FFT/AMDFFTW
                                     amdfftw
  interface [none]    --        none, tcl, python  Enables TCL and/or python interface
Installation Phases:
  edit  build  install
Build Dependencies:
  amdfftw  charmpp  cuda  fftw  intel-mkl  python  tcl
Link Dependencies:
  amdfftw  charmpp  cuda  fftw  intel-mkl  python  tcl
Run Dependencies:
  None
Virtual Packages:
  None
  
```



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Spack

Spack

Iniciación: `$ spack install $paquete`

- list `Instalo el paquete`

- install `$ spack install $paquete +opc1 +opc2 -opc3`

- load `$ spack install $paquete+opc1+opc2-opc3`

- info `Instalo el paquete con las opciones 1 y 2 sin opc3`

`$ spack install $paquete+opc1+opc2-opc3 %COMPILADOR`

`Instalo el paquete con el COMPILADOR`

`$ spack install $paquete+opc1+opc2-opc3 %COMPILADOR ^lib2@3`

`Instalo el paquete con la biblioteca lib2 versión 3`



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Spack

Spack

Iniciación

- list

- install

- load

- info

```
$ module load gcc
$ spack compiler find
$ module purge
$ spack install gromacs@2021.5+cuda+mpi+openmp %gcc@11.2.0 \
^cuda@11.6.1 \
^openmpi@4.1.3rc1+pmix+cuda fabrics=ucx,cma,knem schedulers=slurm\
^ucx@1.12.1 +optimizations+rc+ud+dc+thread_multiple-dv+cuda \
cuda_arch=80
```

Instalo el paquete gromacs nivel D10S

¡GRACIAS CHARLY B.!!!



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Spack

Los paquetes de spack, figuran como modulos

Spack

Iniciación

- list
- install
- load
- info

```

$ module avail
----- ~/share/spack/modules/linux-rocky8-sandybridge -----
alsa-lib-1.2.3.2-gcc-11.2.0-oc7ta67      libiconv-1.16-gcc-8.5.0-xum4sxu      xz-5.2.5-gcc-8.5.0-w41tmyi
alsa-lib-1.2.3.2-gcc-11.2.0-xzo3eo7    libiconv-1.16-gcc-11.2.0-oucchwp     xz-5.2.5-gcc-11.2.0-zgv4736
. . . . .
----- /opt/modules/aplicaciones -----
ambertools/21      dftbplus/19.1      lammps/2020.10.29  openfoam/v2006      rdock/2013.1
beast/1.10.0       gromacs/2018.4-mpi namd/2.13          qe/6.2              siesta/4.0.2
beast/1.10.4       gromacs/2019.3-mpi (default) openfoam/6 (default) qe/6.2.1 (default) star/2.7.0e
beast/1.10.5pre    lammps/2018.03.16  openfoam/v1812    qe/6.7              vinardo/2.2.2
----- /opt/modules/compiladores -----
gcc/7  intel/2018
----- /opt/modules/herramientas -----
autoconf/2.69  bison/3.0.5  gdb/8.2  libtool/2.4.6  pkg-config/0.29.2  vtune/2018
automake/1.15.1  flex/2.6.4  jdk/17  m4/1.4.18  tcl/8.6.8

$ module load $paquete

```



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

¿Qué debo hacer para comenzar a trabajar?

Sistema de Colas - SLURM

Software a emplear - Módulos o propios,

Selección de las mejores condiciones para correr -
Benchmark



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Ej. Benchmark Gromacs

El cuello de botella de muchos programas de DM es la interacción de a pares no enlazados 60 a 90 % de recursos de cómputos. La tarea es sencilla y algorítmicamente no compleja.

Ideal para paralelizar en GPU

Sistemas a estudiar.

- 1) Bicapa lipídica 1 - 33k átomos.
- 2) Bicapa lipídica 2 - 84k átomos.
- 3) Complejo Enz.Lig - 107 k átomos.
- 4) Ribosoma 2 - M átomos

Cluster Mendieta. Configuraciones

- a) 10 procs + 1 GPU
- b) 20 procs + 1 GPU
- c) 20 procs + 2 GPUs.



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Ej. Benchmark Gromacs

Ejemplo script de envío
de trabajos de Gromacs
en Mendieta

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=test-2-10
## Cola donde encolar (short: <2h, multi para el resto)
#SBATCH --partition=multi
## Cantidad de nodos donde correr
#SBATCH --nodes=1
## Cantidad de procesos MPI a lanzar por cada nodo (MPI puro: 64)
#SBATCH --ntasks-per-node=2
## Cantidad de cores a usar por proceso MPI (ej. OpenMP de 64 hilos por proceso)
#SBATCH --cpus-per-task=10
## Tiempo de ejecucion limite (dias-horas:minutos:segundos)
#SBATCH --time=05:00
#SBATCH --gres=gpu:2

## Job script
# Lanzamiento de aplicacion, usar siempre srun de slurm para todo y no mpirun
#srun gmx_mpi mdrun -v -deffnm ../benchMEM
. ~/m3bin/spack/share/spack/setup-env.sh
spack load gromacs-2021.5-gcc-11.2.0-ninyiwv
srun gmx_mpi mdrun -v -s TOPOLOGIA -nsteps 100000 -deffnm SALIDA
```



Ej. Benchmark Gromacs

El cuello de botella de muchos programas de DM es la interacción de a pares no enlazados 60 a 90 % de recursos de cómputos. La tarea es sencilla y algorítmicamente no compleja.

Ideal para paralelizar en GPU

Sistemas a estudiar.

- 1) Bicapa lipídica 1 - 33k átomos.
- 2) Bicapa lipídica 2 - 84k átomos.
- 3) Complejo Enz.Lig - 107 k átomos.
- 4) Ribosoma 2 - M átomos

Cluster Mendieta. Configuraciones

- a) 10 procs + 1 GPU
- b) 20 procs + 1 GPU
- c) 20 procs + 2 GPUs.

Rendimiento - ns/día - timestep 2 fs

| Conf | 33 k | 84 k | 107 k | 2 M |
|--------------|-------|-------|-------|------|
| 10 p + 1 GPU | 292.3 | 129,4 | 52,5 | 7,46 |
| 20 p + 1 GPU | 294,0 | 133,4 | 59,8 | 8,54 |
| 20 p + 2 GPU | 293,9 | 133.2 | 59,8 | 8,61 |

Serafin 1 nodo 78,6 ; 81,5 2 nodos; 85,9 3 nodos ; 86,7 4 nodos



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Ej. Benchmark Gromacs

El cuello de botella de muchos programas de DM es la interacción de a pares no enlazados 60 a 90 % de recursos de cómputos. La tarea es sencilla y algorítmicamente no compleja.

Ideal para paralelizar en GPU

Sistemas a estudiar.

- 1) Bicapa lipídica 1 - 33k átomos.
- 2) Bicapa lipídica 2 - 84k átomos.
- 3) Complejo Enz.Lig - 107 k átomos.
- 4) Ribosoma 2 - M átomos

Cluster Mendieta. Configuraciones

- a) 10 procs + 1 GPU
- b) 20 procs + 1 GPU
- c) 20 procs + 2 GPUs.

Rendimiento - ns/día - timestep 2 fs

| Conf | 33 k | 84 k | 107 k | 2 M |
|--------------|-------|-------|-------|------|
| 10 p + 1 GPU | 292.3 | 129,4 | 52,5 | 7,46 |
| 20 p + 1 GPU | 294,0 | 133,4 | 59,8 | 8,54 |
| 20 p + 2 GPU | 293,9 | 133.2 | 59,8 | 8,61 |



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Trabajando con Gaussian en Serafin

Dr. Javier Iván Bardagi

Investigador Adjunto de CONICET

INFIQC - CONICET

Facultad de Ciencias Químicas - UNC

jibardagi@unc.edu.ar



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Trabajando con Gaussian en Serafin

input.com

batch.sge →

```
%chk=test.chk
%mem=80 GB
%CPU=0-63
#p TD(nstates=4,root=1)
UB3LYP/6-31+G(d)
geom=check

NDI-02 RA S1 - Comentarios -

-1 2
```

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=g-test-RA2
#SBATCH --ntasks=1
#SBATCH -partition=multi
#SBATCH --cpus-per-task=64
#SBATCH --time 2-0:00:00

. /etc/profile
g16root=/home/shared/gaussian/G16_AVX2
export g16root
. $g16root/g16/bsd/g16.profile
export GAUSS_SCRDIR=/scratch
export OMP_NUM_THREADS=64
g16 gaussian-input.com
```

temporales (*.rwf) via red, en disco no-local



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Trabajando con Gaussian - Javier Bardagi

input.com

batch.sge →

```
%rwf=/scratch/test.rwf
%chk=test.chk
%mem=80 GB
%CPU=0-63
#p TD(nstates=4,root=1)
UB3LYP/6-31+G(d)
geom=check

NDI-02 RA S1 - Comentarios -

-1 2
```

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=g-test-RA2
#SBATCH --ntasks=1
#SBATCH -partition=multi
#SBATCH --cpus-per-task=64
#SBATCH --time 2-0:00:00

. /etc/profile
g16root=/home/shared/gaussian/G16_AVX2
export g16root
. $g16root/g16/bsd/g16.profile
export GAUSS_SCRDIR=/scratch
export OMP_NUM_THREADS=64
g16 gaussian-input.com
cp /scratch/test.rwf .
```

temporales (*.rwf) en disco local !!!!



Trabajando con Gaussian - Javier Bardagi

Gaussian 16, utiliza una sintaxis diferente para paralelizar (comparada con g09)

Ahora %CPU= , antes %nproc=

```

%rwf=/scratch/test.rwf
%chk=test.chk
%mem=80 GB
%CPU=0-63
#p TD(nstates=4, root=1)
UB3LYP/6-31+G(d)
geom=check

```

NDI-02 RA S1 - Comentarios -

-1 2

DFT 17 atomos 181 Nbasis

- memoria
- %nproc vs %CPU

| keyword | cantidad | Memoria | Elapsep time | Job cpu time |
|--------------|----------|-------------|--------------|--------------|
| %nprocshared | 64 | sin asignar | 121 | 5522 |
| %nprocshared | 64 | 64 | 74 | 1351 |

| | | | | |
|--------|----|----|----|------|
| %CPU | 64 | 96 | 28 | 1752 |
| %nproc | 64 | 96 | 35 | 2091 |



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Trabajando con Gaussian

El manejo de la memoria afecta el rendimiento de los trabajos.

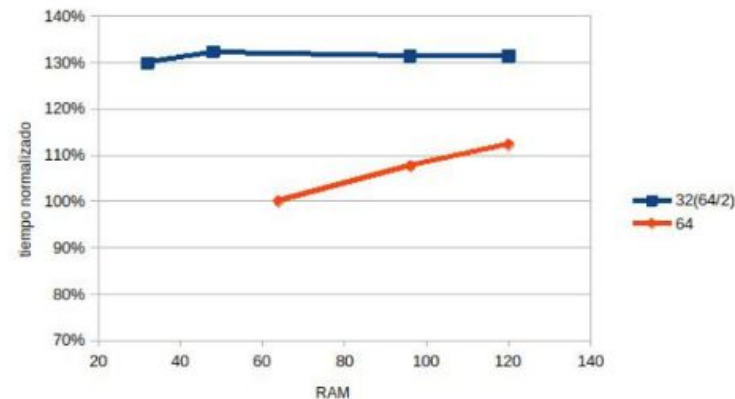
Si bien en ocasiones se recomiendan 2 o 4 GB por procesador, no se recomienda emplear más del 70% de la memoria de los nodos.

80 GB para Serafin

64 GB para Eulogia

- freq TD-DFT 74 atomos 760 Nbasis

freqmem → aprox 2GB por procesador → 128 GB
> 50 átomos >500 bases recomendado 4GB
pero no más de 50-70% total (64-80 GB)



| Procesadores Con %CPU | Memoria | Elapsep time (s) | Job cpu time |
|--------------------------|---------|------------------|--------------|
| 32(64/2) | 32 | 9673 | 307843 |
| 32(64/2) | 48 | 9844 | 313401 |
| 32(64/2) | 96 | 9781 | 311378 |
| 32(64/2) | 120 | 9775 | 311276 |
| 64 | 64 | 7443 | 473203 |
| 64 | 96 | 8014 | 510043 |
| 64 | 120 | 8357 | 531757 |



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Trabajando con Quantum Espresso en Serafin

Dr. Fábio Negreiros Ribeiro

Investigador Adjunto de CONICET

INFIQC - CONICET

Facultad de Ciencias Químicas - UNC

fabio.ribeiro@unc.edu.ar



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Trabajando con Quantum Espresso en Serafin

Script SLURM básico

batch.sge

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=q-test
#SBATCH -partition=multi
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time 2-0:00
#SBATCH --exclusive

# Cargar los módulos para la tarea
module load quantum-espresso/6.7
export OMP_NUM_THREADS=1

# Lanzar el programa
srun pw.x -input Fcc.in >> Fcc.out
```

fabio.ribeiro@unc.edu.ar



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Trabajando con Quantum Espresso en Serafin

Script SLURM básico

batch.sge

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=q-test
#SBATCH -partition=multi (short, 1 hora / multi 2 días)
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time 2-0:00
#SBATCH --exclusive

# Cargar los módulos para la tarea
module load quantum-espresso/6.7
export OMP_NUM_THREADS=1

# Lanzar el programa
srun pw.x -input Fcc.in >> Fcc.out
```



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Trabajando con Quantum Espresso en Serafin

Script SLURM básico

batch.sge

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=q-test
#SBATCH -partition=multi
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks-per-node=1           De 1 a 64!!!
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time 2-0:00
#SBATCH --exclusive

# Cargar los módulos para la tarea
module load quantum-espresso/6.7
export OMP_NUM_THREADS=1

# Lanzar el programa
srun pw.x -input Fcc.in >> Fcc.out
```



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Trabajando con Quantum Espresso en Serafin

Script SLURM básico

batch.sge

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=q-test
#SBATCH -partition=multi
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time 2-0:00
#SBATCH --exclusive

# Cargar los módulos para la tarea
module load quantum-espresso/6.7
export OMP_NUM_THREADS=1

# Lanzar el programa
srun pw.x -input Fcc.in >> Fcc.out
```

fabio.ribeiro@unc.edu.ar



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Trabajando con Quantum Espresso en Serafin

Script SLURM básico

batch.sge

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=q-test
#SBATCH -partition=multi
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks-per-node=1
#SBATCH --cpus-per-task=1
#SBATCH --time 2-0:00
#SBATCH --exclusive

# Cargar los módulos para la tarea
module load quantum-espresso/6.7
export OMP_NUM_THREADS=1

# Lanzar el programa
srun pw.x -input Fcc.in >> Fcc.out
```



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

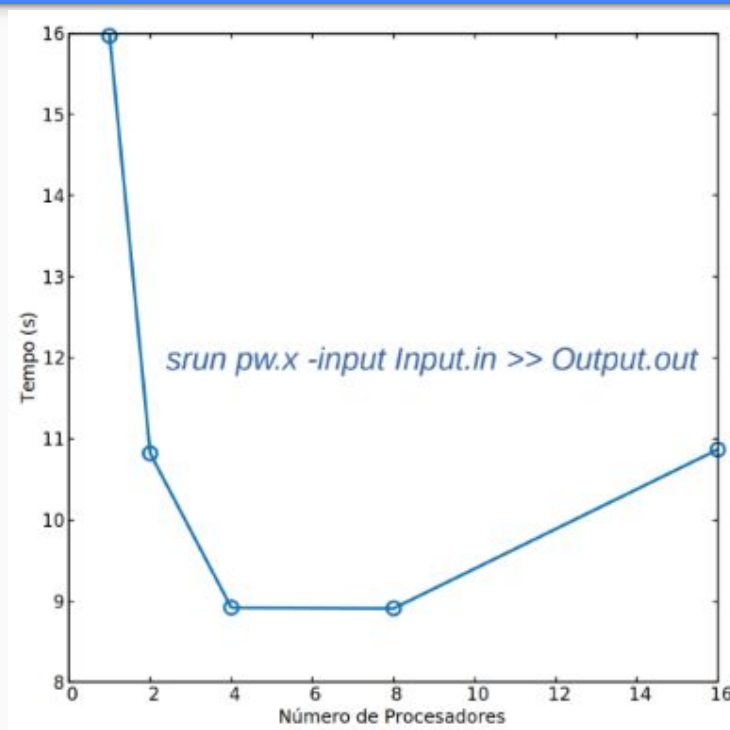
Universidad
Nacional
de Córdoba

Trabajando con Quantum Espresso en Serafin

Ejemplos de
Paralelización

Tiempo, sistema de 1 átomo

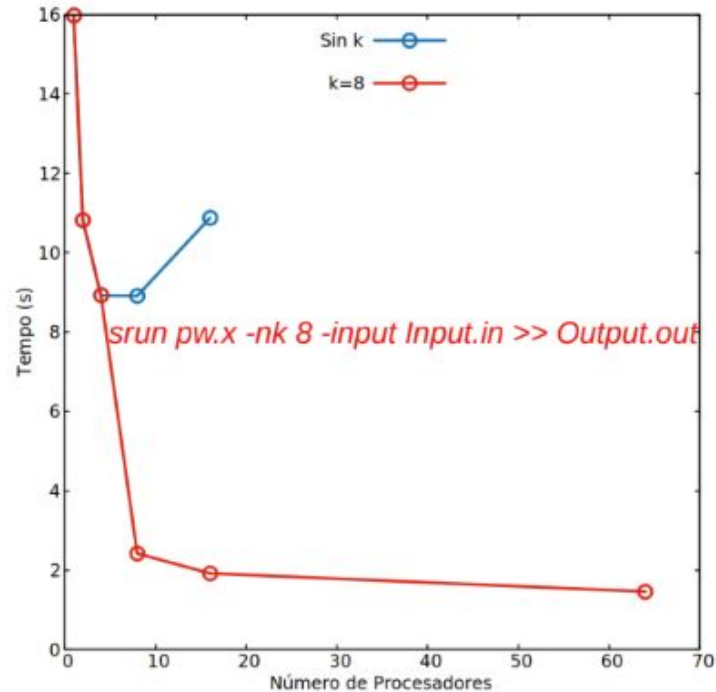
fabio.ribeiro@unc.edu.ar



Trabajando con Quantum Espresso en Serafin

Ejemplos de
Paralelización

Tiempo, paralelización en puntos k





CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



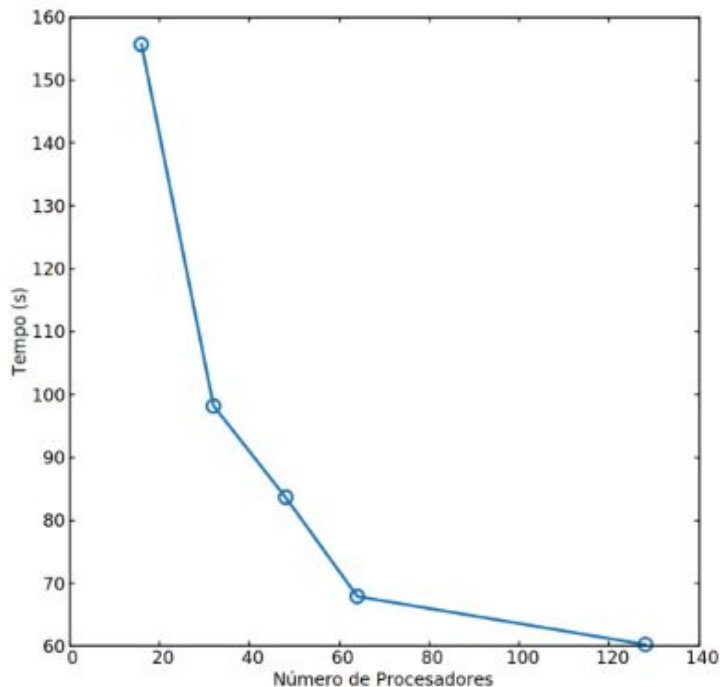
UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Trabajando con Quantum Espresso en Serafin

Ejemplos de
Paralelización

Tiempo, 216 átomos sin puntos k





CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Trabajando con Quantum Espresso en Serafin

Ejemplos de Paralelización

Comunicación entre nodos vs. Memoria

Paralelización sin puntos k



Mucha comunicación entre
nodos

Memoria RAM compartida
entre nodos



Paralelización con puntos k



Poca comunicación entre
nodos



Memoria RAM no compartida
entre nodos



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

Trabajando con Quantum Espresso en Serafin

Atención!!!

Usar más
procesadores



Cálculo más
rápido

Comunicación
entre nodos
vs.
Memoria

Moraleja:

Por más grande/complejo que sea el sistema,
siempre hay un límite → **memoria** y/o **comunicación**



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

¿Qué debo hacer para comenzar a trabajar?

Sistema de Colas - SLURM

Software a emplear - Módulos o propios,

Selección de las mejores condiciones para correr -
Benchmark



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

¿Cómo me conecto al cluster?

Solicitar cuenta en la web del CCAD

Entregar “llave pública de la computadora” - ssh-keygen

¿Puedo conectarme desde Windows?



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño

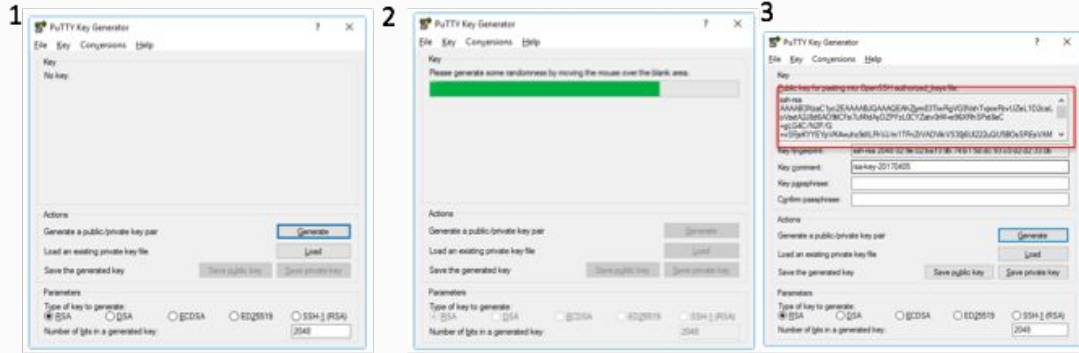


UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

¿Cómo me conecto al cluster desde Windows?

SIN CLAVE → Puttygen – Genera Llaves



Mover el mouse así avanza

Así genero la llave que permite el ingreso a los servidores del *cluster*

4 Copiar la clave al servidor
archivo:
~/ssh/authorized_keys
Se agrega una línea con la clave

ssh-rsa ausgdhfjEF'LKef123'1823. as-fd.kjU

Si no se animan nos envían por mail, o wasap la clave.
Nosotros la incluimos



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



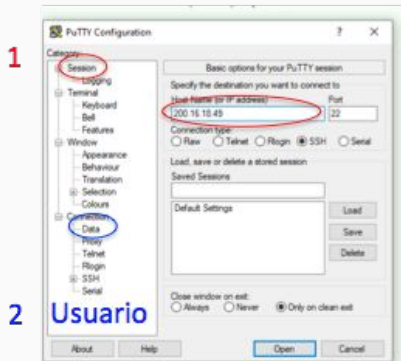
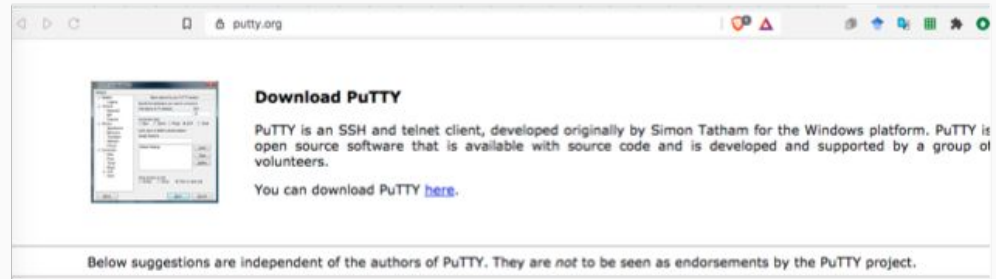
UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

¿Cómo me conecto al cluster desde Windows?

Para conectarme
genero una terminal,
por ejemplo con el
programa Putty
Se descarga de la red

Putty – Abre una terminal

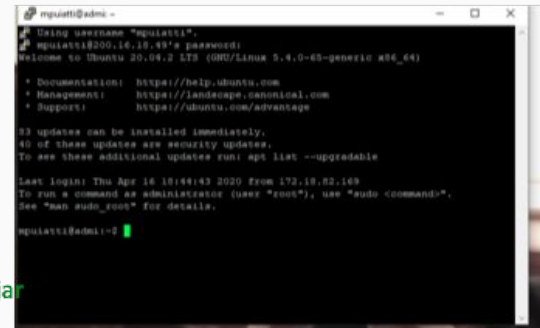


1

2

Usuario

3
Se pueden dejar
las sesiones
guardadas





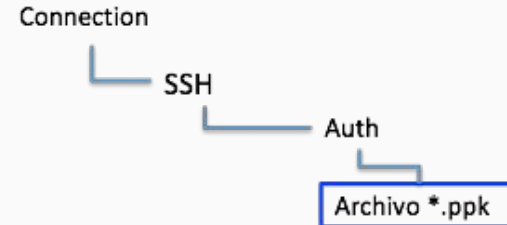
¿Cómo me conecto al cluster desde Windows?

La primera vez que me conecto desde putty debo incluir la ruta al archivo que contiene la llave con la que se configuró mi cuenta

5



DEBO INCLUIR EN PUTTY la ruta hacia la llave privada generada anteriormente.



Así trabajan los clusters del CCAD.

Cuando se crea una cuenta los administradores solicitan la llave y la pegan en la cuenta del interesado

Después del primer login, podemos pegar la llave de muchas más computadoras para que se puedan conectar desde otra compu



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

¿Cómo me conecto al cluster desde Windows?

Para transferir archivos

Moba

The screenshot shows the MobaXterm website with two pricing options:

- Home Edition:** Free. Features include: Full X server and SSH support, Remote desktop (RDP, VNC, Xdmcp), Remote terminal (SSH, telnet, rlogin, Mosh), X11-Forwarding, Automatic SFTP browser, Master password protection, Plugins support, and Portable and installer versions.
- Professional Edition:** \$69 / 49€ per user*. Features include: Every feature from Home Edition +, Customizable startup message and logo, Modifiable profile script, Removal of unwanted games, screensaver, or tools, Unlimited number of sessions, and Unlimited number of tunnels and macros.

WinSCP

The screenshot shows the WinSCP 5.17 download page. It includes a list of new features and improvements:

- Improvements to sessions and workspace management, so that WinSCP can now easily restore tabs that were open when it was last closed.
- Hardware-accelerated AES.
- Extension: Archive and Download to archive remote files and download the archive.
- Improvements to Synchronization checked window.
- Allowed writing of find results.
- SSH core upgraded to PuTTY 0.75.
- The binaries are signed with new EV certificate valid until February 2025.
- List of all changes.

At the bottom, there are buttons for "Download WinSCP 5.17.18 (14.8 MB)", "Get it from Microsoft", and "37664 4996-2025".



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño

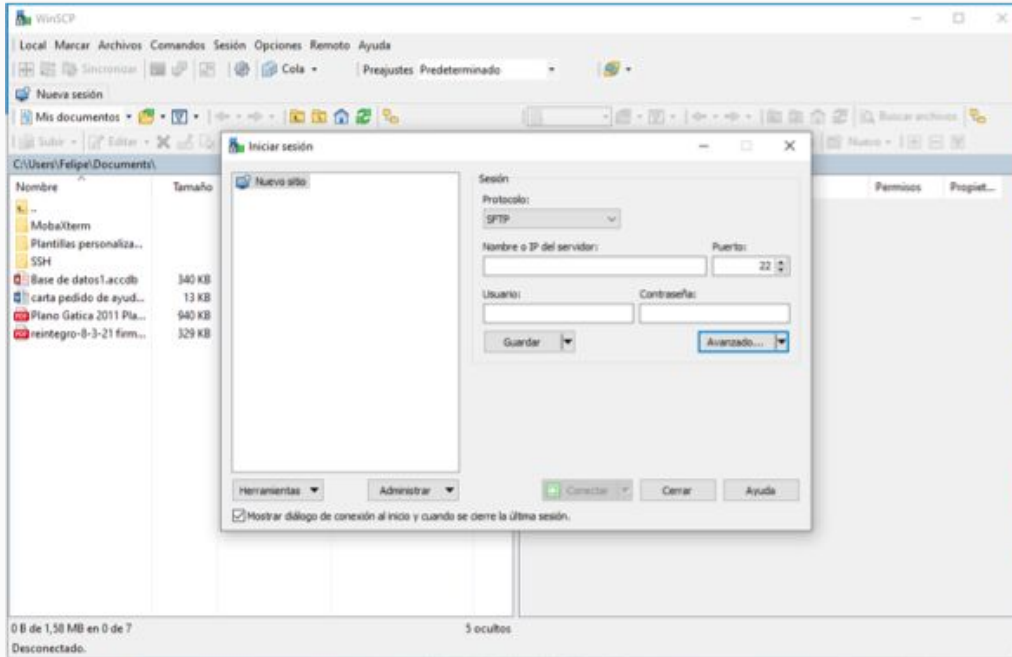


UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

¿Cómo me conecto al cluster desde Windows?

Para transferir archivos



Ejemplo de interfaz de WinSCP, para conectarse también usa putty internamente (o algo muy similar)



CCAD

Centro de
Computación
de Alto
Desempeño



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

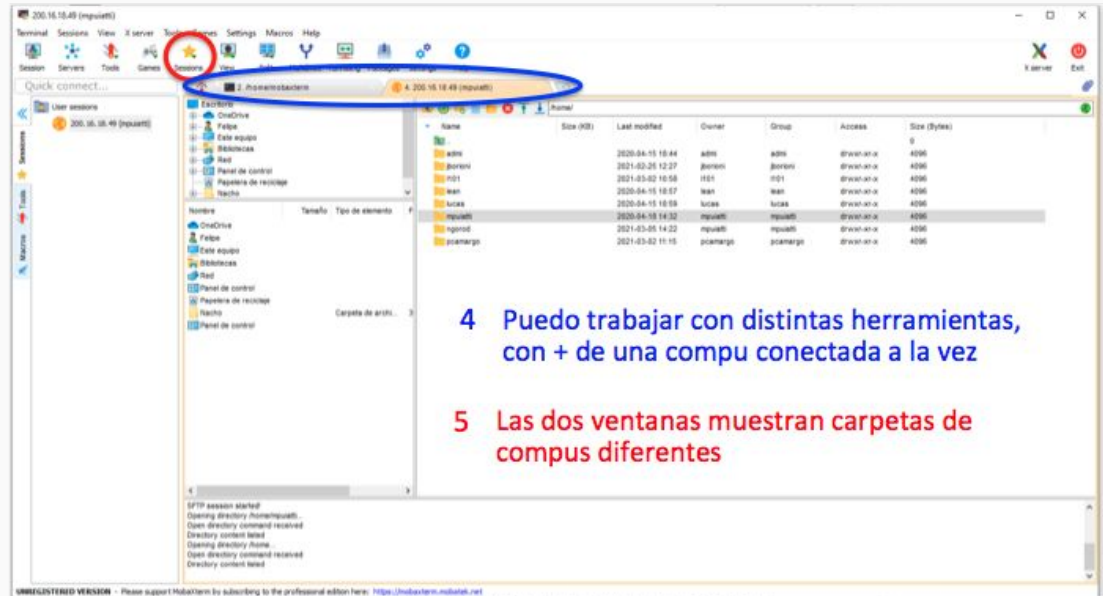
¿Cómo me conecto al cluster desde Windows?

Con moba también debo incluir las llaves al conectarme. Moba permite tener también terminales, e incluso múltiples sesiones abiertas

MOBA

- 1 New Session → SFTP
- 2 Se abre una ventana de login

- 3 Tb se abre una ventana de MOBA-Xterm, simil putty



- 4 Puedo trabajar con distintas herramientas, con + de una compu conectada a la vez

- 5 Las dos ventanas muestran carpetas de computos diferentes

Links

- Tutorial sobre spack:
 - https://spack-tutorial.readthedocs.io/en/latest/tutorial_basics.html#installing-spack
- Gaussian 16:
 - <https://gaussian.com/gaussian16/>