C2115
Praktický úvod do superpočítání

VII. lekce

Petr Kulhánek, Jakub Štěpán

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta,
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

Obsah

- **Infinity**
  úloha, přehled příkazů, aliasy
- **Spouštíme aplikace**
  sander, pmemd, gaussian, paralelní spouštění
- **Cvičení**
  efektivita paralelního spouštění aplikaci sander, pmemd, gaussian

Infinity

https://lcc.ncbr.muni.cz/whitezone/development/infinity/

Přehled příkazů

Správa software:

- site — aktivace logických výpočetních zdrojů
- module — aktivace/deaktivace software

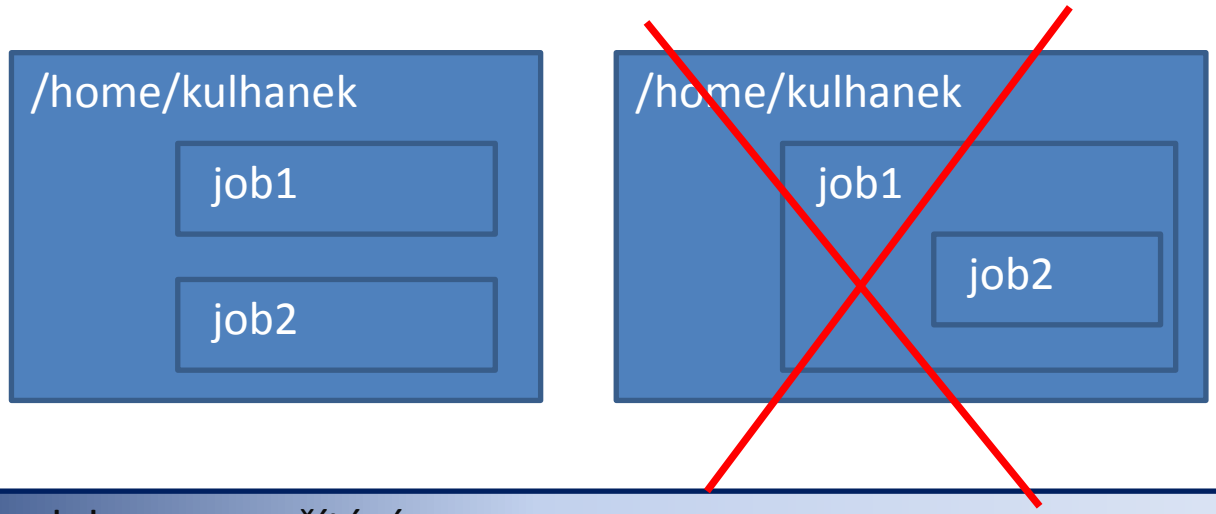
Správa úloh:

- pqueues — přehled front z dávkového systému dostupných uživateli
- pnodes — přehled výpočetních uzlů dostupných uživateli
- pqstat — přehled všech úloh zadaných do dávkového systému
- pjobs — přehled úloh uživatele zadaných do dávkového systému
- psubmit — zadání úlohy do dávkového systému
- pinfo — informace o úloze
- pgo — přihlásí uživatele na výpočetní uzel, kde se úloha vykonává
- paliases — definovaní aliasů

Úloha

Úloha musí splňovat následující podmínky:

- každá úloha se spouští v samostatném adresáři
- všechny vstupní data úlohy musí být v adresáři úlohy
- adresáře úloh nesmí být do sebe zanořené
- průběh úlohy je řízen skriptem nebo vstupním souborem (u automaticky detekovaných úloh)
- skript úlohy musí být v bashi
- ve skriptu úlohy se nesmí používat absolutní cesty, všechny cesty musí být uvedeny relativně k adresáři úlohy



Skript úlohy

Skript úlohy může být uvozen standardním interpretrem pro **bash** nebo speciálním interpretrem **infinity-env**, který nedovolí spuštění úlohy mimo výpočetní uzel. Druhý přístup zabraňuje případnému poškození/přepsání/smazání již vypočtených dat nechtěným opětovným spuštěním skriptu.

```
#!/bin/bash

# vlastni skript
```

```
#!/usr/bin/env infinity-env

# vlastni skript
```

Spuštění úlohy

Úlohu spouštíme **v adresáři úlohy** příkazem **psubmit**.

```
psubmit destination job [resources] [syncmode]
```

destination (kam) je buď:

- název_fronty
- název_uzlu@název_fronty

job je buď:

- název skriptu úlohy
- název vstupního souboru pro automaticky rozpoznávané úlohy

resources jsou požadované zdroje pro úlohu, pokud není uvedeno, požaduje se běh na 1 CPU

syncmode určuje způsob kopírování dat mezi adresářem úlohy a výpočetním uzlem, výchozím módem je "sync"

Monitorování běhu úlohy

K monitorování průběhu úlohy lze použít příkaz **pinfo**, který se spouští buď v adresáři úlohy nebo v pracovním adresáři na výpočetním uzlu. Dalšími možnostmi jsou příkazy **pjobs** a **pqstat**.

Pokud je úloha spuštěna na výpočetním uzlu, je možné použít příkaz **pgo**, který se naloguje na výpočetní uzel a změní aktuální adresář do pracovního adresáře úlohy.

Servisní soubory

V adresáři úlohy vznikají při zadání úlohy do dávkového systému a dále v průběhu života úlohy a po jejím ukončení servisní soubory. Jejich význam je následující:

- *.info kontrolní soubor s informacemi o průběhu úlohy
- *.infex vlastní skript (wrapper), který se spouští dávkovým systémem
- *.infout standardní výstup z běhu *.infex skriptu, **nutno analyzovat při nestandardním ukončení úlohy**
- *.nodes seznam uzlů vyhrazených pro úlohu
- *.gpus seznam GPU karet vyhrazenych pro úlohu
- *.key unikátní identifikátor úlohy
- ***.stdout** **standardní výstup z běhu skriptu ulohy**

Spouštíme aplikace

sander

sander je program určen pro molekulovou dynamiku. Podrobnější informace lze nalézt zde: http://ambermd.org

```
#!/bin/bash

# aktivovat modul amber obsahujici aplikace
# sander a pmemd
module add amber

# spusteni aplikace
sander -O -i prod.in -p topology.parm7 \
                     -c input.rst7
```

pmemd

pmemd je program určen pro molekulovou dynamiku. Podrobnější informace lze nalézt zde: http://ambermd.org

```
#!/bin/bash

# aktivovat modul amber obsahujici aplikace
# sander a pmemd
module add amber

# spusteni aplikace
pmemd –O –i prod.in –p topology.parm7 \
                      -c input.rst7
```

sander/pmemd

Délka simulace:
Délka simulace (výpočtu) je určena kličovým slovem (**nstlim**) uvedeným v souboru prod.in, který určuje počet integračních kroků.

Výsledkem simulace jsou soubory:

mdout
mdinfo <-- obsahuje statistické informace, např. kolik ns za den je program schopen nasimulovat
mdcrd
restrt

sander/pmemd – paralelní běh

Při paralelním spouštění se mění jen zadání zdrojů u příkazu psubmit. **Ostatní se nemění!** (zůstávají stejná vstupní data a skript úlohy).

```
$ psubmit short test_sander ncpus=1
```

může se vynechat

***.stdout**

```
.....
Module build: amber:12.0:x86_64:single
.....
```

Výpočetní uzel:

```
S %CPU %MEM     TIME+  COMMAND
R  100  0.6   1:13.37 sander
R    0  0.0   0:00.01 top
```

```
$ psubmit short test_sander ncpus=2
```

***.stdout**

```
.....
Module build: amber:12.0:x86_64:para
.....
```

Výpočetní uzel:

```
%CPU %MEM     TIME+  COMMAND
 100  1.6   0:40.41 sander.MPI
  99  1.7   0:40.60 sander.MPI
```

Cvičení

Vstupní data:
/home/kulhanek/Data/2115/data/sander/small

1. Spusťte úlohu na 1CPU na klastru wolf.
2. Spusťte úlohu na 2CPU na klastru wolf.

gaussian

gaussian je program určen pro kvantově-chemické výpočty. Podrobnější informace lze nalézt zde: http://www.gaussian.com

```
#!/bin/bash

# aktivovat modul gaussian
module add gaussian

# spusteni aplikace
g09 input
```

vstupni soubor **input.com** bez zakončení

gaussian

Délka výpočtu:
Délku výpočtu lze ovlivnit maximálním počtem optimalizačních kroku (**MaxCycle** ve vstupním souboru).

Výsledkem výpočtu je soubor:

input.log

gaussian – paralelní běh

Při paralelním spouštění se mění zadání zdrojů u příkazu psubmit **a vstupní soubor pro program gaussian (input.com)**.

input.com (první řádek)
`%NProcShared=1`

```
$ psubmit short test_gaussian ncpus=1
```

může se vynechat

Výpočetní uzel:

```
S %CPU %MEM     TIME+  COMMAND
R  100  1.2  1:01.25 l502.exe
S    0  0.1  1:38.57 pbs_mom
```

input.com (první řádek)
`%NProcShared=4`

identické číslo!!!

```
$ psubmit short test_gaussian ncpus=4
```

Výpočetní uzel:

```
S %CPU %MEM     TIME+  COMMAND
R  399  1.1  0:49.38 l502.exe
S    0  0.1  0:00.90 init
```

gaussian – paralelní běh, II

Při spouštění výpočtů v gaussianu lze využít autodetekci.

Bez autodetekce:

input.com (první řádek)

`%NProcShared=4`

identické číslo!!!

```
$ psubmit short test_gaussian ncpus=4
```

S autodetekcí:

input.com (nemusi obsahovat `%NProcShared=4`

```
$ psubmit short input.com ncpus=4
```

Cvičení

Vstupní data:
/home/kulhanek/Data/2115/data/gaussian

1. Spusťte úlohu na 1CPU na klastru wolf.
2. Spusťte úlohu na 2CPU na klastru wolf.

Cvičení

Cvičení LVII.1

Cílem cvičení je určit jak dobře škálují aplikace sander, pmemd a gaussian na klastru SOKAR v rozsahu počtu CPU 1, 2, 4, 8, 16, 32 a 64. Pro každý počet CPU určete délku výpočtu na uzlu, který je zatížen jen na daný počet CPU. Dále určete teoretickou délku výpočtu, reálné urychlení a reálné využití CPU v procentech. Do grafu vyneste reálné urychlení jako funkci počtu CPU. Nalezenou křivku porovnejte s křivkou pro ideální škálování.

Testovací výpočty můžete provádět na klastru WOLF. Finální výpočty pak budete provádět na klastru SOKAR. Ověřte, zda-li máte správně nastavené ssh klíče.
K výpočtům máte vyhrazeny dva uzly s 64 CPU ve frontě **long**. Uzly mají vlastnost **c2115**.

Při zadávání úlohy budete vždy požadovat 64 CPU, ve skriptu (nebo vstupním souboru) budete počet CPU "snižovat" na požadovaný počet CPU.

Vstupní data jsou na klastru WOLF v adresářích:
/home/kulhanek/Data/2115/data /pmemd/medium/
/home/kulhanek/Data/2115/data /pmemd/small/
/home/kulhanek/Data/2115/data /pmemd/big/
/home/kulhanek/Data/2115/data /sander/medium/
/home/kulhanek/Data/2115/data /sander/small/
/home/kulhanek/Data/2115/data /sander/big/
/home/kulhanek/Data/2115/data /gaussian/

Snížení počtu CPU pro účely testování

```
.....

INF_NCPU=N
AMS_NCPU=$INF_NCPU
# aktivovat modul amber obsahujici aplikace
# sander a pmemd
module add amber
....

 $ psubmit long test_sander ncpus=64,props=c2115
```

N = požadovaný počet CPU

vždy 64

---

input.com (první řádek)

```
%NProcShared=N
```

N = požadovaný počet CPU

```
 $ psubmit long test_gaussian ncpus=64,props=c2115
```

vždy 64

Cvičení LVII.2

Dle dokumentace na stránkách MetaCentra spusťte úlohu v gaussianu, vstupní soubor vemte z předchozí úlohy.