

eScience - Laboratorium HPC

Korzystanie z Infrastruktury obliczeniowej PCSS

W ramach laboratorium omówiony zostanie dostęp do infrastruktury obliczeniowej PCSS za pomocą systemu kolejkowego SLURM oraz za pomocą narzędzi QCG ułatwiających dostęp do mocy obliczeniowej. Ponadto zaprezentowana zostanie funkcjonalność katalogu aplikacji i usług PLGrid.

Katalog Aplikacji i Usług

Portal internetowy prezentujący informacje o aplikacjach i usługach dostępnych na klastrach obliczeniowych zrzeszonych w ramach polskiej infrastruktury Gridowej PLGrid.

Strona: <https://aplikacje.plgrid.pl>

SLURM

Jeden z najpopularniejszych systemów kolejkowych instalowanych na klastrach obliczeniowych, zarządzający także zadaniami zlecanymi na kaster Eagle. Dostarcza szereg narzędzi klienckich.

Dostęp do klastra Eagle: `ssh plg****@eagle.man.poznan.pl`

QCG-Client

Zestaw poleceń zbliżonych do poleceń systemu kolejkowego (np. SLURM) z rozszerzeniami pozwalającymi m.in. na zlecanie zadań na wiele klastrów.

Strona: <https://docs.plgrid.pl/qcg-client>

QCG-Portal

Narzędzie dostępne przez przeglądarkę internetową. Pozwala uruchamiać zadania obliczeniowe na klastrach obliczeniowych z dowolnego miejsca, bez konieczności instalowania jakiegokolwiek oprogramowania.

Strona: <https://qcg-portal.man.poznan.pl>

QCG-Now

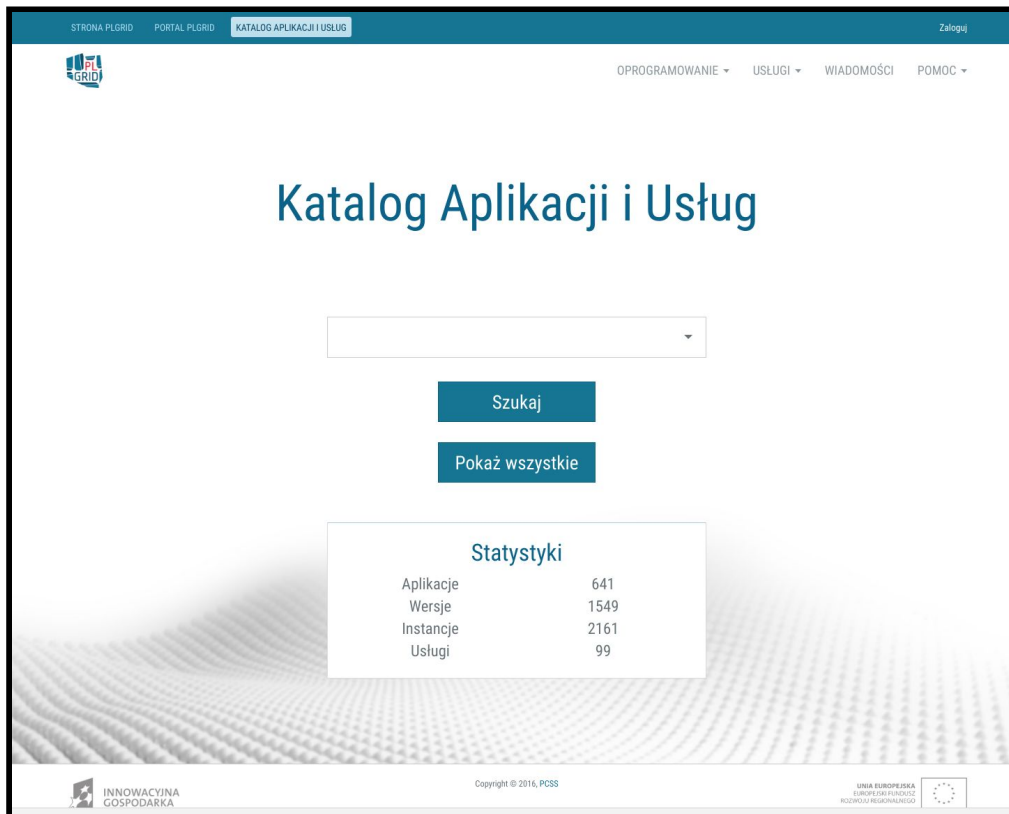
Aplikacja graficzna umożliwiająca intuicyjne zlecanie zadań obliczeniowych bezpośrednio z komputera użytkownika na klastry obliczeniowe. Dostępna na systemy operacyjne Windows, OS X oraz Linux.

Strona: <http://www.qoscosgrid.org/qcg-now>

I. Katalog Aplikacji i Usług

gdzie jest oprogramowanie, którego potrzebuję?

<https://apps.plgrid.pl>



Zadania do wykonania:

1. Sprawdzić czy i gdzie w infrastrukturze znajdują się pakiety oprogramowania R i MatLab.
2. Sprawdzić jaka jest najnowsza wersja pakietu R i MatLab w PCSS.
3. Sprawdzić jaka wersja pakietów R i MatLab jest domyślna na klastrze eagle.
4. Wyszukać oprogramowanie, którym jest się zainteresowanym.

II. SLURM

Zestaw zadań do wykonania

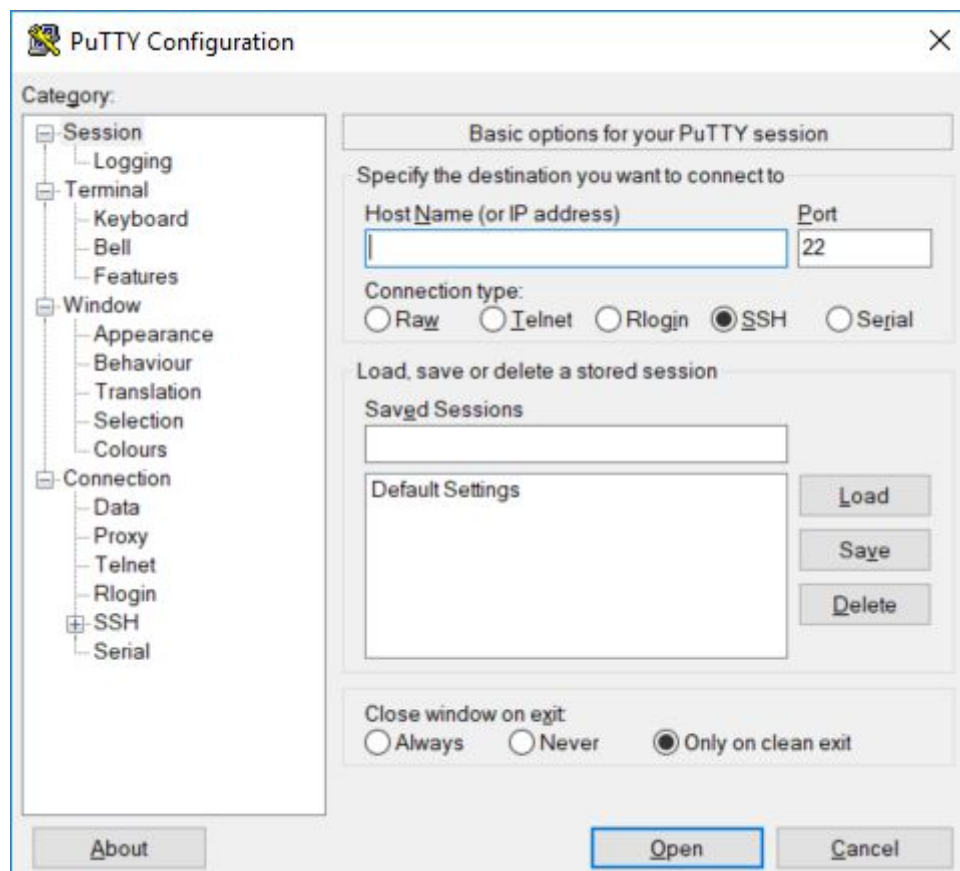
Do wykonania zadań laboratoryjnych wymagane jest posiadanie konta PLGrid z odpowiednio skonfigurowanym dostępem do usług QCG: grant testowy, certyfikat, zawnioskowany „Globalny dostęp QosCosGrid”.

I. Korzystanie z systemu kolejkowego SLURM

1. Potrzebny będzie klient protokołu SSH, np. putty

<https://the.earth.li/~sgtatham/putty/latest/w64/putty.zip>

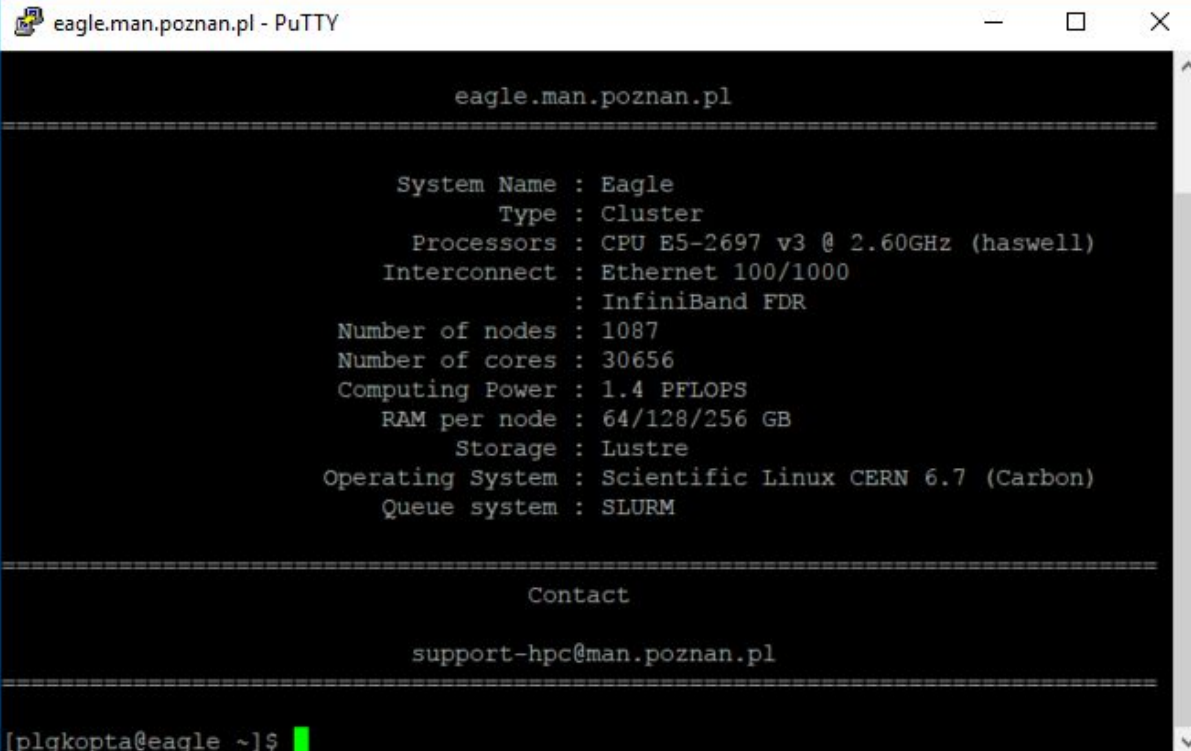
2. Po rozpakowaniu archiwum i uruchomieniu programu **PUTTY** pojawi się okno z konfiguracją



3. W polu 'Host Name' proszę wpisać poniższy adres i wcisnąć przycisk **Open** (przy nawiązywaniu połączenia może wyskoczyć okno z prośbą o potwierdzenie klucza SSH)

eagle.man.poznan.pl

4. Po pojawieniu się linii **login as:** proszę wpisać swój identyfikator PL-Grid (plgXXXX) oraz potwierdzić enterem. W kolejnym kroku pojawi się prośba o podanie hasła do swojego konta - po jego wpisaniu i potwierdzeniu klawiszem enter, sesja SSH na węzeł dostępowy klastra **Eagle** powinna zostać utworzona.



```
eagle.man.poznan.pl
=====
System Name : Eagle
Type : Cluster
Processors : CPU E5-2697 v3 @ 2.60GHz (haswell)
Interconnect : Ethernet 100/1000
               : InfiniBand FDR
Number of nodes : 1087
Number of cores : 30656
Computing Power : 1.4 PFLOPS
RAM per node : 64/128/256 GB
Storage : Lustre
Operating System : Scientific Linux CERN 6.7 (Carbon)
Queue system : SLURM
=====
Contact

support-hpc@man.poznan.pl
=====
[plgkopta@eagle ~]$
```

Aby zwiększyć rozmiar czcionki proszę kliknąć prawym przyciskiem na belce okna i wybrać opcję 'Change Settings'. W zakładce 'Appearance' i sekcji 'Font settings' wcisnąć przycisk 'Change...', wybrać odpowiedni rozmiar czcionki oraz potwierdzić zmiany klawiszem 'Apply'.

5. Po uzyskaniu konsoli na klastrze eagle, możemy sprawdzić dostępne zasoby obliczeniowe. Najczęściej używane polecenia:
- **scontrol show partition** - wyświetli listę dostępnych kolejek (partycji)
 - **squeue** - wyświetli listę wszystkich zakolejkowanych oraz uruchomionych zadań
 - **squeue -u `id -nu`** - wyświetli listę wszystkich zakolejkowanych lub uruchomionych przez nas zadań
 - **sacct** - lista wszystkich przez nas zleconych i zakończonych zadań (z ostatnich 24 godzin)
 - **sacct -S MM/DD/YY** - lista wszystkich przez nas zleconych i zakończonych zadań od podanego momentu
6. Do uruchamiania zadań w systemie kolejkowym istnieją dwa polecenia:

- **srun** - po zleceniu zadania program czeka na jego uruchomienie, a następnie wyświetla wynik programu na konsoli
 - **sbatch** - wsadowe uruchomienie programu, skrypt opisujący zlecenie programu przekazywany jest do systemu kolejkowego i uruchamia się w tle, wynik programu zostanie umieszczony we wskazanym pliku
7. Aby uruchomić proste zadanie należy użyć polecenia **srun** przekazując wymagania zasobowe (ile węzłów, ile rdzeni oraz na jak długo) oraz wskazując program który zostanie uruchomiony, np:

```
srun -N 1 --tasks-per-node=1 -t 5 -p fast /bin/hostname --fqdn
```

gdzie:

- **-N** - liczba węzłów
 - **--tasks-per-node=** - liczba rdzeni na każdym węźle
 - **-t** - maksymalny czas wykonywania zadania (format M, M:S, G:M:S, D-G)
 - **-p** - nazwa kolejki (partycji)
8. Istnieje możliwość uruchomienia zadania interaktywnego, tj. zadania w którym dostaniemy konsolę na węźle obliczeniowym. W tym celu należy podać opcję **--pty** oraz jako program do uruchomienia przekazać program powłoki np. **bash**

```
srun -N 1 --tasks-per-node=1 -p fast --pty /bin/bash
```

Po uruchomieniu takiego zadania, linia z promptem powinna zawierać nazwę węzła na którym zasoby zostały nam przyznane. Można również samodzielnie wyświetlić nazwę węzła przy użyciu polecenia **hostname**.

9. Uwaga: w przypadku podania niewłaściwych wymagań zasobowych, zadanie może zostać permanentnie w stanie PENDING

10. Dla użytkowników laboratorium przygotowano rezerwację zasobów o nazwie **szkolenie**. Rezerwacja to pula zasobów obliczeniowych do których dostęp ma jedynie wyspecyfikowana grupa użytkowników w zdefiniowanym przedziale czasu. Nazwę tej rezerwacji należy przekazać do polecenia zlecającego zadanie, aby skrócić czas oczekiwania na przydzielenie zasobów.

11. Najważniejsze stany w jakich może znajdować się zadanie:

- **PD (PENDING)** - zadanie oczekuje w kolejce na przyznanie zasobów
- **CF (CONFIGURING)** - zadanie ma przyznane zasoby które się inicjalizują
- **R (RUNNING)** - zadanie się wykonuje
- **CG (COMPLETING)** - część procesów zadania już się zakończyła
- **CD (COMPLETED)** - zadanie się zakończyło pomyślnie (z kodem wyjścia równym 0)
- **F (FAILED)** - zadanie zakończone błędem

12. W celu wsadowego uruchomienia zadania należy przygotować skrypt zawierający dyrektywy opisujące parametry zadania jak również aplikację która ma zostać uruchomiona. Poniżej znajduje się przykładowy skrypt:

```
#!/bin/bash
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks-per-node=2
#SBATCH --reservation=szkolenie
#SBATCH --time=5:00
#SBATCH --output=wynik-%j.out

module load openmpi
mpirun -np $SLURM_NPROCS /tmp/lustre_shared/montecarlo_pi/mc_pi 100000000
```

13. Tak przygotowany skrypt zapisuje pod nazwą, np. **zadanie1.sh**, a następnie uruchamiamy poleceniem:

sbatch zadanie1.sh

14. Po zleceniu zadania na ekranie powinna pojawić się linia zawierająca identyfikator zlecone zadania, np:

Submitted batch job 5590824

Identyfikator zadania jest przydatny jeśli chcemy poznać szczegóły zadania (**scontrol show job IDENTYFIKATOR**) lub kiedy chcemy np. Usunąć zadanie (**scancel IDENTYFIKATOR**)

Stan zleconej aplikacji możemy sprawdzić na kilka sposobów:

- **squeue -u \${USER}**
wyświetli listę naszych aktywnych (niezakończonych) zadań

- **scontrol show job IDENTYFIKATOR**
wyświetli szczegóły naszego zadania wraz z stanem w jakim się znajduje

Jeśli nasze zadanie się zakończyło nie pojawi się wynikach polecenia **squeue**, natomiast szczegóły zadania będą dostępne do ok. 10 min po zakończeniu zadania. Aby sprawdzić listę zakończonych zadań, należy użyć polecenia

- **sacct**

15. Zadanie

Uruchomić aplikację obliczającą liczbę PI metodą MonteCarlo na 1, 2, 4 oraz 8 rdzeniach i sprawdzić czas wykonania aplikacji. W wyniku działania aplikacji znajduje się linia zawierająca tekst *Elapsed Wall time* która pokazuje czas działania aplikacji. Wywołanie aplikacji powinno składać się z dwóch linii:

```
module load openmpi
```

```
mpirun -np $SLURM_NPROCS /tmp/lustre_shared/montecarlo_pi/mc_pi 1000000000
```

16. Część oprogramowania na klastrze Eagle dostępna jest w postaci modułów. Aby móc skorzystać z konkretnej wersji danego oprogramowania odpowiedni moduł musi zostać najpierw załadowany.

17. Najważniejsze polecenia związane z zarządzaniem modułami:

- **module avail** - wyświetla listę wszystkich dostępnych modułów (zaleca się wykorzystanie programu do typu less lub cat do przeglądania listy, np:
module avail 2>&1 | less
- **module list** - lista załadowanych modułów
- **module load NAZWA_MODULU** - załadowanie wskazanego modułu
- **module unload NAZWA_MODULU** - usunięcie modułu ze środowiska
- **module show NAZWA_MODULU** - wyświetlenie informacji o module

Uwaga: na klastrze Eagle moduły można ładować jedynie na węzłach obliczeniowych (wewnątrz zadania) - próba załadowania modułu na węźle dostępowym zakończy się wyświetleniem odpowiedniego komunikatu o błędzie

18. Zadanie

Przy użyciu zadania interaktywnego załadować moduł **lammmps** oraz sprawdzić jakie dodatkowe moduły zostały załadowane.

19. Ważne uwagi:

- Intensywne obliczenia nie powinny być prowadzone w katalogu **\${HOME}** - w takich przypadkach należy skorzystać bądź z katalogu współdzielonego pomiędzy wieloma węzłami **\${PLG_USER_SCRATCH}/\${USER}** - należy upewnić się że ten katalog istnieje, jeśli nie należy go utworzyć poleceniem:

```
mkdir ${PLG_USER_SCRATCH}/${USER}.
```

III. QCG-Client

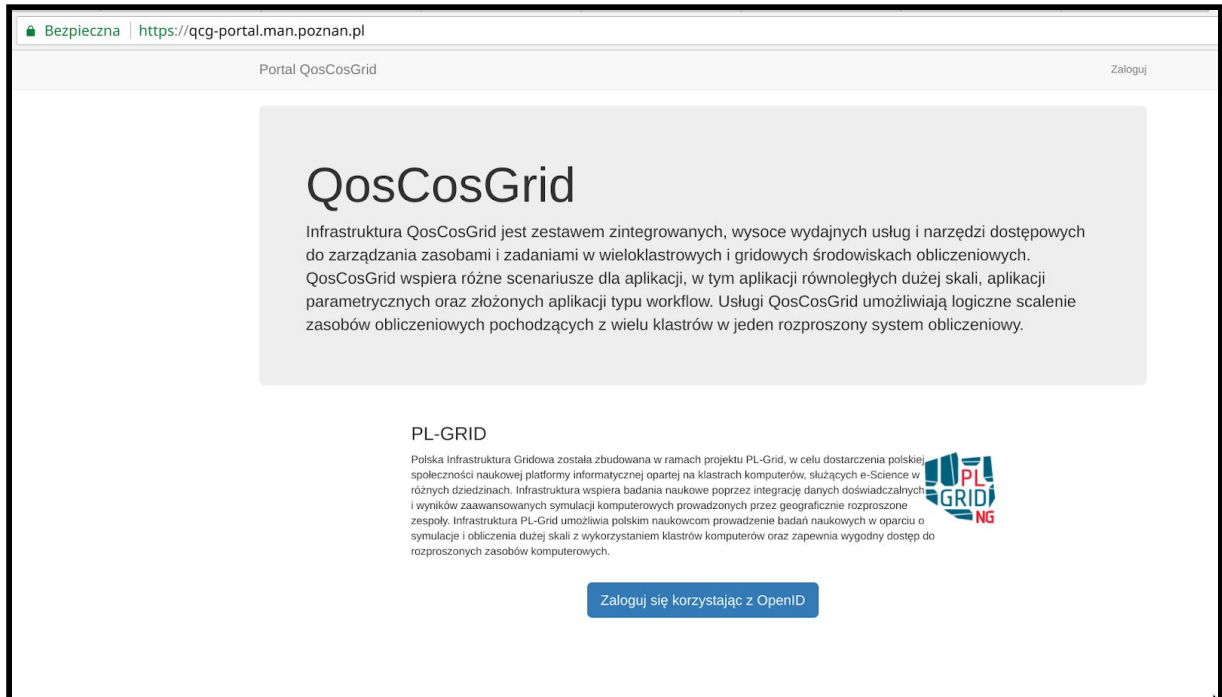
Dokumentacja: <https://docs.plgrid.pl/qcg-client>

Zadanie do wykonania:

- 1) Znaleźć adres maszyny dostępowej QCG w PCSS
- 2) Zalogować się na maszynę dostępową QCG
- 3) Wyświetlić listę zasobów kontrolowanych przez QCG
- 4) Wyświetlić listę aplikacji dostępnych przez QCG na klastrze eagle
- 5) Wyświetlić informację o użytkowniku.
- 6) Korzystając z polecenia **qcg-sub** zlecić zadanie R na klastrze eagle
 - Utworzyć katalog zadania: polecenie **mkdir <nazwa>**
 - Przejść do katalogu: polecenie **cd <nazwa>**
 - Pobrać plik R: polecenie **wget**
<http://fury.man.poznan.pl/~piontek/pp/lab/example.R>
 - Stworzyć plik opisu QCG wykorzystując dyrektywy:
 - i) **#QCG walltime (PT10M)**
 - ii) **#QCG grant**
 - iii) **#QCG host**
 - iv) **#QCG stage-in-file**
 - v) **#QCG stage-out-file (example.pdf)**
 - vi) **#QCG application (R)**
 - vii) **#QCG argument**
 - viii) **#QCG output**
 - ix) **#QCG error**
 - Poleceniem **qcg-list** i **qcg-info** sprawdzić status swojego zadania
 - Pobrać i wyświetlić (lokalnie) plik example.pdf
- 7) Zmodyfikować plik z zadania 6 i uruchomić aplikację R ładując modul R i uruchamiając aplikację bezpośrednio w skrypcie
 - **module load plgrid/apps/r**
 - **R --vanilla -f <nazwa pliku wejściowego>**

IV. QCG-Portal

1. Zalogować się w portalu: <https://qcg-portal.man.poznan.pl>



2. Wykorzystując plik example.R zlecić zadanie R na klaster eagle.
 - Zleć Zadanie -> Nowe zadanie
 - Aplikacja R
 - Plik główny (klaster eagle) i znaleźć plik example.R (wybor poprzez zaznaczenie checkboxa)
 - Host (eagle)
 - Opcjonalnie (Powiadomienia, E-mail)
 - WAZNE: Zakładka "Inne" zaznaczyć "Trwałe"
3. Poczekać aż na liście zadań zlecone zadanie będzie FINISHED
4. Wybrać opcję "więcej" w wierszu zadania
5. Wybrać opcję "Przeglądaj katalog roboczy"
 - Znaleźć, ściągnąć, wyświetlić plik: example.pdf

V. QCG-Now

1. Instalacja

Należy pobrać pakiet **QCG-Now** oznaczony jako **PORTABLE** ze strony <http://www.qoscosgrid.org/qcg-now> i zapisać na lokalnym dysku. Następnie z poziomu **exploratora Windows** należy go rozpakować do wybranej przez siebie lokalizacji.

Spod adresu <http://www.qoscosgrid.org/qcg-now/resources/materials/examples.zip> należy również pobrać i rozpakować pliki wejściowe dla wybranych aplikacji, które będą wykorzystywane w dalszej części zajęć.

2. Konfiguracja

Z rozpakowanego katalogu **QCG-Now** należy uruchomić plik **QCG-Now.exe**. W trakcie pierwszego uruchomienia aplikacji należy przeprowadzić wstępną konfigurację programu. Należy uwzględnić następujące wymagania:

- a. **Domena konfiguracyjna** powinna być ustawiona na **PLGrid**
- b. Jako nazwę użytkownika należy wprowadzić nazwę użytkownika **PLGrid (plg****)**
- c. **Protokół przesyłania danych** powinien być ustawiony na **SFTP**

Następnie należy wygenerować certyfikat proxy korzystając z nazwy i hasła użytkownika **PLGrid (plg****)**.

3. Zlecenia zadania aplikacji Blender

Należy otworzyć okno zlecenia nowego zadania (przycisk +) i z wcześniej rozpakowanego katalogu **examples** wybrać do obliczeń plik **blender/qcg.blend**. Następnie w zakładce Parametry należy wybrać aplikację **Blender** i wskazać odpowiedni grant obliczeniowy, a w zakładce Wymagania wybrać zasób **Eagle**, zmniejszyć limit czasu do **5 minut** i w sekcji Wymagania rozszerzone wpisać **szkolenie** w pole ID rezerwacji.

Tak przygotowane zadanie należy zlecić do obliczeń.

W momencie rozpoczęcia przesyłania plików wejściowych aplikacja zapyta się ponownie o nazwę użytkownika i hasło. Należy podać te same dane co w poprzednim kroku. Mogą one zostać od razu zapamiętane.

Postęp wykonania zadania może być śledzony w głównym oknie programu. Klikając dwukrotnie na wierszu zadania przechodzi się do widoku szczegółów.

Po zakończeniu obliczeń, w katalogu z rezultatami, powinien pojawić się wygenerowany plik graficzny.

4. Zlecenie zadania obliczeniowego aplikacji Abaqus

Należy zlecić do obliczeń plik **examples/abaqus/Job-Examp.inp**. Należy uwzględnić następujące wymagania:

- a. Należy wykorzystać aplikację **Abaqus** w wersji **2017**
- b. Obliczenia powinny być wykonywane równolegle na **1 węźle i 2-ch rdzeniach**.
- c. Limit czasu obliczeń powinien być ustawiony na **10 minut**.

- d. ID rezerwacji powinno być ustawione na **szkolenie**.
- e. Zadanie obliczeniowe powinno wysyłać **powiadomienia na e-mail użytkownika o aktualnym stanie zadania**.

Po zakończeniu obliczeń powinien być wygenerowany plik wyjściowy **Job-Examp.odb**, który należy otworzyć w aplikacji Abaqus Viewer.

5. Przygotowanie szablonu zadania

Klikając prawym klawiszem myszy na wcześniej zleconym zadaniu aplikacji Abaqus należy wybrać opcję **Zleć ponownie**. Następnie należy usunąć pliki wejściowe dla zadania, a resztę parametrów pozostawić bez zmian. Tak przygotowany szablon należy zapisać pod nazwą **abaqus-template.qcg**.

6. Zlecenie skryptu

Należy zlecić do obliczeń skrypt zapisany w pliku **examples/matlab/simple.m** (typ zlecenia: **Zlecenie skryptu**) za pomocą aplikacji **MATLAB** zainstalowanej na klastrze **Eagle**. Skrypt powinien być wykonany sekwencyjnie, wykorzystując rezerwację **szkolenie**.