

Visualisierungs- cluster

Zugang



Martin Aumüller

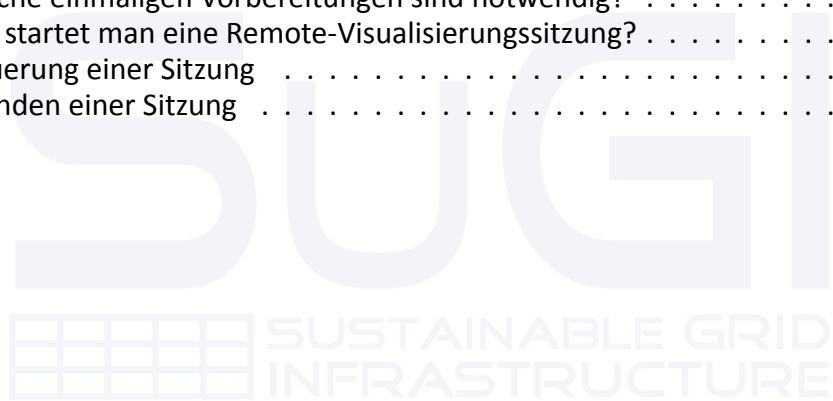
E-Mail: [<aumueller@uni-koeln.de>](mailto:aumueller@uni-koeln.de)

Sebastian Breuers

E-Mail: [<s.breuers@uni-koeln.de>](mailto:s.breuers@uni-koeln.de)

Inhaltsverzeichnis

1 Remote-Visualisierung für Mitglieder der VO lifescience	3
1.1 Was nützt Ihnen Remote-Visualisierung?	3
1.2 Wer kann den Dienst nutzen?	3
1.3 Bereits verfügbare Software	3
1.4 Probleme, Wünsche und Anregungen	4
2 Zugang zum Grid	4
3 Zugang über VNC	4
3.1 Was bietet Ihnen VNC?	4
3.2 Welche einmaligen Vorbereitungen sind notwendig?	4
3.3 Wie starte ich eine VNC-Sitzung auf dem Visualisierungs-Cluster?	5
3.4 Wie starte ich den VNC-Klienten mit meinen Zugangsdaten?	7
3.5 Starten von Anwendungen in der VNC-Sitzung	8
3.6 Beenden einer Sitzung	8
4 Remote-Visualisierung mit VirtualGL	9
4.1 Wie funktioniert Remote-Visualisierung mit VirtualGL	9
4.2 Welche einmaligen Vorbereitungen sind notwendig?	9
4.3 Wie startet man eine Remote-Visualisierungssitzung?	9
4.4 Steuerung einer Sitzung	11
4.5 Beenden einer Sitzung	11



1 Remote-Visualisierung für Mitglieder der VO lifescience

1.1 Was nützt Ihnen Remote-Visualisierung?

Sie fragen sich vielleicht, ob Ihnen der Dienst Remote-Visualisierung Vorteile bringt. Sie profitieren insbesondere davon, wenn

- Sie nicht über leistungsfähige Hardware, insbesondere Grafikhardware, an Ihrem Arbeitsplatz verfügen,
- die in Ihren Simulationsläufen erzeugten Daten groß sind und Sie sich durch die Auswertung direkt auf dem Cluster den langwierigen Transfer dieser sparen können,
- auf Ihrem Rechner nicht die gewünschte Software zur Verfügung steht.

1.2 Wer kann den Dienst nutzen?

Alle Inhaber eines D-Grid-Zertifikats der VO lifescience sind berechtigt, das SuGI-Visualisierungscluster zu nutzen. Wie Sie Mitglied der VO lifescience werden und eine kurze Einführung, wie auf dem SuGI-Cluster Jobs gerechnet werden können, finden Sie hier:

http://sugi.d-grid.de/fileadmin/user_upload/files/pdf/Nutzung-SuGI-Cluster.pdf

Wie nutzt man den Dienst?

Wir bieten Ihnen zwei Zugangsmöglichkeiten zur Remote-Visualisierung:

mittels eines VNC-Klienten diese Möglichkeit empfehlen wir für einen ersten Test, da das nur die Installation einer kleinen Software auf Ihrem Rechner erfordert (Zugang über VNC, S. 4),

über das X11-Protokoll und mittels eines VirtualGL-Klienten das empfehlen wir für bestmögliche Leistung und damit sich die entfernt laufende Anwendung nahtlos in Ihre Arbeitsumgebung integriert oder falls Sie eine stereografische 3D-Darstellung (allerdings nicht mit dem von uns bereitgestellten Windows-Klienten möglich) wünschen (siehe Remote-Visualisierung mit VirtualGL, S. 9).

Beide Methoden setzen einen Zugang zum Grid voraus.

1.3 Bereits verfügbare Software

Auf dem Visualisierungscluster wurden bereits einige Visualisierungssoftwarepakete installiert:

- ParaView – Parallelisierte, auf VTK basierendes Visualisierungssystem (<http://www.paraview.org/>),
- COVISE – Collaborative Visualisation and Simulation Environment (<http://www.hls.de/organization/av/vis/covise/>),
- VMD – Virtual Molecular Dynamics (<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>),
- PyMOL – Molecular Viewer (<http://www.pymol.org/>),
- Grace – 2D-Graphen (<http://plasma-gate.weizmann.ac.il/Grace/>),
- MPlayer und MEncoder – Abspielen und Kompression von Videos (<http://www.mplayerhq.hu/>).

Wenn Sie Ihre Anwendung in dieser Liste nicht finden, sprechen Sie uns gerne unter

viscluster-support@uni-koeln.de

an!

1.4 Probleme, Wünsche und Anregungen

Haben Sie Schwierigkeiten, so zögern Sie bitte nicht und kontaktieren uns unter

viscluster-support@uni-koeln.de.

Sollten Sie für Ihre Arbeit weitere Softwarepakete zur Visualisierung benötigen, installieren wir diese gerne.

2 Zugang zum Grid

Auf dem Rechner

```
grid.sugi.uni-koeln.de
```

finden Sie alle in dieser Anleitung angesprochenen Skripte für den Zugang zum Visualisierungscluster vorinstalliert. Auf diesem können Sie sich als Grid-Nutzer per GSI-SSH einloggen. Für Grid-Nutzer, die gleichzeitig einen HPC-Zugang an der Universität zu Köln besitzen, ist zusätzlich aus dem UKLAN (Netz der Universität zu Köln) der Zugang über SSH möglich.

Hinweise für den Zugang zu `grid.sugi.uni-koeln.de` finden Sie im oben schon angesprochenen Dokument

http://sugi.d-grid.de/fileadmin/user_upload/files/pdf/Nutzung-SuGI-Cluster.pdf.

Alternativ können Sie die benötigten Skripte zur Installation auf Ihrem Grid-Zugangsrechner auch mittels Subversion von <https://subversion.rrz.uni-koeln.de/svn/remotervis> beziehen.

3 Zugang über VNC

VNC ist ein Akronym für *Virtual Network Computing*. Diese Technologie ist eine Möglichkeit mit einem VNC-Klienten auf einen remote laufenden, per VNC exportierten Desktop zuzugreifen.

3.1 Was bietet Ihnen VNC?

Über VNC wird der Zugriff auf eine vollständige Desktop-Umgebung realisiert. Dies ist im Falle des Visualisierungsclusters an der Universität zu Köln der GNOME-Desktop.

Dabei sind die Anforderungen an die Kenntnisse und Einstellungen in der lokalen Arbeitsumgebung, also Ihrem Rechner, sehr gering. Sie benötigen lediglich einen VNC-Klienten, dem die Zugangsdaten, die beim Starten der VNC-Sitzung auf dem Visualisierungscluster ausgegeben werden, übergeben werden. Zusätzlich hierzu können innerhalb einer VNC-Sitzung auch die Vorteile von VirtualGL (siehe Remote-Visualisierung mit VirtualGL, S. 9) genutzt werden.

3.2 Welche einmaligen Vorbereitungen sind notwendig?

3.2.1 Installation eines VNC-Klienten

Es wird empfohlen als Applikation für den VNC-Klienten TigerVNC zu verwenden. Dieses Produkt kann von den Projektseiten auf SourceForge

<http://sourceforge.net/projects/tigervnc/>

heruntergeladen werden. Einige Linux-Distributionen bieten ihren Nutzern auch vorkompilierte Pakete an, die über das jeweilige Paketverwaltungssystem nachinstalliert werden können.

Installation für Windows Laden Sie von den TigerVNC-Projektseiten auf SourceForge (<http://sourceforge.net/projects/tigervnc/>) den Installer in der aktuellsten Version herunter und führen ihn aus. Schlussendlich ist der VNC-Klient dann mit über das *Start*-Menü erreichbar:

Start → Programme → TigerVNC → TigerVNC Viewer

Installation für Linux Falls Ihre Linux-Distribution kein vorkompiliertes Paket für TigerVNC anbietet, laden Sie von den TigerVNC-Projektseiten auf SourceForge (<http://sourceforge.net/projects/tigervnc/>) den Quelltext herunter (`tigervnc-'Version'.tar.gz`) und speichern ihn lokal. Wechseln Sie mit `cd` in das Verzeichnis, in das Sie die Quellen heruntergeladen haben. Anschließend entpacken Sie das Archiv mit dem Befehl

```
tar xzvf tigervnc-'Version'.tar.gz
```

Wechseln Sie dann mit

```
cd tigervnc-'Version'/unix
```

in das Verzeichnis für die UNIX-Komponenten des TigerVNC-Klienten. Führen Sie hier folgenden Befehl aus:

```
./configure --prefix=$HOME/local/tigervnc-1.0.1
```

Mit `--prefix` geben sie den Installationspfad an, in den TigerVNC installiert werden soll. Wenn Sie diese Option weglassen, wird per Voreinstellung die systemweite Installation gewählt. Hierzu sind `root`-Rechte erforderlich.

Falls Sie weitere Optionen für den `configure`-Aufruf suchen, geben Sie einfach

```
./configure --help
```

ein. Eventuell müssen einige Pakete nachinstalliert werden, die zur Kompilation benötigt werden.

Sofern der `configure`-Aufruf erfolgreich abgeschlossen wurde, führen Sie nun

```
make && make install
```

aus.

Anschließend befindet sich in dem von Ihnen gewählten Prefix, in diesem Fall `$HOME/local/tigervnc-1.0.1`, im Unterverzeichnis `bin` der `vncviewer`:

```
$HOME/local/tigervnc-1.0.1/bin/vncviewer
```

3.3 Wie starte ich eine VNC-Sitzung auf dem Visualisierungs-Cluster?

Wie im Abschnitt „Wer kann den Dienst nutzen?“ (S. 3) bereits beschrieben, können alle Mitglieder der VO *lifescience* den Visualisierungsservice nutzen. Diesen Personen ist ebenso der Zugang zum Rechner

```
grid.sugi.uni-koeln.de
```

möglich. Zum einen per GSI-SSH für Grid-Nutzer die *keinen* HPC-Zugang an der Universität zu Köln haben oder von außerhalb des UKLAN (das Netz der Universität zu Köln) zugreifen möchten, zum anderen aus dem UKLAN zusätzlich auch per SSH für HPC-Nutzer, die gleichzeitig Grid-Nutzer sind.

Von diesem Rechner kann mit dem Programm

```
rvvnc
```

eine VNC-Sitzung zur Remote-Visualisierung gestartet werden. Dabei wird folgende, exemplarisch zu verstehende, Ausgabe generiert:

```
bash-3.1$ rvvnc
INFO: A Job executing the following skript:
INFO: Skriptname: vnc-26638.sh
INFO: with arguments:
INFO: is sent to submit.sugi.uni-koeln.de with parameters:
INFO: $HOME relative path: rvfiles/20100329_1602
INFO: Nodes: 1
INFO: CPUS per Node: 1
INFO: Task Ids:
INFO: Memory (MB): 250
INFO: CPU time (minutes): 120
INFO: Wall time (minutes): 120
INFO: Grid lifetime (days): 30
INFO: Queue: vis
INFO:
INFO: GSI operations will be executed on grid.sugi.uni-koeln.de.
WARNING: Be sure that submit.sugi.uni-koeln.de and grid.sugi.uni-koeln.de share the same home directories
WARNING: as input files and the script to be executed is copied to grid.sugi.uni-koeln.de
INFO: The relative path structure on the remote host is created.
Warning: untrusted X11 forwarding setup failed: xauth key data not generated
Warning: No xauth data; using fake authentication data for X11 forwarding.
INFO: The skript file
INFO: '/home/dgls0029/rvfiles/20100329_1602/vnc-26638.sh'
INFO: is copied to
INFO: 'grid.sugi.uni-koeln.de:~/rvfiles/20100329_1602/vnc-26638.sh'.
vnc-26638.sh          100% 1662      1.6KB/s   00:00
INFO: Adding executable flag since gsiftp does not support permissions preservasions.
Warning: untrusted X11 forwarding setup failed: xauth key data not generated
Warning: No xauth data; using fake authentication data for X11 forwarding.
Submitting job...Done.
Job ID: uuid:bd8c8ee6-3b3b-11df-a217-0050568a79f6
Termination time: 04/28/2010 16:02 GMT
Access data to your vnc session:
Host: vis-0-4.sugi.uni-koeln.de:1

Password: rai8dioqc

Be aware that an older vnc password is overwritten by this new password,
meaning that every previously started session is from now on accessible
by this password.

Every vnc session is started for 2 hours.
We recommend that you logout from your vnc session when you are ready
with your work by using the 'Places --> Logout' menu entry of the GNOME
window manager to ensure that the ressource can be freed for a new session.

To start your vnc session a job is submitted to the grid components
administering the visualisation cluster. This means that some grid specific
files were created at /home/dgls0029/rvfiles/20100329_1602
These files can be easily deleted after your job is finished with

rm -r /home/dgls0029/rvfiles/20100329_1602
```

3.4 Wie starte ich den VNC-Klienten mit meinen Zugangsdaten?

Die Einträge von Host und Passwort, wie in der obigen Ausgabe zu sehen, können direkt im VNC-Klienten verwendet werden:

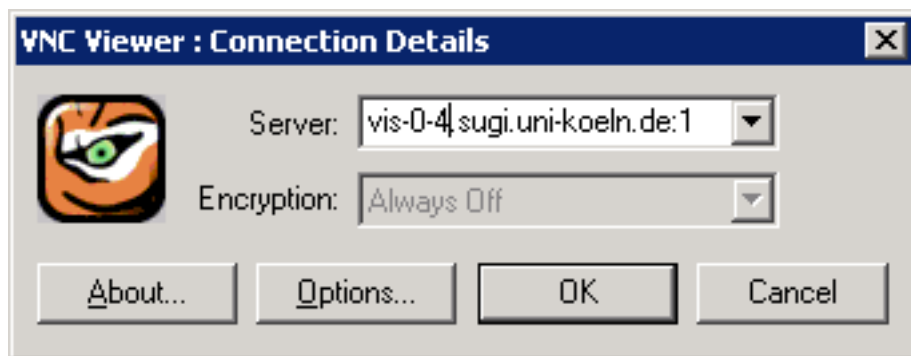
```
Access data to your vnc session:  
Host: vis-0-4.sugi.uni-koeln.de:1  
Password: rai8dioqc
```

3.4.1 Windows

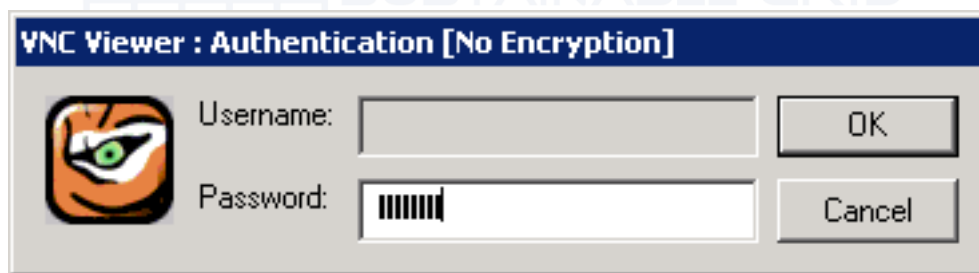
Starten Sie den Klienten über

Start → Programme → TigerVNC → TigerVNC Viewer

und geben Sie in dem sich öffnenden Dialog „Connection Details“ für den Server den Hosteintrag (in diesem Fall `vis-0-4.sugi.uni-koeln.de:1`)



an und bestätigen Sie den Eintrag mit `Enter`. Anschließend geben Sie in dem sich öffnenden Dialog „Authentication“



das Passwort (in diesem Fall `rai8dioqc`) ein.

3.4.2 Linux

Falls Sie die Installation wie oben beschrieben durchgeführt haben, sollte Ihnen folgender Befehl zur Verfügung stehen:

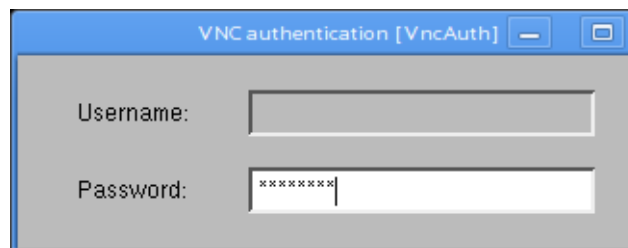
```
$HOME/local/tigervnc-1.0.1/bin/vncviewer
```

Diesen geben Sie nun auf der Konsole ein. Anschließend öffnet sich folgendes Fenster:



In dieses tragen Sie bitte die Hostangabe ein (in diesem Fall `vis-0-4.sugi.uni-koeln.de:1`) und bestätigen mit `Enter`.

In den folgenden Authentifizierungsdialog tragen Sie das angegebene Passwort ein (in diesem Fall `rai8dioqc`):



3.5 Starten von Anwendungen in der VNC-Sitzung

Zum Starten der vorinstallierten Visualisierungsanwendungen bzw. eines Terminals zum Starten hardwarebeschleunigter OpenGL-Programme haben wir Icons auf Ihren Desktop gelegt. Falls für Ihr Benutzerkonto diese oder noch nicht alle Icons angelegt sind, so können Sie das selbst durch Aufruf von

```
/opt/rrzk/vis/remotervis/desktop/install-xdg.sh
```

nachholen.

3.6 Beenden einer Sitzung

Der Ihnen zugewiesene Visualisierungsserver wird automatisch wieder für andere Nutzer freigegeben, wenn Sie sich ausloggen. Verwenden Sie dazu den Eintrag „Log Out...“ im Menü „System“ in der Leiste am oberen Rand des Desktops im VNC-Klienten.

Bitte beachten Sie: die Zeit für eine *Visualisierungssitzung ist auf zwei Stunden begrenzt*. Danach werden alle Ihre Anwendungen zwangsweise beendet und nicht gespeicherte Daten gehen unwiederbringlich verloren.

4 Remote-Visualisierung mit VirtualGL

4.1 Wie funktioniert Remote-Visualisierung mit VirtualGL

Mithilfe einer speziellen OpenGL-Bibliothek werden OpenGL-Aufrufe abgefangen und nicht von der Grafikkarte in Ihrem Arbeitsplatzrechner sondern vom sehr leistungsfähigen Grafika-dapter im Visualisierungscluster ausgeführt. Anstatt der OpenGL-Aufrufe werden nur JPEG-Bilder an den *VirtualGL-Klienten* (`vglclient`) auf Ihrem Rechner geschickt.

4.2 Welche einmaligen Vorbereitungen sind notwendig?

4.2.1 Firewalls

Stellen Sie sicher, dass die TCP-Ports 4242 (zur Übertragung der komprimierten 3D-Grafiken) sowie 6000 (für die 2D-Elemente der Anwendung) mittels des X11-Protokolls Ihres Rechners aus dem Visualisierungs-Cluster (134.95.115.160/27) erreichbar sind. Das erfordert eine korrekte Konfiguration der Firewall/des Paketfilters Ihres Betriebssystems sowie unter Umständen die Mithilfe Ihres Netzwerkadministrators, damit Access Control Lists (ACLs) auf Routern Ihrer Einrichtung angepasst werden können.

4.2.2 Installation der Software

Windows Laden Sie das Paket zur automatischen Installation von

<http://vis.uni-koeln.de/research/remotervis/vglwin/>.

herunter und führen Sie dieses aus. Installieren Sie dabei bitte alle Teile. (Wir haben Informa-tionen zum Selbstkompilieren dieses X-Servers für Windows auf

<https://subversion.rrz.uni-koeln.de/trac/remotervis/wiki/Xwin>

zusammengestellt.)

4.2.3 Linux/Mac OS X

Installieren Sie die neuesten bei

<http://sourceforge.net/projects/virtualgl/files/>

für Ihr System erhältlichen Pakete bzw. Disk Images von turbojpeg und VirtualGL.

Aus Sicherheitsgründen wird bei den meisten Linux-Distributionen der X-Server mit den Para-metern `-nolisten tcp` aufgerufen, bitte stellen Sie durch Entfernen dieser Optionen aus der Konfiguration Ihres Desktop-Managers (meistens `gdm` oder `kdm`) sicher, dass Ihr X-Server über das Netzwerk erreichbar ist.

4.3 Wie startet man eine Remote-Visualisierungssitzung?

4.3.1 Schritt 1: Starten des Klienten

Windows Führen Sie im *Start*-Menü den Befehl „VirtualGL“ aus. Dies startet einen X-Server zur Anzeige von 2D-Elementen, die Klienten-Software zu VirtualGL und erlaubt den Rechnern des Visualisierungs-Clusters den Zugriff auf den X-Server. Dass der X-Server läuft, ist am Vor-handensein eines Icons mit einem stilisierten X im System Tray zu erkennen. Das Kontextmenü dieses Icons erlaubt auch das Beenden des X-Servers.

Linux/Mac OS X Starten Sie, während Sie an einem grafischen Desktop angemeldet sind, die Klienten-Software zu VirtualGL mit dem Befehl

```
vglclient
```

Unter OS X startet dies automatisch den X-Server, falls dieser nicht schon lief. Erlauben Sie dann den Visualisierungsrechnern des Clusters den Zugriff auf Ihren X-Server, etwa durch die folgenden Befehle:

```
for id in 0-0 0-1 0-2 0-3 0-4 0-5 1-0 1-1 1-2 1-3; do
    xhost +vis- $\$$ id.sugi.uni-koeln.de
done
```

Alternativ können Sie das von uns bereitgestellte Skript `rvclient` von

<https://subversion.rrz.uni-koeln.de/svn/remotevis/unixclient/rvclient>

verwenden, das obiges kombiniert. Bitte beachten Sie aber, dass das allen Rechnern (und somit Nutzern) des Visualisierungsclusters den Zugriff auf Ihren X-Server erlaubt.

4.3.2 Schritt 2: Abschicken des Auftrags zum Stapelverarbeitungssystem

Unterstützte Software Am einfachsten ist es, zum Submittieren des Auftrags an das Stapelverarbeitungssystem die von uns vorbereiteten Skripte zu nutzen, die intern `gsub` und `globusrun-ws` verwenden und also Globus-Zertifikate voraussetzen.

Für häufig benutzte Software haben wir Start-Skripte vorbereitet: VMD (`rvvmd`), PyMOL (`rvpymol`), Grace (`rvgrace`), ParaView (`rvpv`) und COVISE (`rvcovise`).

Zum Starten anderer Programme empfehlen wir den Aufruf eines GNOME Terminals über das Skript `rvterm`. Hierüber ausgeführte Programme profitieren automatisch von der OpenGL-Hardware im Visualisierungscluster.

All diese Skripte akzeptieren den Parameter `-d`, um das X11-Display anzugeben, auf dem die Programme anzeigen sollen. Wird dieser Parameter weggelassen, so wird stattdessen die Umgebungsvariable `RVDISPLAY` herangezogen.

Beliebige Software: `rvrun` Zudem existiert das Skript `rvrun` zum Ausführen beliebiger Programme mit folgender Aufrufsyntax:

```
rvrun [-d display] [-m module] [-h] program
```

`-m module` vor Aufruf des Programms `program` wird `module add module` ausgeführt – dieser Parameter darf mehrmals auftreten

`-d display` die Anzeige des Programms erfolgt auf *X11-Display* `display`

`-h` Anzeige eines kurzen Hilfetexts

Sobald der Auftrag vom Stapelverarbeitungssystem ausgeführt wurde, sollte sich auf dem von Ihnen angegebenen Rechner ein neues Fenster mit der gewünschten Anwendung öffnen.

Beispiel Im Beispiel

```
rvrun -m vmd -d viskas.rrz.uni-koeln.de:0 vmd
```

wird das Programm `vmd` (letzter Parameter) gestartet. Da das eine Modifikation der Umgebungsvariablen erfordert, werden über das `module`-Kommando (<http://nf.nci.org.au/facilities/software/modules.php>) diese Anpassungen durchgeführt (Parameter `-m vmd`). Die Anzeige erfolgt über den X-Server mit der Nummer 0 (nimmt Verbindungen

auf TCP-Port 6000 an), der auf dem Rechner `viskas.rrz.uni-koeln.de` läuft. D. h. Sie müssen bereits beim Abschicken des Auftrags wissen, von welchem Rechner aus Sie mit der Visualisierungsanwendung interagieren möchten.

Startskripte für eigene Grid-Klienten Betreiben Sie Ihren eigenen Grid-Klienten, so können Sie die aktuellen Fassungen der oben beschriebenen Skripte mittels Subversion von

<https://subversion.rrz.uni-koeln.de/trac/remotevis/browser/jobscripts>

beziehen.

4.4 Steuerung einer Sitzung

Drücken Sie die Tastenkombination `Ctrl` + `Shift` + `F9` während das mit VirtualGL dargestellte Programm den Fokus hat, so öffnet sich ein Programm zur Konfiguration der Kompressionsparameter für die JPEG-Bildströme. Wenn Sie über eine langsame Verbindung arbeiten, so empfiehlt es sich, das *Connection Profile* „Low Qual“ auszuwählen.

4.5 Beenden einer Sitzung

Der Ihnen zugewiesene Visualisierungsserver wird automatisch wieder für andere Nutzer freigegeben, wenn Sie alle remote gestarteten Anwendungen beenden. Verwenden Sie dazu den gewöhnlichen vom Programm bereitgestellten Mechanismus.

Bitte beachten Sie: die Zeit für eine *Visualisierungssitzung ist auf zwei Stunden begrenzt*. Danach werden alle Ihre Anwendungen zwangsweise beendet und nicht gespeicherte Daten gehen unwiederbringlich verloren.

