

Astrofizyka: InSilicoLab for Astrophysics

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 warunków 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 **Piemnik**.

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.

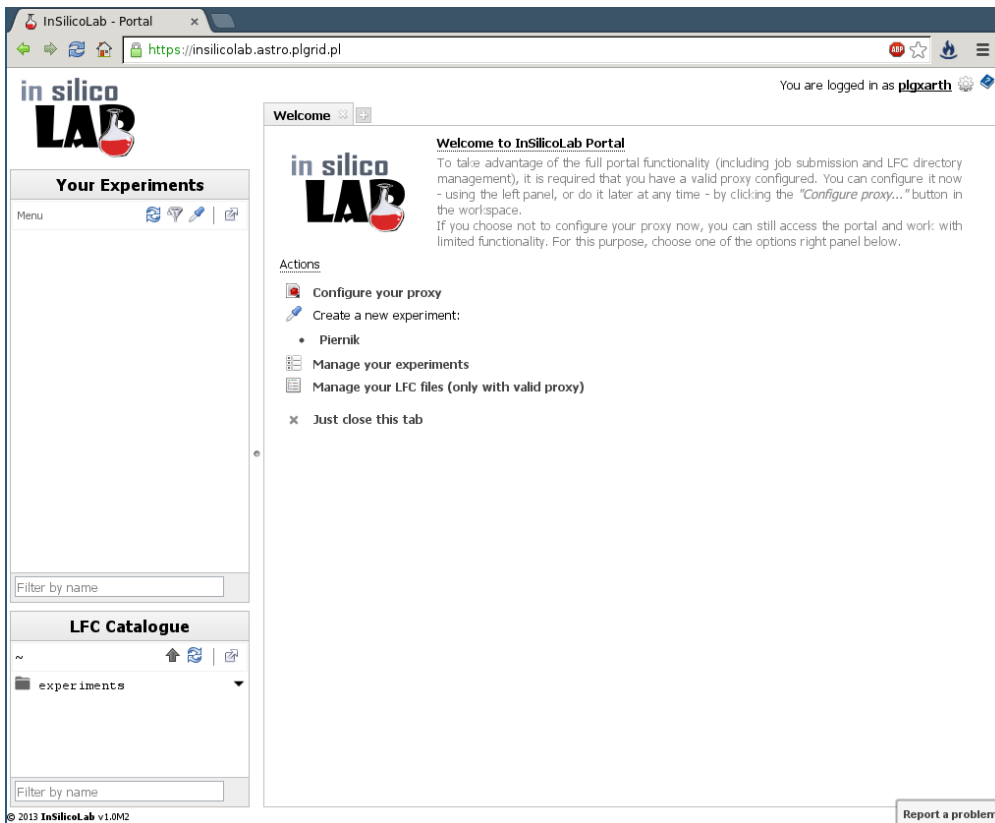
Pierwsze kroki

Należy połączyć się z serwerem usługi

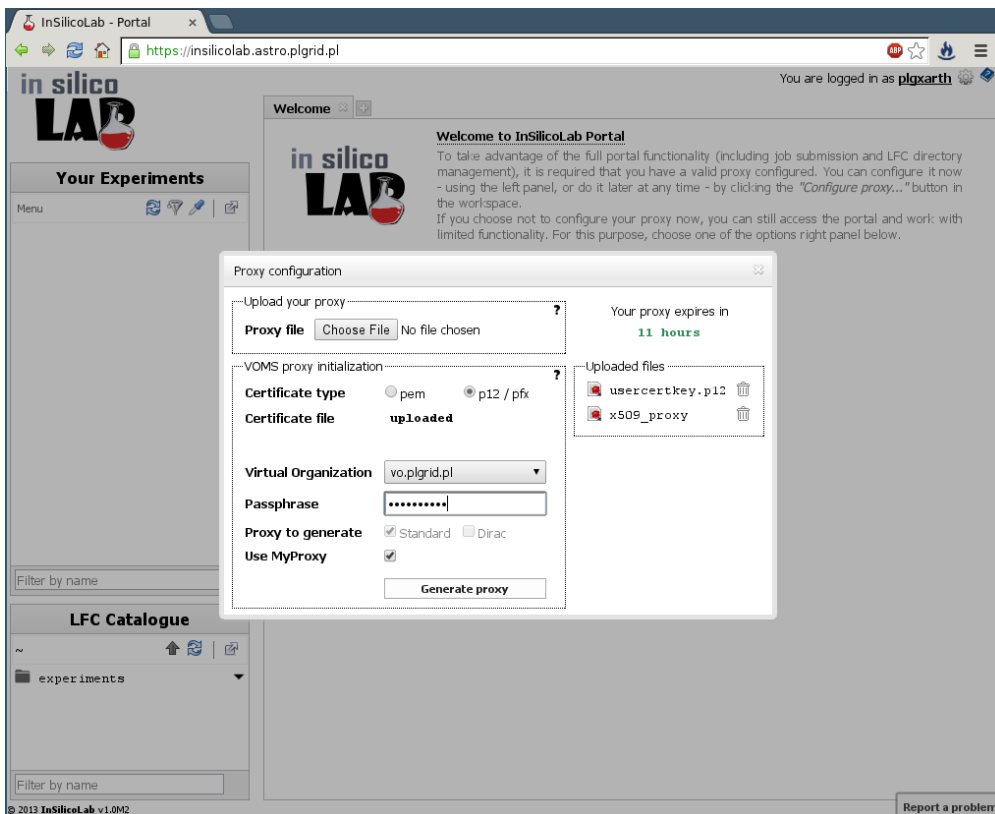
<http://insilicolab.astro.plgrid.pl/>

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**:



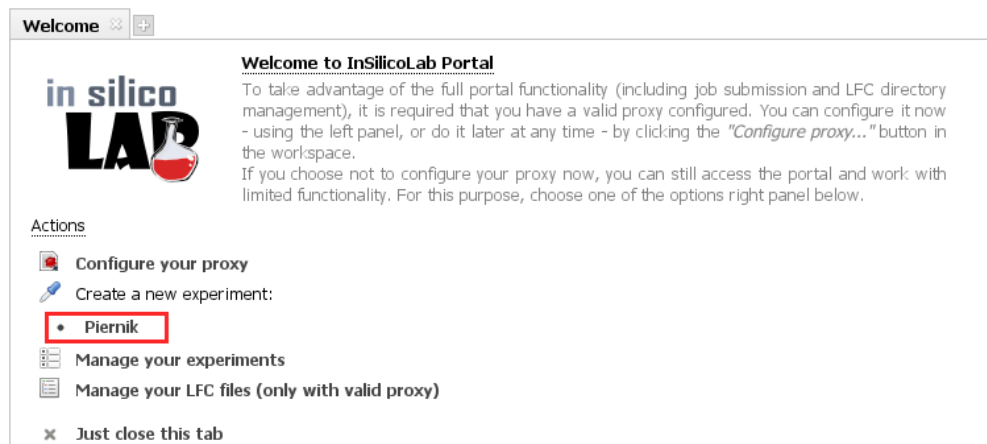
Certyfikat proxy konieczny jest do przeprowadzania obliczeń z wykorzystaniem infrastruktury PL-Grid, a także przeglądania danych zgromadzonych w zasobach tej infrastruktury. Nie jest natomiast konieczny do przeglądania konta użytkownika i zapisanych przez niego analiz, ani do wstępnego przygotowania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

Istnieją dwie możliwości konfiguracji proxy w portalu:

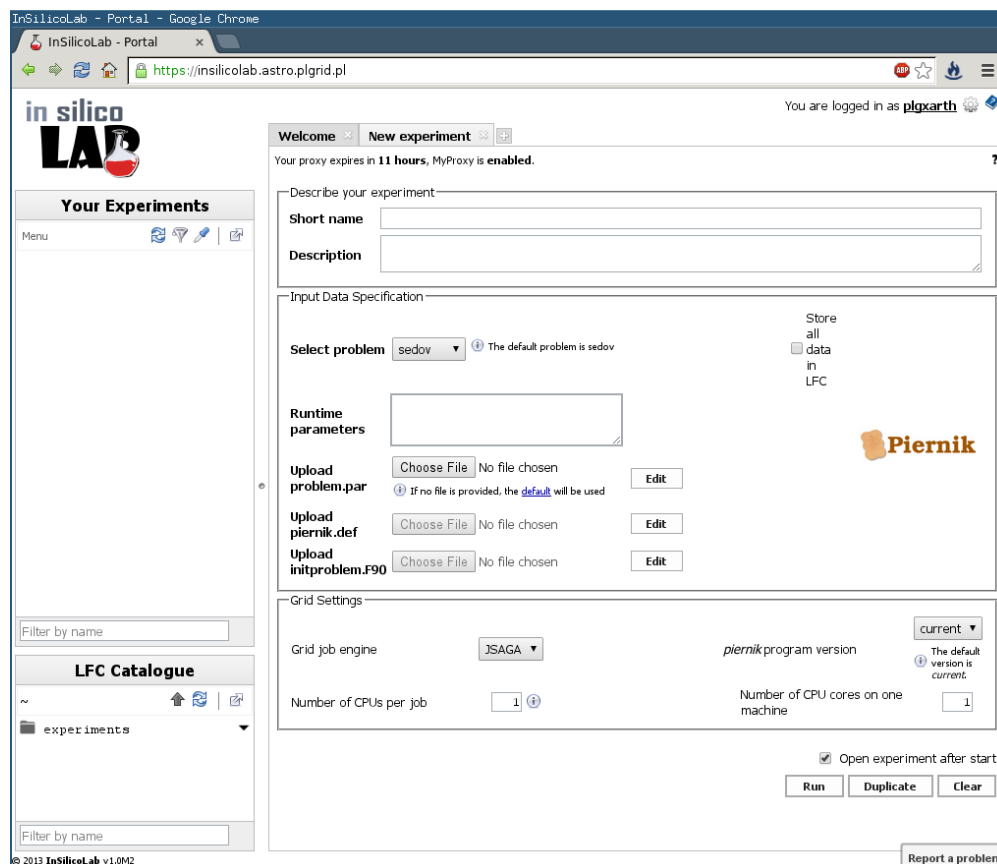
1. Załadowanie istniejącego proxy - wygenerowanego uprzednio na infrastrukturze. Instrukcja, jak wygenerować takie proxy, dostępna jest po kliknięciu w pytajnik w polu **Upload your proxy**. Jest to opcja bezpieczniejsza dla użytkownika, ale wymaga każdorazowego ładowania proxy po upływie jego ważności (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 problemem do testowania naddźwiękowej turbulencji magnetohydrodynamicznej.
- *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



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	<input type="text" value="JSAGA"/>	piernik program version	<input type="text" value="current"/>
			<small>The default version is current.</small>
Number of CPUs per job	<input type="text" value="5"/>	Number of CPU cores on one machine	<input type="text" value="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 Collapse

Input File															
<div style="display: flex; align-items: center;"> <div style="width: 15px; height: 15px; background-color: #28a745; margin-right: 5px;"></div> <div> <p>Job 01:</p> <p>RUNNING</p> </div> </div>	<table style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr><td>Index</td><td>1</td></tr> <tr><td>Job ID</td><td>https://lb02.grid.cyf-kr.edu.pl:9000/AL3poWA_gsFRtHBWUhrIew</td></tr> <tr><td>Status</td><td>running ⓘ</td></tr> <tr><td>Additional status</td><td>JSAGA:RUNNING_QUEUED</td></tr> <tr><td>Live log</td><td>http://chemportal.grid.cyfronet.pl:8080/livelogging/view.php?id=1374490962032-job1</td></tr> <tr><td>LFC location</td><td>/grid/vo.plgrid.pl/insilicolab-test/c.PL_o.PL-Grid_o.Uzytkownik_o.CYFRONET_cn.Kacper.Kowalik_cn.plgearth/experiments/experiment-1374490962032/job-01</td></tr> <tr><td colspan="2" style="text-align: right;">Download job files</td></tr> </table>	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/vo.plgrid.pl/insilicolab-test/c.PL_o.PL-Grid_o.Uzytkownik_o.CYFRONET_cn.Kacper.Kowalik_cn.plgearth/experiments/experiment-1374490962032/job-01	Download job files	
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/vo.plgrid.pl/insilicolab-test/c.PL_o.PL-Grid_o.Uzytkownik_o.CYFRONET_cn.Kacper.Kowalik_cn.plgearth/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
Collapse

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
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

/grid/vo.plgrid.pl/insilicolab-test/c.PL_o.Uzytkownik_o.CYFRONET_cn.Kacper_Kowalik_cn.plgxarth/experiments/experiment-1368950004002/sedov_final_tst_0008.h5

Owner /C=PL/O=PL-Grid/O=Uzytkownik_o.CYFRONET_cn.Kowalik/CN=plgxarth

Group vo.plgrid.pl

Permissions rw-rw-r--

Size 544 KB

Last modified 2013 May 19 12:15:39

Physical replicas

sra: //dpm.cyf-kr.edu.pl/dpm/cyf-kr.edu.pl/home/vo.plgrid.pl/generated/2013-05-19/file338803ee-2a05-48f5-9c2a-02f9956bf8d5

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](#)