

EDV am Lehrstuhl Richter

21. Juni 2010

Inhaltsverzeichnis

1	Vorbemerkungen	2
1.1	Über dieses Dokument	2
1.2	Ansprechpartner	2
2	Allgemeines	2
2.1	EDV am Lehrstuhl Richter	2
2.2	Benutzername und Passwörter	3
2.3	Internetpräsenz des Lehrstuhl Richter	3
2.3.1	Homepage Richter	3
2.3.2	Bibliotheksdatenbank	3
2.3.3	Mailinglisten	3
2.4	Nützliche Links	4
2.5	Lokale Geräte	4
2.6	Software	5
2.6.1	Internet und EMail	5
2.6.2	Desktop	5
2.6.3	Programmiersprachen	5
2.6.4	Wissenschaftliche Anwendungen	5
3	Multimedia-Windows-Rechner	6
3.1	Allgemeines	6
3.2	Zugriff auf Daten unter Linux	6
4	Drucken	6
4.1	Drucken von PostScript-Dateien	6
4.2	Drucken aus Anwendungen	7
4.3	Bedrucken von Folien	7
5	Speicherplatz	8
5.1	Verfügbare Verzeichnisse	8
5.2	Private Homepage	9
5.3	Backup	9

6	Rechnen	10
6.1	Jobs auf Arbeitsplatzrechnern	10
6.2	Jobs auf Cluster-Rechnern	10
6.3	ssh ohne Passwort	10
6.4	Athene-HPC-Cluster	11
6.4.1	Compiler, MPIs, Bibliotheken	11
6.4.2	Beispiel	12
6.5	Externe Ressourcen	13
7	Private Notebooks	14
8	Glossar	14

1 Vorbemerkungen

1.1 Über dieses Dokument

Diese kurze Einführung in die Computerressourcen am Lehrstuhl Richter soll einen Überblick über die vorhandenen Möglichkeiten geben und neue Lehrstuhlmitglieder mit unserem Computersystem vertraut machen. Als Ergänzung zu diesem Dokument dient die *EDV Policy am Lehrstuhl Richter*, die einige Verhaltensregeln zum reibungslosen Ablauf innerhalb des Lehrstuhls enthält. Aktuelle Versionen der beiden Dokumente können unter *Homepage Richter* → *Internal* abgerufen werden.

Manche Begriffe in diesem Dokument sind mit einem Rahmen hervorgehoben. Sie werden im Glossar genauer erläutert.

1.2 Ansprechpartner

Bei allen Fragen oder Problemen wenden Sie sich bitte an die Systemadministratoren:

Jan Bundesmann, PHY 4.1.17, Tel. 2016
Tobias Dollinger, PHY 4.1.17, Tel. 2016
Timo Hartmann, PHY 4.1.17, Tel. 2016
Viktor Krückl, PHY 7.1.04, Tel. 3194

2 Allgemeines

2.1 EDV am Lehrstuhl Richter

Jedem Lehrstuhlmitglied wird ein Arbeitsplatzrechner zur Verfügung gestellt. Das auf diesen Rechnern verwendete Betriebssystem ist Linux. Neben den Arbeitsplatzrechnern gibt es auch einige gemeinsam genutzte Geräte. Dazu gehören Drucker, der Linux-Rechencluster, zwei Multimedia-Windows-PCs, Lehrstuhl-Laptops und NASes.

Windows existiert grundsätzlich nur auf den Laptops und den Multimedia-Windows-PCs (PHY 4.1.29 und PHY 5.1.34).

2.2 Benutzername und Passwörter

Jeder Benutzer wird im EDV-System der Uni-Regensburg mit einem sog. NDS-*Kürzel* registriert. Dieses Kürzel besteht aus drei Buchstaben und fünf Ziffern, z.B. dau12345. Es ist zugleich der Benutzername für Linux.

Jeder Benutzer hat ein zentrales Passwort:

NDS-Passwort: Passwort für Windows, Linux und manche Internetangebote der Universität. Dieses Passwort muss alle 90 Tage geändert werden. Das Passwort kann unter

http://www.uni-regensburg.de/e/r/Benutzer/Allgemein/01504_de.phtml
geändert werden, oder, unter Linux, mit dem Befehl `passwd`.

Daneben gibt es noch einige weniger häufig genutzte Passwörter:

Bibliothekspasswort: Zum Ausleihen von Büchern aus der lokalenm Büchersammlung des Lehrstuhl Richters. Es kann unter

Physik → Mitarbeiter(innen) der Fakultät → Modify your own entry
geändert werden.

Samba-Passwort Für Verbindungen von Windows zum Linux-Homeverzeichnis. Änderungen unter:

<https://www-cgi.uni-regensburg.de/cgi-bin/RZD/smbpwd.phtml>

2.3 Internetpräsenz des Lehrstuhl Richter

2.3.1 Homepage Richter

Der Lehrstuhl Richter ist mit einer Homepage im Internet vertreten. Dort finden Sie alle Informationen über laufende Forschung, Publikationen, Vorlesungen und Seminare. Die Homepage finden sie unter:

<http://www.physik.uni-regensburg.de/forschung/richter/richter/>

2.3.2 Bibliotheksdatenbank

Der Lehrstuhl Richter hat eine Lehrstuhlbibliothek (PHY 4.1.13). Die Verwaltung dieser Bibliothek erfolgt über eine Datenbank, die unter *Homepage Richter* → *Internal* gefunden werden kann. Ausleihen und Rückgaben sind dort einzutragen!

2.3.3 Mailinglisten

Jeder Lehrstuhlmitarbeiter ist Mitglied einer Mailingliste: die Professoren bei `richter-profs`, alle anderen bei `richter-liste`. Über diese Mailinglisten erhält man Informatione wie z.B. Seminarankündigungen, wichtige Mitteilungen zum Computersystem, ...

Jedes Lehrstuhlmitglied kann selbst auch eine Nachricht an diese Listen schreiben: einfach eine Email an

`richter-liste@mailman.uni-regensburg.de`
`richter-profs@mailman.uni-regensburg.de`

senden. (Anmerkung: richter-profs nicht vergessen, falls auch die Professoren erreicht werden sollen!)

Falls eine Email an die Mitglieder des Lehrstuhls Grifoni gesendet werden muss, kann die Adresse

qtd@mailman.uni-regensburg.de

verwendet werden.

2.4 Nützliche Links

Neben diesem Dokument steht auch noch eine Vielzahl von Informationen auf den Webseiten der Universität Regensburg zur Verfügung. Eine kleine Auswahl von Links:

Homepage Richter → Internal:

<http://www.physik.uni-regensburg.de/forschung/richter/CMT/pages/internal.html>

EDV-Seite der Physikfakultät:

<http://www.physik.uni-regensburg.de/edv/>

Linux-Seite des Rechenzentrums:

http://www.uni-regensburg.de/e/r/Benutzer/Speziell/Linux/index_de.phtml

2.5 Lokale Geräte

CDROMs, Disketten oder USB-Sticks werden unter Gnome und KDE auf dem Desktop angezeigt und können durch einen einfachen Mausklick eingebunden werden; sie werden im Verzeichnis `/media/` gemountet. Der genaue Name variiert von Computer zu Computer, `ls /media/` gibt Aufschluss über den genauen Pfad.

WICHTIG: KDE-Benutzer müssen drauf achten, dass in *Kontrollzentrum* → *Arbeitsfläche* → *Verhalten* → *Geräte-Symbole* das Feld *Geräte-Symbole anzeigen* aktiviert ist.

Auf der Konsole erfolgt das Einbinden über `pmount`:

Floppy: `pmount /media/floppy` bindet die Diskette unter `/media/floppy` ein.
Mit `pumount /media/floppy` wird die Einbindung wieder gelöst.

CDROM: `pmount /dev/cdrom` bindet das CD-Laufwerk unter `/media/cdrom` ein (Beachte `dev↔media!`). Mit `pumount /media/cdrom` wird die Einbindung wieder gelöst.

USB-Sticks: Meistens kann der USB-Stick mit `pmount /dev/sda1` (oder auch `/dev/sda2`, ..., je nach Hardwareausstattung des Rechners) eingebunden werden. In diesem Fall ist jedoch die Einbindung über KDE oder Gnome zu bevorzugen.

2.6 Software

Auf dem in der Physik verwendeten Linux ist bereits eine Vielzahl von Programmen installiert. Sollten sie eine bestimmte Anwendung benötigen, so ist die Wahrscheinlichkeit sehr hoch, dass sie bereits installiert ist. Sollte jedoch einmal ein unbedingt benötigtes Programm fehlen, so setzen Sie sich bitte mit Ihren Systemadministratoren in Verbindung. Anleitungen zu Linux-Programmen können über den Befehl

`man Programmname`

abgerufen werden.

Einige Programmpakete (z.B. Mathematica) müssen vor der Verwendung freigeschaltet werden. Dies erfolgt über den Befehl `en` (Dieser listet die verfügbaren Pakete auf). Die Freischaltung muss auf jeder Konsole von neuem erfolgen.

Im Folgenden wird ein kleiner Überblick über vorhandene Software gegeben. Diese Aufzählung ist weit davon entfernt vollständig zu sein und soll nur als Einstieg dienen.

2.6.1 Internet und EMail

Der Standard-Internetbrowser ist `iceweasel` (im Grunde der Firefox, heißt jedoch aus Copyright-Gründen anders), das Standard-Mailprogramm und PIM ist `groupwise` (PIM steht für Personal Information Manager). Beide Programme können von der Konsole aus gestartet werden (`firefox` bzw. `groupwise`). Groupwise findet sich in Gnome und KDE in einem speziellen Programm-Ordner namens ReX-Debian.

Groupwise muß nicht weiter konfiguriert werden für den Zugriff auf das Universitätspostfach. Detaillierte Informationen zu Groupwise finden sich unter http://www.uni-regensburg.de/e/r/Benutzer/Allgemein/Email/Groupwise/index_de.phtml

Hinweis: Für den Zugriff auf EMail von außerhalb der Universität steht unter

<https://webmail.uni-regensburg.de/>

eine Web-basierte Oberfläche zur Verfügung.

2.6.2 Desktop

Standard-Desktops unter Linux sind *KDE* und *Gnome*. Der gewünschte Desktop kann beim Login gewählt werden.

2.6.3 Programmiersprachen

Standardmäßig stehen Compiler für C (`gcc`), C++ (`g++`) und Fortran (`gfortran` und NagWare[über `en`]) zur Verfügung.

2.6.4 Wissenschaftliche Anwendungen

Die Mathematikprogramme Maple (`xmapple`), Matlab (`matlab`) und Mathematica (`mathematica`) stehen zur Verfügung. Zur Darstellung von Daten kann

Gnuplot (`gnuplot`) oder `xmgrace` verwendet werden. Weitere Programme sind in den Paketquellen enthalten.

Verschiedene Versionen der professionellen Programme (Maple u.ä.) liegen im Ordner `/psi`.

3 Multimedia-Windows-Rechner

3.1 Allgemeines

Der Multimedia-Windows-PC in PHY 4.1.29 steht allen Lehrstuhlmitgliedern zur Verfügung. Beachten Sie bitte die an der Wand hängenden Hinweise! Ein zweiter Windows-PC steht im Großraumbüro PHY 5.1.34.

Der Windows-PC dient unter anderem zum Brennen von CDs und DVDs (mit *Nero*) und Scannen von Bildern. Außerdem sind verschiedene Graphikprogramme wie *CorelDraw* oder *Photoshop* installiert.

3.2 Zugriff auf Daten unter Linux

Um Daten von Linux auf Windows zu transferieren, steht ein unter Windows ein SSH-Client zur Verfügung, oder aber die Dateien werden auf dem uniweit verfügbaren Netzlaufwerk G: gespeichert.

SSH Secure Shell Client ermöglicht interaktiven Login auf einen Linux-Computer, mit *SSH Secure File Transfer Client* können Daten von Linux in ein Windows-Verzeichnis kopiert werden. Die Verbindung wird über das Menü *File* → *Connect...* gestartet. Bei *Host name* muss die Rechnernummer eines Linux-PCs eingegeben werden (z.B. `pc51015`), bei *User name* der Benutzername (NDS-Kürzel). Es ist ratsam, bei *Host name* Ihren eigenen PC zu verwenden. Bei *Password* muss schließlich das Unix-Passwort eingegeben werden.

Hinweis: Diese Anleitung finden Sie auch auf dem *HowTo* an der Wand neben dem Windows-PC!

Das G:-Laufwerk kann unter Linux über `rexmountG.py mountpoint` eingebunden werden.

4 Drucken

4.1 Drucken von PostScript-Dateien

Unter Linux können `PostScript` (PS)-Dateien (erkennbar an der Endung `.ps`) direkt von der Kommandozeile gedruckt werden. Dazu dienen die Befehle

```
lpr -PDruckername Datei.ps
kprinter Datei.ps
gtklp Datei.ps
```

Druckername ist dabei einer der für die Theoretische Physik verfügbaren Drucker. `kprinter/gtklp` stellen zwei ähnliche graphische Schnittstellen zur Druckauftragserteilung zur Verfügung. Sie bieten sich an, um komplexere Einstellungen vorzunehmen, beispielsweise kein Duplex, Druck auf Folien... Beide Programme können auch mit PDF-Dateien umgehen.

pt0, pt2, pt3, pt4: Schwarzweiß(SW)-Laserdrucker, duplexfähig.
Standort: PHY 5.1.20. Diese Drucker sind für den alltäglichen Gebrauch gedacht.

clj4: Farb-Laserdrucker, nicht duplexfähig.
Standort: PHY 5.1.20. Dieser Drucker ist für **Farbausdrucke** gedacht. Bitte keine SW-Ausdrucke an diesen Drucker senden! Der Farb-Laserdrucker ist für SW-Ausdrucke ungleich teurer und von deutlich schlechterer Qualität als die dafür ausgelegten SW-Laserdrucker.

Für Dokumente mit nur wenigen farbigen Seiten gilt daher: Nur die farbigen Seiten auf clj drucken, die übrigen auf einem der SW-Laserdrucker.

clj2: Farb-Laserdrucker, duplexfähig.
Standort: Druckerraum am Lehrstuhl Grifoni, PHY 3.1.13. Dieser Drucker ist für beidseitige Farbausdrucke geeignet. Auch hier gilt: Ausdrucke auf diesen Druckern sind sehr teuer und sollten sich daher nur auf das Nötigste beschränken.

4.2 Drucken aus Anwendungen

Neben dem Druck von PS-Dateien über die Kommandozeile kann auch aus den gebräuchlichen Anwendungsprogrammen unter Linux direkt gedruckt werden. Die Details unterscheiden sich dabei von Programm zu Programm. An einigen Beispielen werden daher typische Vorgehensweisen geschildert.

acroread (Acrobat Reader für PDF-Dateien): Der Druck wird über das Menü *File*→*Print* gestartet. Der gewünschte Drucker kann dann aus einer Liste ausgewählt werden.

soffice (StarOffice)/openoffice: Der Druck erfolgt über ein graphisches Interface, in dem die verschiedenen verfügbaren Drucker ausgewählt werden können.

firefox/mozilla/iceweasel: Der Druck wird über *File*→*Print...* gestartet. Alle nötigen Einstellungen können dann in einem graphischen Interface getroffen werden.

sonst Die meisten Programme greifen intern auf kprinter bzw. gtklp zu.

Außerdem bieten nahezu alle Programme die Möglichkeit, den Ausdruck in eine PS-Datei zu schreiben. Diese kann dann wie oben beschrieben mit `lpr` oder `kprinter/gtklp` gedruckt werden.

4.3 Bedrucken von Folien

Folien für die unterschiedlichen Druckertypen sind bei Frau Reißer (PHY 4.1.34) erhältlich.

Grundsätzlich gilt: **Nur die für einen bestimmten Drucker geeigneten Folien verwenden!** Beispielsweise dürfen für einen SW-Laserdrucker keine Tintenstrahl- oder Kopierfolien verwendet werden. Weiterhin sind die Folien

für SW-Laserdrucker **nicht** für den Farb-Laserdrucker geeignet! Im Zweifelsfall wenden Sie sich bitte an die Systemadministratoren.

Weiterhin ist zu beachten, dass **einseitiger** Druck gewählt ist. Für den Druck auf Folien in den Laserdruckern ist die manuelle Papierzufuhr zu benutzen. Diese Einstellungen können bequem über das graphische Interface von `kprinter` getätigt werden.

5 Speicherplatz

5.1 Verfügbare Verzeichnisse

Jeder Benutzer hat sein persönliches Home-Verzeichnis. Der dort verfügbare Speicherplatz beträgt 200-400 MB (`Quota`). Mit Hilfe des Befehls `quota` kann der noch verfügbare Speicherplatz abgefragt werden. Dieses Verzeichnis wird jeden Tag durch ein inkrementelles Backup gesichert (siehe auch Abschnitt 5.3). Zusätzlich zum Home-Verzeichnis steht noch folgender Speicherplatz zur Verfügung:

`/data1/Gruppe/Benutzername`: Speicherplatz auf einem Hardware-Raid (ca. 800 GB). Tägliches Backup (siehe auch Abschnitt 5.3).

Dieses Verzeichnis ist von jedem Physikrechner aus zu erreichen. Hier sollten (größere) wissenschaftliche Daten gespeichert werden. Es besteht prinzipiell keine Speicherplatzbeschränkung (`Quota`). Damit dies so bleiben kann, sollte jeder Benutzer verantwortungsvoll mit dem verfügbaren Platz umgehen!

Außerdem sollte die Ausgabe von noch laufenden Rechnungen **nicht** auf `/data1` gespeichert werden, da dies das tägliche Backup stört: Wenn auf `/data1` geschrieben wird, während das Backup gerade läuft, führt dies dazu, dass ihr Verzeichnis nicht vollständig gesichert wird. Zum Speichern der Daten von laufenden Rechnungen steht ein Verzeichnis unter `/richterscratch` zur Verfügung.

`/richterscratch/Gruppe/Benutzername`: Speicherplatz auf einem Hardware-Raid (ca. 2 TB). Kein Backup.

Daten können nach Ankündigung innerhalb einer Woche gelöscht werden. Auch dieses Verzeichnis kann von jedem Physikrechner erreicht werden. Hier sollen temporäre Zwischenergebnisse und Ergebnisse laufender Rechnungen gespeichert werden.

`/misc/condmat/Gruppe/Benutzername`: Speicherplatz auf einem Hardware-Raid (ca. 10 TB). Kein Backup. Wie `richterscratch`

`/temp.local/Benutzername`: Speicherplatz auf der lokalen Festplatte. Kein Backup.

Gruppe ist beispielsweise `richter`, `fabian`, ..., *Benutzername* das NDS-Kürzel, z.B. `dau12345`.

G: Unter Windows steht das Netzlaufwerk **G:** mit etwa 1 GB zur Verfügung, mit täglichem Backup. (Anmerkung: Bei der Anmeldung zu Windows darf nicht das Häkchen bei *Nur Arbeitsplatz* gesetzt sein!). Dieser Speicherbereich kann auch von Linux aus erreicht werden: Dazu führt man `rexmountG.py mountpoint` aus, wobei `mountpoint` ein leeres Verzeichnis sein muss.

5.2 Private Homepage

Die Universität stellt jedem Nutzer Weospace für eine private Homepage zur Verfügung. Diese kann sowohl von Linux als auch Windows aus erstellt werden:

Linux: Nachdem man sich mittels `ssh` auf `rex1` eingeloggt hat, kann die Homepage unter dem Verzeichnis `public_html` im Homeverzeichnis abgelegt werden. Es ist dabei wichtig bei diesem Verzeichnis Leserechte für alle zu setzen (`chmod` benutzen!). Standardmäßig stehen etwa 50MB zur Verfügung. Die URL für einen Nutzer, z.B. `vip12345`, lautet:
<http://homepages.uni-regensburg.de/~vip12345/>

Windows: Unter Windows steht das Netzlaufwerk **G:** zur Verfügung, mit etwa 1 GB Speicherplatz. Die Homepage wird im Verzeichnis **G:\www** abgelegt. Die URL lautet
<http://www-nw.uni-regensburg.de/~vip12345/>

Der Zugriff auf **G:** von Linux aus wird in Abschnitt 5.1 besprochen.

Weitere Informationen zu Webseiten an der Universität finden sich unter:
http://www.uni-regensburg.de/e/r/Webmaster/01536_de.phtml

5.3 Backup

Sowohl das Home-Verzeichnis als auch `/data1` werden einmal täglich als Backup gesichert. Die Daten sind dabei bis zum Stand vor 4 Wochen gespeichert. In diesem Zeitraum kann jeder Tag abgerufen werden, ältere Dateien können nicht wiederhergestellt werden.

Das Backup kann über den *Tivoli*-Backupclient abgerufen werden:

Home-Verzeichnis: Einloggen auf Rechner `rex2` mit `ssh rex2` und Starten des Backup-Programms mit `dsmj -server=titan7`.
Titan7 → File level → t7h → physik → NDS-name
Bei *Restore destination* kann in diesem Fall leider *Original location* nicht gewählt werden. Stattdessen muss *Following location* gewählt werden und im Textfeld daneben der vollständige Pfad des Zielverzeichnisses eingegeben werden, z.B. `/home/abc12345/`.

/data1: `ssh pc58590, dsmj`.
`pc50793` → File level → data50-backup

Eine kurze Beschreibung von `dsmj` findet sich unter

http://www.uni-regensburg.de/e/r/Benutzer/Speziell/Linux/01682_de.phtml

6 Rechnen

6.1 Jobs auf Arbeitsplatzrechnern

Jeder Benutzer kann seinen Arbeitsplatzrechner dazu benutzen, Rechnungen laufen zu lassen.

Auf den übrigen Arbeitsplatzrechnern des Lehrstuhls Richter können ebenfalls Rechnungen gestartet werden. Programme müssen dort jedoch stets mit `nice +19` gestartet werden. Pro Rechner darf nur ein Job laufen.

Eine Liste der Arbeitsplatzrechner findet sich unter *Homepage Richter* → *Internal* bzw. in der `Ganglia`-Übersicht mit mehr Details.

6.2 Jobs auf Cluster-Rechnern

Den Lehrstühlen Richter, Schäfer und Braun steht ein eigener Linux-`Cluster` zur Verfügung. Eine Liste der verfügbaren Cluster-Rechner befindet sich unter *Homepage Richter* → *Internal*.

Jedes Lehrstuhlmitglied ist berechtigt, auf diesem Cluster Rechnungen laufen zu lassen. Die Zahl der Jobs pro Rechner darf die Anzahl der Prozessoren nicht übersteigen. Die Liste der Cluster-Rechner gibt Ihnen darüber Auskunft, wie viele Kerne der jeweilige Prozessor besitzt.

Hinweis: Weiterführende Informationen zum Thema *Job submitting* können auch in der *EDV Policy am Lehrstuhl Richter* nachgelesen werden.

6.3 ssh ohne Passwort

Um einen Rechenjob auf einem anderen Computer zu starten, muss sich der Benutzer mittels `ssh` auf diesem Rechner einloggen.

Damit der Benutzer nicht für jede SSH-Verbindung sein Passwort eingeben muss, können *SSH-Schlüssel* erzeugt werden:

```
ssh-keygen -t dsa
```

erzeugt ein Schlüsselpaar `id_dsa` (privater Schlüssel) und `id_dsa.pub` (öffentlicher Schlüssel) in `.ssh` im Homeverzeichnis, dazu übernimmt man einfach den von `ssh-keygen` vorgeschlagenen Pfad für den Schlüssel. Auf jeden Fall sollte auch ein Passwort festgelegt werden.

Im nächsten Schritt hängt man den neuen öffentlichen Schlüssel `id_dsa.pub` an die Datei `.ssh/authorized_keys` an, z.B. über

```
touch .ssh/authorized_keys
cat .ssh/id_dsa.pub >> .ssh/authorized_keys
```

Schließlich aktiviert man das erzeugte Schlüsselpaar über `ssh-add` und gibt dazu das oben festgelegte Passwort ein. `ssh-add` muss nach jedem Neustart aufgerufen werden.

Eine ausführlichere Erklärung zu SSH-Schlüsseln (u.a. zum Einloggen auf Computern außerhalb der Universität Regensburg) findet sich unter

http://www.physik.uni-regensburg.de/edv/unix/ux_success/ssh.html/

6.4 Athene-HPC-Cluster

Das Rechenzentrum (RZ) der Universität Regensburg stellt einen uniweiten Linux-Cluster zur Verfügung:

<http://www.uni-regensburg.de/e/r/Benutzer/Speziell/Linux/Cluster/01787.de.phtml>

Um darauf rechnen zu können, muß man einen Account bei Rechenzentrum beantragen unter obiger URL.

Zur Benutzung des Athene-Clusters muss man sich mittels `ssh dau12345@athene` auf dem Login-Knoten `athene1` einloggen. Die aus der Physik bekannten Verzeichnisse `/data1`, `/richterscratch` und `/misc/condmat` sind dort nicht verfügbar. Außerdem besitzt jeder User ein eigenes Home-Verzeichnis im Athene-Cluster. Das normale Linux-Homeverzeichnis ist unter `/lhome/dau12345` erreichbar, jedoch nur auf dem Login-Knoten `athene1`. Die Jobs werden auf anderen Rechnern abgearbeitet und sollten deshalb nicht auf `/lhome` zugreifen. Im Athene-Home-Verzeichnis hat man eine Speicherplatzbeschränkung von 2 GB bei maximal 10000 Dateien, es wird jede Nacht gebackuped. Weiterer Speicherplatz steht unter `/data` (insg. 15TB), `/scratch1` (15TB) und `/scratch2` (15TB) zur Verfügung, dieser wird jedoch nicht gesichert.

Der Athene-Cluster ist mit einem `Queueing`-System (PBS) ausgestattet. Zur Übersicht über die aktuelle Queue dient der Befehl `qstat`. Verwaltungsarbeiten an den Jobs werden mit `qalter` ausgeführt.

Neue Jobs können mit dem Befehl

```
qsub Script-Datei
```

gestartet werden. *Script-Datei* ist dabei eine Textdatei, die Angaben zum benötigten Speicher, Dauer des Jobs u.ä. enthält.

6.4.1 Compiler, MPIs, Bibliotheken

Module Viele Bibliotheken, speziell zur Nutzung von `MPI`, sind in sogenannten Modulen verfügbar, die bei Bedarf geladen werden können. Dafür dient das spezielle `module`-Kommando (nur verfügbar auf `athene1`). Einige Beispiele für seine Verwendung:

```
module avail          (Welche Module existieren?)
module load parastation-gcc (Laden eines Moduls - hier parastation-gcc)
module list          (Welche Module sind geladen?)
module unload parastation-gcc (Entfernen eines Moduls - hier parastation-gcc)
```

Beispiel - Intel Compiler Mit dem Befehl `module load intel-11.0` wird der Intel-Compiler geladen und es stehen fortan die Befehle `icc`, `icpc` und `ifort` zur Verfügung.

Mittels `module load impi-intel` werden die entsprechenden Multi-Prozessor-Compiler `mpiicc`, `mpiicpc` und `mpiifort` geladen.

Math Kernel Library Um die Intel-MKL-Librarys zu nutzen müssen einige Umgebungsvariablen richtig gesetzt sein. Dafür gibt es unter `/opt/intel/mkl/10.1.1.019/tools/environment/` einige Skripte, die je nach verwendeter Shell und Architektur die entsprechenden Befehle beinhalten. Sie werden mittels

```
source /opt/intel/mkl/10.1.1.019/tools/environment/skript
eingebunden.
```

Für die GNU-Compiler muß der Compilerbefehl um folgendes ergänzt werden:

```
-lmkl_gf_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -lpthread -lm
(-lmkl_gf_lp64 -lmkl_gnu_thread -lmkl_core -lguide für Multithreading)
```

Beim Intel-Compiler ist dies:

```
-lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -lpthread
(-lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -lguide -lpthread für
Multithreading; um die Zahl der Threads zu steuern, benutzt man z.B.:
export OMP_NUM_THREADS=2)
```

ATLAS Die ATLAS-Bibliothek ist zu finden unter `/opt/lapack/atlas-3.8.2/lib`.

6.4.2 Beispiel

Login

```
> ssh athene1
```

Beispiel-Datei "Hello World!"

```
/* hello_mpi.c */
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <mpi.h>
int main (int argc, char **argv)
{
    int rank, size;
    MPI_Init (&argc, &argv);          /* starts MPI */
    MPI_Comm_rank (MPI_COMM_WORLD, &rank); /* get current process id */
    MPI_Comm_size (MPI_COMM_WORLD, &size); /* get number of processes */

    printf ( "Hello world from process %d of %d\n" , rank, size);
    MPI_Finalize ();
    return EXIT_SUCCESS;
}
```

Kompilieren mit dem GNU-Compiler und Parastation MPI

```
> module load parastation parastation-gcc
> mpicc -o hello_mpi hello_mpi.c
```

Submit-Skript (job.sh)

```
#!/bin/bash
#PBS -l nodes=1:ppn=8
#PBS -l walltime=00:03:00
#PBS -l pmem=1024mb

cd ${PBS_O_WORKDIR}
mpiexec -np 8 ./hello_mpi
```

Die ersten Zeilen nach der Magic Line mit dem Interpreter sind obligatorisch. Zuerst wird die Zahl der Knoten angegeben, auf denen das Programm laufen soll und wieviele Prozessoren jeweils belegt werden, die Walltime in der Zeile danach gibt die maximale Zeit an, die für alle Jobs zur Verfügung steht. Danach wird der Job automatisch abgebrochen. Die dritte "PBS"-Zeile gibt an, wie viel Speicher jeder einzelne Prozess des Jobs maximal braucht.

Jobs können nicht beliebig groß werden. Neben den physikalischen Beschränkungen der Rechenknoten (Zahl der Prozessoren und Größe des Arbeitsspeichers) gibt es Limitationen durch das Queuing-System. Jeder User kann maximal 20 Jobs auf einmal in die Queue stellen. Jeder Job kann maximal 32 Knoten verwenden (256 Kerne).

Ausführen und Ausgabe

```
> qsub job.sh
12345.athene2
> cat job.sh.o12345
Hello world from process 0 of 8
Hello world from process 1 of 8
...
Hello world from process 6 of 8
Hello world from process 7 of 8
```

Die Ausgabe des Jobs wird in `skript.o12345` bzw. `skript.e12345` für die Fehlermeldungen geschrieben.

6.5 Externe Ressourcen

Neben der universitätseigenen Computerausstattung gibt es auch noch externe Stellen, die Rechenzeit zur Verfügung stellen. Dazu gehören unter anderem:

Leibniz Rechenzentrum (LRZ) München

<http://www.lrz-muenchen.de/>

John von Neumann Institut für Computing (NIC), FZ Jülich

<http://www.fz-juelich.de/nic/>

Um Rechenzeit an einem der Supercomputer oder Cluster dieser Institutionen zu erhalten, muss ein Antrag für ein wissenschaftliches Projekt gestellt werden. Nähere Informationen und Termine dafür finden sie auf den jeweiligen Webseiten. Bei Fragen wenden Sie sich bitte an die Systemadministratoren.

7 Private Notebooks

Auch mit privaten Notebooks kann das Universitätsnetz benutzt werden, allerdings muss das Notebook zuvor registriert werden:

Um mit Hilfe eines Ethernetkabels oder über WLAN eine Internetverbindung herzustellen, muss die Hardwareadresse der Netzwerkkarte an der Universität registriert werden: Dazu muss das Onlineformular <http://register.uni-regensburg.de> ausgefüllt werden. Diese Webseite wird von einem unregistrierten Rechner aus automatisch aufgerufen.

Nach der Anmeldung wird eine Email zugeschickt, sobald der Rechner beim DHCP-Server registriert ist, das dauert etwa 20 Minuten. Die Registrierung gilt immer nur befristet maximal bis zum 15. Februar eines Jahres, kann aber online verlängert werden. Kabelgebundenes Netzwerk funktioniert dann ohne weitere Schritte, um das Funknetz zu nutzen gibt es zwei verschiedene Möglichkeiten:

- **unifunk1:** Unverschlüsseltes Netz, das nur mit Hilfe eines VPN-Clients benutzt werden kann.
- **802.11i:** WPA/WPA2-verschlüsseltes Netzwerk.

Detaillierte Anweisungen zur Konfiguration des Computers zur Nutzung des Funknetzes finden sich unter <http://www-wlan.uni-regensburg.de/konfiguration.html> und <http://www-wlan.uni-regensburg.de/winxp/nutzung.html>.

8 Glossar

NDS steht für *Novell Directory Service*. Es dient der Benutzerverwaltung an der Universität Regensburg.

NAS steht für *Network Attached Storage*. Man bezeichnet damit Speicher, der allen PCs in einem Rechnernetz zur Verfügung steht.

PostScript ist ein Dateiformat für Dokumente. Diese Art von Datei wird beispielsweise von \LaTeX (dort: `dvips`) erzeugt. PostScript-Dateien können unter Linux direkt gedruckt werden.

Quota bedeutet, dass der Speicherplatz eines Benutzers in einem Verzeichnis begrenzt ist. Dies dient dazu, das Datenaufkommen in vertraglichen Mengen zu halten.

Cluster ist eine Zusammenschluss von Computern speziell zum Zweck, darauf Rechenjobs zu starten.

Queueing bedeutet, dass Rechnungen auf einem Cluster nicht direkt gestartet werden können. Vielmehr wird dem *Queueing-System* Informationen über Speicher- und Rechenzeitbedarf eines Programms übergeben. Das *Queueing-System* entscheidet dann je nach Auslastung des Clusters, wann der Job gestartet wird.

Ganglia ist ein System zur Datenerfassung in einem Rechencluster. Insbesondere werden die Rechenauslastung und die Verteilung der Rechenaufträge auf Teilnehmergruppen registriert.

MPI steht für *Message Passing Interface*. Es handelt sich dabei um eine Bibliothek, mit der ein Programm parallelisiert werden kann. MPI-Programme müssen mit `mpirun` gestartet werden. Weitere Informationen finden Sie auf <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/>