Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Γενική Χρήση του ARIS

Δρ. Δημήτρης Ντελλής

GRNET

ntell [at] grnet.gr

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Περιεχόμενα

- Σύνδεση στο σύστημα
- Σύστημα αρχείων
- Software Environment
  - Environment Modules
  - Διαθέσιμα πακέτα
- Batch System
- Βέλτιστες Πρακτικές Χρήσης - Συνηθισμένα Λάθη/Προβλήματα.
- Συζήτηση με ομάδες που είχαν/έχουν πρόσβαση στο σύστημα

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- Σύνδεση στο σύστημα
  - Δύο από τους κόμβους υπηρεσιών έχουν διαμορφωθεί σε login nodes
  - Πανομοιότυπη εγκατάσταση, κοινοί λογαριασμοί χρηστών, κοινή πρόσβαση στο GPFS (/users και /work)
  - Διεύθυνση και για τους 2 login nodes: **login.aris.grnet.gr**
  - Σύνδεση με SSH με χρήση κλειδιού.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- Ταυτοποίηση χρήστη
  - password authentication
  - public key authentication
- Στο ARIS θα χρησιμοποιείται μόνο η δεύτερη μέθοδος
- Ζεύγος κλειδιών, public και private
- Το public ssh key αποθηκεύεται στον ssh server (login node στην περίπτωσή μας) στο Home του χρήστη
- Το private ssh key βρίσκεται στον ssh client (π.χ. το laptop σας) και είναι **μυστικό**! Μόνο ο ιδιοκτήτης του πρέπει να έχει πρόσβαση σε αυτό.
- Το private ssh key μπορεί προαιρετικά να προστατεύεται με ένα passphrase

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- Λογισμικό SSH Client
  - Mac OS, Linux: OpenSSH, συνήθως υπάρχει εγκατεστημένο
    - **ssh** : SSH client, με αυτό θα συνδεθείτε
    - **ssh-keygen**: Δημιουργία, μετατροπή κλειδιών
    - **scp, sftp**: Μεταφορά αρχείων
  - Windows: PuTTY (δωρεάν)
    - **PuTTY** : SSH client, με αυτό θα συνδεθείτε
    - **PuTTYgen** : Δημιουργία, μετατροπή κλειδιών
    - **PSCP, PSFTP** : Μεταφορά αρχείων
    - **putty-0.65-installer.exe** : Windows installer που εγκαθιστά όλα τα παραπάνω
  - Windows: Bitvise (δωρεάν, με πολλές γραφικές διευκολύνσεις)

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- Δημιουργία ζεύγους ssh κλειδιών σε Mac OS, Linux
  - **ssh-keygen -t rsa -b 2048**
  - public key: .ssh/id_rsa.pub
  - private key: .ssh/id_rsa

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- X Server for windows
  - Χρήσιμος για εκτέλεση διάφορων εφαρμογών όπως profilers
  - Xming X Server for Windows
  - http://sourceforge.net/projects/xming/
  - Για να δουλέψει, απαραίτητο να έχετε ενεργό το ”Enable X11 forwarding”
  - Το Xming πρέπει να τρέχει στο Windows PC σας πριν ξεκινήσετε κάποια γραφική εφαρμογή στο login.aris.grnet.gr

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- Τι χρειάζεται να μας στείλετε για να αποκτήσετε πρόσβαση στο ARIS
  - Επιθυμητό username
  - Το ssh public key σας
  - Η διεύθυνση ή οι διευθύνσεις IP από όπου θα συνδέεστε, ώστε να επιτραπεί η πρόσβαση στο firewall του ARIS
  - Παραδείγματα
    - Η IP του υπολογιστή σας στο εργαστήριο σας
    - Εναλλάκτικά αν δεν έχετε σταθερό IP, ολόκληρο το υποδίκτυο του εργαστηρίου σας
    - Οι IP διευθύνσεις του VPN service του ιδρύματος σας

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- Σύστημα αρχείων GPFS
  - GPFS 4.1
  - Δύο filesystems : /users και /work
  - /users
    - Περίπου 250 TB
    - Applications
    - Home directories των χρηστών
    - Δεν πρέπει να εκτελούνται (τουλάχιστον I/O intensive) jobs στο Home
    - Μακροχρόνια αποθήκευση
  - /work
    - Περίπου 450 TB
    - Για κάθε χρήστη υπάρχει η μεταβλητη $WORKDIR
    - Εδώ πρέπει να εκτελούνται τα jobs
    - Βραχυχρόνια αποθήκευση

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## Environment Modules. Τι είναι ?

- Το πακέτο Environment Modules κάνει δυναμική τροποποίηση του περιβάλλοντος χρήστη μέσω των module files.
- Κύριες μεταβλητές περιβάλλοντος που προσαρμόζονται είναι οι PATH, MANPATH, και LD_LIBRARY_PATH, αλλά και μεταβλητές περιβάλλοντος που ενδεχομένως κάθε πακέτο λογισμικού χρειάζεται.
- Κάθε module file περιέχει την πληροφορία που χρειάζεται ώστε να ρυθμίσει τις μεταβλητές περιβάλλοντος για κάποια εφαρμογή.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- Όλα τα modules θέτουν μια μεταβλητή MODULENAMEROOT. Σε modules που αναφέρονται σε βιβλιοθήκες, συνήθως τα include files βρίσκονται στην $MODULENAMEROOT/include και οι βιβλιοθήκες στην $MODULENAMEROOT/lib
- Εάν υπάρχουν εξαρτήσεις ενός πακέτου λογισμικού από άλλα τα οποία επίσης ρυθμίζονται με module file, οι εξαρτήσεις αυτές μπορούν να περιγραφούν και εφόσον το αντίστοιχο module δεν είναι ενεργό είτε το φορτώνει είτε βγάζει μήνυμα λάθους ειδοποιώντας το χρήστη ότι πρέπει πρώτα να φορτώσει τις εξαρτήσεις.
- Σε περιπτώσεις πακέτων τα οποία υπάρχουν σε πάνω από μια έκδοση, υπάρχει ένα module για κάθε έκδοση και ο administrator μπορεί να ορίσει κάποια ως default.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Environment Modules. Χρήση

- Έλεγχος πακέτων που είναι διαθέσιμα μέσω modules

  ```
  module avail
  ```

  ή

  ```
  module -l avail
  ```

- Έλεγχος ενεργών modules

  ```
  module list
  ```

- Απενεργοποίηση όλων των ενεργών modules

  ```
  module purge
  ```

- Απενεργοποίηση συγκεκριμένου module

  ```
  module unload MODULENAME
  ```

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- Αλλαγή έκδοσης module

  `module switch MODULENAME/VER1 MODULENAME/VER2`

- Πληροφορίες για το τι αφορά κάποιο module

  `module whatis MODULENAME/VERSION`

- Κείμενο Βοήθειας για κάποιο module

  `module help MODULENAME/VERSION`

- Για να δείτε τι κάνει η ενεργοποίηση ενός module

  `module show MODULENAME/VERSION`

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- Default version ενός module
  - Όπως θα δείτε παρακάτω, σχεδόν όλα τα πακέτα που υπάρχουν στο ARIS σε πάνω από μια version έχουν μια από αυτές επισημασμένη ως default. Στην περίπτωση αυτή, οι εντολές

    ```
    module load MODULENAME
    ```

    και

    ```
    module load MODULENAME/DEFAULTVERSION
    ```

    είναι ισοδύναμες.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Batch System

- Τι είναι ένα Batch System
  - Ένα Batch System ελέγχει την πρόσβαση στους διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους ώστε όλοι οι χρήστες να μπορούν να χρησιμοποιούν το σύστημα - Συνήθως σε ένα σύστημα υπάρχει μεγαλύτερη ζήτηση για πόρους από τους διαθέσιμους.
  - Δίνει τη δυνατότητα στο χρήστη να προδιαγράψει μια υπολογιστική εργασία (Job) , να την υποβάλει στο σύστημα και να αποσυνδεθεί από αυτό.
  - Η εργασία θα εκτελεστεί όταν υπάρχουν πόροι (cores, nodes, μνήμη) και χρόνος
- ARIS Batch System : SLURM, υποστηρίζεται PBS emulation

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## Όταν μια εργασία υποβάλεται σε ένα Batch system :

- Περιγράφονται οι πόροι που χρειάζεται το σύστημα (π.χ. cores, nodes, μνήμη, χρόνος εκτέλεσης
- Το σύστημα κατάγράφει τους πόρους που ζητήθηκαν
- Όταν βρεθούν οι διαθέσιμοι πόροι, ξεκινάει η εκτέλεση της εργασίας
- Οι πόροι μπορούν να χρησιμοποιηθούν όπως θέλει ο χρήστης
  - Ένα π.χ. MPI run (Η κύρια/προτεινόμενη χρήση)
  - Πολλά σειριακά runs : Αν και μπορεί να χρησιμοποιηθεί με αυτό τον τρόπο, ένα run δεν κερδίζει κάτι από την ύπαρξη π.χ. Infiniband.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## SLURM Scripts

Ένα SLURM Script περιγράφει τους πόρους που χρειάζεται για να τρέξει η εργασία, όπως επίσης τις εντολές εκτέλεσης της εργασίας.
Παρατηρήστε τους 2 τρόπους που μπορούν να περιγραφούν οι απαιτήσεις της εργασίας π.χ.

```
--nodes=200
```

και

```
-A sept2015
```

.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## SLURM Scripts

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name="testSlurm"   # Όνομα για διαχωρισμό μεταξύ jobs
#SBATCH --error=job.err.%j    # Filename για το stderr
#SBATCH --output=job.out.%j   # Filename για το stdout
                              # Το %j παίρνει την τιμή του JobID
#SBATCH --nodes=200           # Αριθμός nodes
#SBATCH --ntasks=400          # Αριθμός MPI Tasks
#SBATCH --ntasks-per-node=2   # Αριθμός MPI Tasks / node
#SBATCH --cpus-per-task=10    # Αριθμός Threads / MPI Task
#SBATCH --mem=56G             # Μνήμη ανά node
#SBATCH --mem-per-cpu=2800M   # Μνήμη ανά core
#SBATCH -A sept2015           # Accounting tag (sept2015 για
                              #  όλους στο training)
#SBATCH -t 01:00:00           # Ζητούμενος χρόνος HH:MM:SS
#SBATCH -p compute            # partition, default στο ARIS.
module purge
module load gnu
module load intel
module load intelmpi

if [ x$SLURM_CPUS_PER_TASK == x ]; then
  export OMP_NUM_THREADS=1
else
  export OMP_NUM_THREADS=$SLURM_CPUS_PER_TASK
fi

srun EXECUTABLE ARGUMENTS
```

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## SLURM Scripts

- Το script του προηγούμενου slide είναι η πλήρης περιγραφή μιας εργασίας.
- Μπορεί να υποβληθεί εργασία και με λιγότερα από τα #SBATCH directives
  - Δίνοντας μόνο το ––nodes χωρίς το ––ntasks το σύστημα μπορεί να υπολογίσει πόσα tasks θα χρησιμοποιήσει
  - Αντίστοιχα, δίνοντας μόνο το ––ntasks το σύστημα μπορεί να υπολογίσει πόσα nodes χρειάζεται.
  - Τα υποχρεωτικά που σχετίζονται με τον αριθμό των cores που θα χρησιμοποιήσει μια εργασία είναι ένα από τα παραπάνω
  - Παραλείποντας το ––job-name, το σύστημα το θέτει ίδιο με το όνομα του script.
  - Παραλείποντας το ––output το σύστημα το θέτει σε slurm-JOB_ID.out
  - Υποχρεωτική είναι η χρήση του ––account (ή -A)
  - Θέτοντας όλες τις μεταβλητές έχετε πλήρη έλεγχο του τι πόρους ζητάτε από το σύστημα.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## Χρήση **srun** για την εκτέλεση των εφαρμογών

- Οι εκδόσεις του MPI έχουν η κάθε μια ένα mpirun/mpiexec κλπ.
- Προτείνεται να χρησιμοποιείται το srun για την εκτέλεση παράλληλων εργασιών.
- Κάποιοι από τους λόγους
  - Το srun ξεκινάει τα εκτελέσιμα σε όλους τους κόμβους οπότε έχει πλήρη έλεγχο.
  - Το srun κάνει accounting κατανάλωσης ρεύματος, χρήση Infiniband, χρήση δίσκων, κλπ.
  - Είναι κοινός τρόπος για τις (3 προς στιγμήν) εκδόσεις MPI που υπάρχουν στο ARIS
  - Η χρήση mpirun, mpiexec κλπ. δεν συνίσταται. Σε περιπτώσεις που η εφαρμογή έχει προβλήματα και σταματήσει ίσως να παρουσιαστούν προβλήματα (zombie procs) στη χρήση του scancel .

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## Επικοινωνία με το SLURM

- Υποβολή εργασίας
  ```
  sbatch SLURM_JobScript.sh
  Submitted batch job 15242
  ```
- Κατάλογος εργασιών
  ```
  squeue
  ```
- Κατάλογος εργασιών με περισότερες λεπτομέρειες
  ```
  squeue -o "%.8i %.9P %.10j %.10u %.8T %.5C
  %.4D %.6m %.10l %.10M %.10L %.16R"
  ```
- Ακύρωση εργασίας
  ```
  scancel JobID
  ```
- Σε κάποιες περιπτώσεις που τα εκτελέσιμα δεν τερματίζονται άμεσα παίρνοντας SIGHUP από το SLURM
  ```
  scancel -s KILL JobID
  ```
- Εκτίμηση του πότε θα αρχίσει η εκτέλεση των εργασιών που είναι σε αναμονή για πόρους
  ```
  squeue --start
  ```
- Πληροφορίες για την τρέχουσα χρήση
  ```
  sinfo
  ```

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# SLURM jobs dependency

- Εάν μια εργασία για να αρχίσει πρέπει κάποια άλλη να έχει ήδη αρχίσει ή τελειώσει, στο SLURM Script εκτός των άλλων :

  ```
  #SBATCH --dependency=after:Job_ID
  ```

  ή

  ```
  #SBATCH --dependency=afterok:Job_ID
  ```

  αντίστοιχα
- Εάν μια εργασία για να αρχίσει πρέπει κάποια άλλη με το ίδιο job name και χρήστη να έχει τελειώσει, στο SLURM Script εκτός των άλλων :

  ```
  #SBATCH --dependency=singleton
  ```

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- Εάν πρέπει μια εργασία να ξεκινήσει κάποιο συγκεκριμένο χρονικό διάστημα, στο SLURM Script εκτός των άλλων :
  - Έναρξη στις 16:00

    ```
    #SBATCH --begin=16:00
    ```

  - Έναρξη συγκεκριμένη ημέρα και ώρα :

    ```
    #SBATCH --begin=2016-04-07T14:32:00
    ```

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

Εάν κάποια εργασία δεν τρέχει και στο nodelist/REASON εμφανίζονται τιμές εκτός από nodenames ή Resources, τότε έχουμε ζητήσει περισότερους πόρους από ότι μας επιτρέπεται

- `AssocMaxNodesPerJobLimit`
  Ζητάμε περισότερα nodes από ότι επιτρέπεται στο account μας
- `AssocMaxWallDur`
  Ζητάμε περισότερο χρόνο από ότι επιτρέπεται στο account μας
- Διάφοροι άλλοι λόγοι που εάν από το όνομα δεν είναι αντιληπτό, ανατρέξετε στο documentation του SLURM.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# SLURM Environment Variables

Όταν ξεκινάει η εργασία το SLURM βάζει κάποιες μεταβλητές που σχετίζονται με αυτή, και ενδεχομένως είναι χρήσιμες στον χρήστη.

```
$SLURM_NNODES                 # Αριθμός nodes
$SLURM_NTASKS                 # Αριθμός Tasks
$SLURM_NPROCS                 #  ”   ”    ”
$SLURM_NTASKS_PER_NODE        # Αριθμός Tasks /node
$SLURM_TASKS_PER_NODE         #  ”   ”    ”    ”
$SLURM_CPUS_PER_TASK          # Αριθμός threads / Task
$SLURM_MEM_PER_NODE           # Μνήμη / node (MB)
```

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## SLURM User/Group resource limits

- Στο SLURM το κάθε account έχει κάποια όρια πόρων που μπορεί να ζητήσει/χρησιμοποιήσει. Τα όρια αυτά εφαρμόζονται σε όλους του χρήστες του account. Αυτά είναι :
  - Αριμός Jobs που μπορούν να εκτελούνται ταυτόχρονα
  - Αριθμός Jobs που μπορούν να εκτελούνται ή να βρίσκονται σε αναμονή
  - Μέγιστος αριθμός cores ή nodes που μπορούν να χρησιμοποιηθούν ταυτόχρονα από jobs ενός account.
  - Μέγιστη χρονική διάρκεια εκτέλεσης ενός Job
  - Μέγιστος αριθμός nodes που μπορεί να ζητήσει ένα Job
  - Μέγιστος αριθμός cores που μπορεί να ζητήσει ένα Job
  - Συνολικός αριθμός core hours στη διάρκεια ενός project.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- Ο Scheduler στο ARIS είναι FIFO with Backfill και Fairsharing. Αυτό σημαίνει
  - Το job που υποβλήθηκε πρώτο θα εκτελεστεί πρώτο
  - Από τη στιγμή που ξεκινάει η εκτέλεση, η εργασία θα τελειώσει το αργότερο μετά από όσο χρόνο ζητήθηκε στο SLURM script.
  - Εάν το σύστημα έχει μεν ελευθερους πόρους (cores/nodes/memory) αλλά δεν είναι αρκετοί για να τρέξει το πρώτο στη σειρά από τα queued, τα επόμενα jobs θα περιμένουν
  - εκτός...

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- Κάποιο από τα επόμενα jobs ζητάει πόρους που υπάρχουν, και ο χρόνος εκτέλεσης που ζητάει είναι μικρότερος από τον πιο κοντινό αναμενόμενο χρόνο τέλους των jobs που εκτελούνται. Αυτό το job θα παρακάμψει τη σειρά, και θα εκτελεστεί πρώτο χωρίς να προκαλέσει καμιά καθυστέρηση σε άλλα jobs.
- Έτσι το σύστημα έχει τη μεγαλύτερη δυνατή χρήση.
- Ζητήστε λίγο παραπάνω από όσο χρόνο υπολογίζετε ότι χρειάζεται η εργασία σας και όχι το μέγιστο που μπορείτε.
- Fairshare
  - Παράγοντες που επηρεάζουν το priority
    - Χρόνος αναμονής
    - Μέγεθος job σε nodes

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- Σχετική χρήση απο groups account π.χ. 80% production, 10% preparatory κλπ.

- Τι θα γίνει αν 4-5 χρήστες στείλουν εκατοντάδες jobs ?
- Το Fairshare αναλαμβάνει να αλλάξει τα priorities ώστε σε επίπεδο εβδομάδας κάποιο/α account να μην μονοπωλεί το σύστημα
- Όσο πιο κοντά στην κατανάλωση του budget βρίσκεται ένα account, τόσο μικραίνει το priority
- Τα jobs που χρειάζονται πολλά nodes

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Εξομοίωση PBS

- Υπάρχει εγκατεστημένη η εξομοίωση του PBS/Torque. Χρήστες που είναι εξοικοιωμένοι στη χρήση PBS μπορούν να χρησιμοποιήσουν τα PBS scripts και εντολές.
- Η εξοιμοίωση του PBS καλύπτει μεγάλο βαθμό περιγραφής εργασιών, αλλά όχι όλα

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## SLURM

sbatch
squeue
scancel

```
#!/bin/sh
#SBATCH --mem-per-cpu=2G
#SBATCH -t 1:00:00
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks-per-node=20
#SBATCH -A sept2015
#SBATCH -p compute
....
```

## PBS

qsub
qstat
qdel

```
#!/bin/sh
#PBS -l pvmem=2G
#PBS -l walltime=1:00:00
#PBS -l nodes=1:ppn=20
#PBS -A sept2015
#PBS -q compute
....
```

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Accounting

- Δείτε τα jobs σας το τρέχον 24ωρο
  **sacct**
- Δείτε τα jobs σας τον τελευταίο μήνα
  **sacct -S 2015-08-14**
- Δείτε πόσο χρόνο (και ενέργεια σε Wh εφόσον χρησιμοποιείτε srun) έχετε καταναλώσει το τελευταίο εξάμηνο
  **myreport**
- Δείτε πόσο από τον χρόνο που σας έχει δοθεί έχετε χρησιμοποιήσει
  **mybudget**

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## Διαθέσιμα πακέτα

- Compilers/Debugers
- MPI Implementations
- Libraries
- Applications
- Debuggers/Profilers
- Graphics
- Εφαρμογές

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Compilers

- Εγκατεστημένοι Compilers
  - Intel 15.0.3 (default), 16.0.1
    - module load intel (intel/16.0.1)
    - icc, icpc, ifort
    - Βασικά Flags : -O3 -xCORE-AVX-I (-xAVX)
    - OpenMP : -openmp
  - GNU 4.9.2 (default), 4.9.3, 5.1.0, 5.2.0, 5.3.0
    - module load gnu (gnu/4.9.3, κλπ.)
    - gcc, g++, gfortran
    - Βασικά Flags : -O3 -mavx -march=ivybridge -mtune=ivybridge
    - OpenMP : -fopenmp

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Debuggers

- gdb 7.9.1
- Intel gdb 15.0.3, 16.0.1
- ddd

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## MPI

- Intel MPI 5.0.3 (default), 5.1.1
- OpenMPI 1.8.8, 1.10.2, for GNU and Intel
- MVAPICH2 2.2.2a for GNU and Intel

## Σημειώσεις για τον IntelMPI

- Οι wrappers mpicc/mpicxx/mpif90 του IntelMPI χρησιμοποιούν GNU compilers
- Υπάρχουν οι αντίστοιχοι wrappers (και headers/libraries) για Intel Compilers mpiicc/mpiicpc/mpiifort.

## Σημειώσεις για τον MVAPICH2

- Η χρήση του mvapich2 υποστηρίζεται MONO μέσω του srun => δεν υπάρχει mpirun, mpiexec κλπ.
- Με οποια από τις versions (gnu/intel)
- mpicc -cc=icc, mpicxx -cxx=icpc, mpif90 -fc=ifort

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# MPI
## Εκτέλεση MPI εφαρμογών

- Οι εκδόσεις του MPI έχουν η κάθε μια ένα mpirun/mpiexec κλπ.
- Προτείνεται να χρησιμοποιείται το srun για την εκτέλεση παράλληλων εργασιών.
- Κάποιοι από τους λόγους
  - Το srun ξεκινάει τα εκτελέσιμα σε όλους τους κόμβους οπότε έχει πιο πλήρη έλεγχο.
  - Το srun κάνει accounting κατανάλωσης ρεύματος, χρήση Infiniband, χρήση δίσκων, κλπ.
  - Είναι κοινός τρόπος για τις (3 προς στιγμήν) εκδόσεις MPI που υπάρχουν στο ARIS

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

- Σε περιπτώσεις που η εφαρμογή έχει προβλήματα και χρειαστεί να σταματήσει ίσως να παρουσιαστούν προβλήματα (zombie procs) στη χρήση του scancel, όταν αυτή έχει ξεκινήσει με mpiexec/mpirun.
- Η χρήση mvapich2 υποστηρίζεται (προς στιγμήν) MONO με srun.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## Profilers

- gprof
- mpiP
- Scalasca
- Intel VTune

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Βιβλιοθήκες

module avail για να δείτε την τρέχουσα πλήρη λίστα.

```
atlas/3.11.34
boost/1.58.0
cgnslib/3.2.1/intel
elpa/2015.05.001/intel
fftw/2.1.5
fftw/3.3.4/avx
fftw/3.3.4/sse2
flame/5.0/gnu
flame/5.0/intel
glpk/4.55
gsl/1.16/gnu
hdf5/1.8.12/gnu
hdf5/1.8.12/intel
hdf5/1.8.15/gnu
hdf5/1.8.15/intel
jasper/1.900.1
libint/1.1.5
libjpeg-turbo/1.4.1
libsmm/gnu
libsmm/intel
libxc/2.2.2
netcdf/3.6.3/intel
netcdf/4.1.3/gnu
netcdf/4.1.3/intel
netcdf-c/4.3.3.1/gnu
netcdf-c/4.3.3.1/intel
netcdf-combined/4.3.3.1/intel
netcdf-fortran/4.4.2/gnu
netcdf-fortran/4.4.2/intel
openblas/0.2.14/gnu/int4
openblas/0.2.14/gnu/int8
openblas/0.2.14/intel/int4
openblas/0.2.14/intel/int8
parmetis/4.0.3/gnu
parmetis/4.0.3/intel
pnetcdf/1.6.1/gnu
pnetcdf/1.6.1/intel
scalapack/2.0.2/gnu
scalapack/2.0.2/intel
szip/2.1
udunits2/2.2.19
voro++/0.4.6
```

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Εφαρμογές

```
abinit/7.10.4
bigdft/1.7.6
cdo/1.7.0
code_saturne/4.0.1/intel
cp2k/2.6.1
cpmd/4.1
dlpoly/2.20
dlpoly/4.07
gamess-US/2014R1
gopenmol/3.00
gromacs/4.5.7
gromacs/4.6.7
gromacs/5.0.5
gromacs/5.0.6
gromacs/5.1
lammps/15May15
mdynamix/5.2.7
molden/5.2
molekel/5.4.0
mpqc/2.3.1
namd/2.10/hybrid/memopt
namd/2.10/hybrid/normal
namd/2.10/purempi/memopt
namd/2.10/purempi/normal
ncarg/6.3.0
ncview/2.1.5
nwchem/6.5
octave/4.0.0
octopus/4.1.2
openbabel/2.3.2
openmd/2.2
paraview/4.3
qhull/2012.1
quantum-espresso/5.2.0
R/3.2.1
towhee/7.1.0
vmd/1.9.2
wrf/3.4.1/hybrid
wrf/3.4.1/purempi
wrf/3.7/hybrid
wrf/3.7/purempi
wrf-chem/3.7
wrf-chem/3.7-hybrid
```

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Εφαρμογές

- Εκτός από τα πακέτα που είναι διαθέσιμα μέσω modules υπάρχουν και πακέτα που ενδεχομένως είναι χρήσιμα από το σύστημα.
  - Gnuplot
  - Grace
  - Gimp

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Βέλτιστες Πρακτικές

- Τα nodes του ARIS διαθέτουν 20 cores και 64 GB RAM Διαθέσιμα για jobs τα 56 GB. Χρησιμοποιήστε πλήρως τα cores των nodes, δηλ. 20 cores/node.

```
--tasks-per-node=20
--cpus-per-task=1
```

ή

```
--tasks-per-node=2
--cpus-per-task=10
```

ή άλλους συνδιασμούς tasks/threads με γινόμενο 20.

- Σε περίπτωση που χρειάζεται RAM πάνω από 2.8 GB/core, μπορεί να ζητηθούν λιγότερα cores/node με ταυτόχρονη αύξηση της μνήμης / task, π.χ.

```
--tasks-per-node=18
--cpus-per-task=1
--mem-per-task=3.1G
```

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Βέλτιστες Πρακτικές

- Σε περίπτωση που οι απαιτήσεις μνήμης δεν είναι ίδιες για όλα τα process, χρησιμοποιήστε τη μεταβλητή για συνολική μνήμη / node.

```
--tasks-per-node=20
--cpus-per-task=1
--mem=56G
```

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Βέλτιστες Πρακτικές

- Εάν για κάποιο λόγο χρειάζεται αριθμός cores όχι πολλαπλάσιο του 20, συνήθως δυνάμεις του 2 (256, 512, κλπ.)
  - Χρησιμοποιήστε το μικρότερο δυνατό αριθμό nodes.

| cores | Nodes | tasks/node | Αχρησιμοποίητα cores |
|---|---|---|---|
| 64 | 4 | 20 | 16 σε 1 node |
| 128 | 7 | 20 | 12 σε 1 node |
| 256 | 13 | 20 | 4 σε 1 node |
| 512 | 26 | 20 | 8 σε 1 node |

- Σύνηθες λάθος που μεταφέρεται από τη χρήση συστημάτων με 12 ή 16 cores

| cores | Nodes | tasks/node | Αχρησιμοποίητα cores |
|---|---|---|---|
| 64 | 4 | 16 | 4 cores/node σε 4 nodes = 16 |
| 90 | 6 | 15 | 5 cores/node σε 6 nodes = 30 |
| 128 | 8 | 16 | 4 cores/node σε 8 nodes = 32 |
| 480 | 40 | 12 | 8 cores/node σε 40 nodes = 320 |
| 512 | 32 | 16 | 4 cores/node σε 32 nodes = 128 |

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Βέλτιστες Πρακτικές

- Αρκετά πακέτα διαθέτουν ρυθμίσεις για τα όρια μνήμης στο input τους. Φροντίστε να είναι σε συμφωνία με τα όρια μνήμης που ζητούνται από το SLURM.
- Για jobs που έχουν μεγάλο I/O, χρησιμοποιήστε το χώρο σας στην $WORKDIR.
- Εάν έχετε το δικό σας κώδικα και κάνετε μεταγλώτιση, χρησιμοποιήστε τα κατάλληλα για το σύστημα compiler flags.
- Χρησιμοποιήστε κατά το δυνατόν τις διαθέσιμες Μαθηματικές βιβλιοθήκες που υπάρχουν στο σύστημα και είναι βελτιστοποιημένες για αυτό.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Βέλτιστες Πρακτικές

- Εάν για κάποιο λόγο πρέπει να χρησιμοποιήσετε mpirun, χρησιμοποιήστε το χωρίς τα συνήθη -np, -machinefile κλπ. Συμβαίνει όταν χρησιμοποιούνται, να μην αλλάζει ταυτόχρονα ο αριθμός των tasks στο SLURM και ο αριθμός των tasks στο mpirun -np π.χ.

```
#SBATCH --nodes=10
#SBATCH --ntasks=200
mpirun -np 8
```

Δεσμεύετε (και χρεώνεστε) για 200 cores ενώ χρησιμοποιείτε μόλις 8.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Βέλτιστες Πρακτικές

- Εάν η εφαρμογή σας χρησιμοποιεί OpenMP :
  - Φροντίστε ώστε να δίνετε τα σωστά threads/task στο SLURM.
  - Κοινά λάθη :
    - Δεν θέτουμε τη μεταβλητή OMP_NUM_THREADS=$SLURM_CPUS_PER_TASK
    - Για όσο χρόνο το job μας τρέχει μόνο του στο node, μπορεί να χρησιμοποιεί όλα τα cores. Εάν έρθει και άλλο job στο node, τότε το load του node θα ανέβει πάνω από 20 και το performance των jobs εξαρτάται κατά πολύ από τα υπόλοιπα jobs στο node.
    - Με Hybrid MPI/OpenMP εφαρμογές, αν δεν θέσουμε τη μεταβλητή OMP_NUM_THREADS και χρησιμοποιούμε π.χ. 20 tasks/node, τότε το load του node γίνεται 20x20=400, με αποτέλεσμα ελλατωμένο performance.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

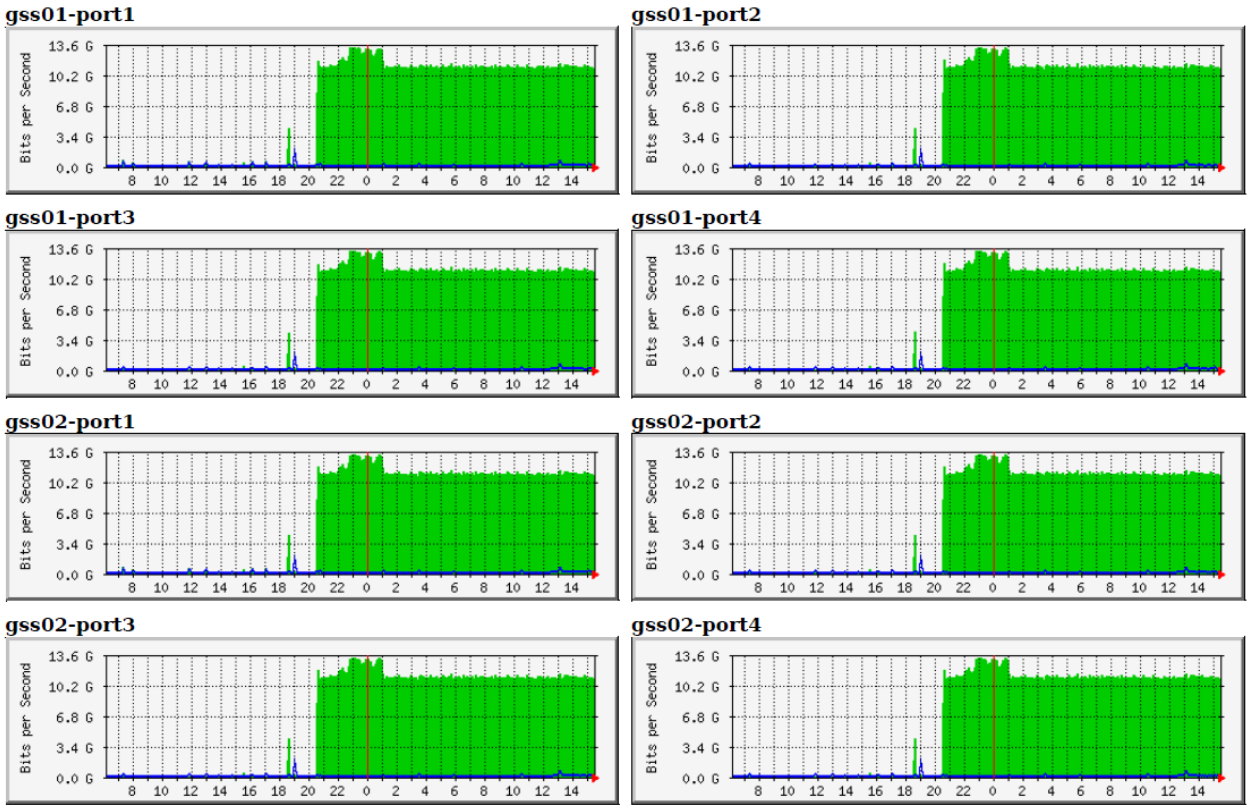
# Βέλτιστες Πρακτικές

- Εξερευνήστε την εφαρμογή σας για πιθανές λεπτομέρειες που αφορούν τις επιδόσεις, ειδικά εάν υπάρχει αρκετό I/O.
- Παραδείγματα : quilting στο wrf, Scratch space και direct/semidirect μέθοδοι σε εφαρμογές quantum mechanics.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Βέλτιστες Πρακτικές

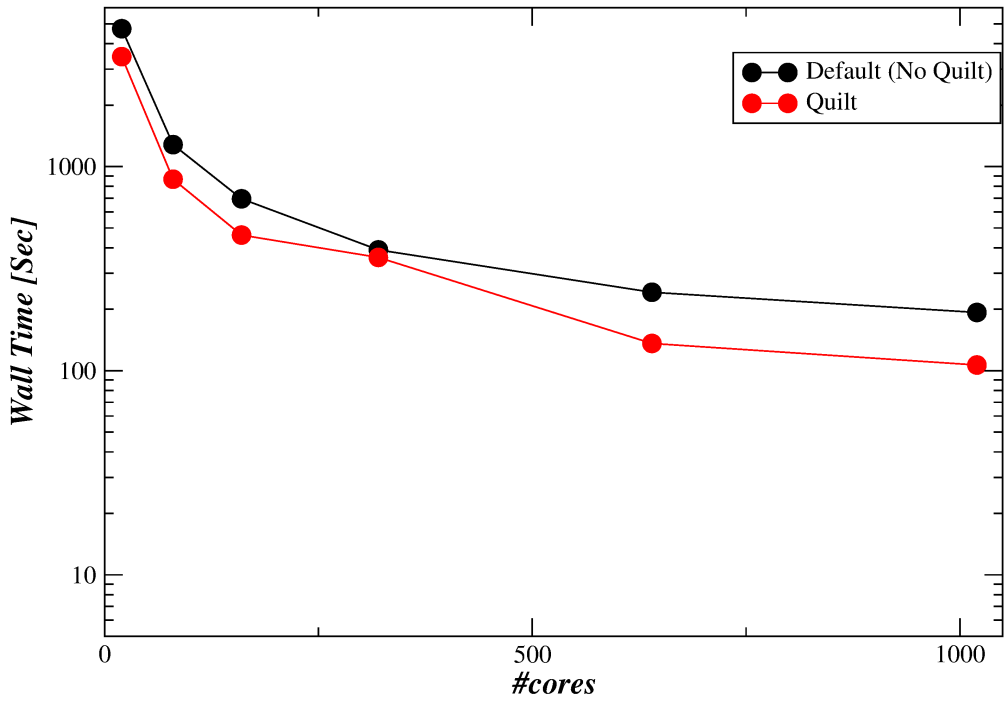
- Παράδειγμα Βαριάς χρήσης SCRATCH : Διάβασμα από files με ρυθμό 12.6 GBytes/s για 2 ημέρες = 2.12 PBytes για 1 job των 100 cores!!!!.



Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Βέλτιστες Πρακτικές

- Παράδειγμα performance/scaling WRF με και χωρίς quilting



Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Βέλτιστες Πρακτικές

- Σε περίπτωση που η εφαρμογή σας χρησιμοποιεί υβριδικό παραλληλισμό, εξερευνήστε τη συμπεριφορά της με διάφορους συνδιασμούς Tasks/Threads per Task.
- Εάν η εφαρμογή σας έχει διαδικασία save/restart χρησιμοποιήστε τη. Αντί για jobs της π.χ. 1 εβδομάδας, προτιμήστε 7 jobs της 1 ημέρας χρησιμοποιώντας τα dependecies του SLURM.
- Βασικό πρόβλημα στα Hexascale συστήματα.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Βέλτιστες Πρακτικές

- Εάν τα job σας αποτελούνται από πολλά σειριακά tasks, συγκεντρώστε τα κατά το δυνατόν σε 20άδες.
- Εάν τα παράλληλα jobs έχουν μικρή διάρκεια π.χ. 30 λεπτά, δώστε στις απαιτήσεις χρόνου χρονικό διάστημα λίγο παραπάνω.
  - Συχνή κακή τακτική : Στέλνουμε π.χ. 50 jobs τα οποία χρειάζονται 5 λεπτά το καθένα.
  - Εάν στα job descriptions ζητήσουμε π.χ. 10 λεπτά και μας επιτρέπεται να τρέχουμε έως 10 jobs ταυτόχρονα, το σύστημα θα τα προγραματίσει να τρέξουν, εφόσον υπάρχουν ελεύθερα resources, σε < 1 ώρα.
  - Πολύ συχνά οι χρήστες βάζουν το μέγιστο όριο χρόνου στα requirements, π.χ. 24 h.
  - Στο παραπάνω παράδειγμα το σύστημα θα προγραμματίσει να τα τρέξει σε 5 μέρες.
  - Η κατάσταση για τον προγραμματισμό της εκτέλεσης περιπλέκεται ακόμα περισότερο όταν το σύστημα έχει πολλά jobs που περιμένουν να τρέξουν.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Βέλτιστες Πρακτικές

- Χρησιμοποιήστε το template στο http://doc.aris.grnet.gr/scripttemplate/ για να φτιάξετε το SLURM script σας. Περιέχει έλεγχο για το αν θέτετε ή όχι τις αντίστοιχες μεταβλητές.
- Επικοινωνήστε με το support [at] hpc.grnet.gr για όποιο πρόβλημα ή απορία έχετε.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Βέλτιστες Πρακτικές

- Στατιστικά Μαρίου 2016
- Το 36% των jobs χρειάστηκε για να τελειώσει λιγότερο από το 5% του χρόνου που ζήτησαν
- Το 12% των jobs μεταξύ 5 και 10 %.
- Το 22% πάνω από 50%

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Βέλτιστες Πρακτικές

- Παράδειγμα για το πόσο μπορεί να βελτιωθεί η ταχύτητα ενός κώδικα χρησιμοποιώντας διαφορετικούς compilers, flags, βιβλιοθήκες : Matrix-Matrix Multiplication

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Πολλαπλασιασμός Πινάκων : Ορισμοί

$$A \cdot B = C$$

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2N} \\ .. & .. & \dots & .... \\ A_{M1} & A_{M2} & \dots & A_{MN} \end{bmatrix} x \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & \dots & B_{1K} \\ B_{21} & B_{22} & \dots & B_{2K} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ B_{N1} & B_{N2} & \dots & B_{NK} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \dots & C_{1K} \\ C_{21} & C_{22} & \dots & C_{2K} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{M1} & C_{M2} & \dots & C_{MK} \end{bmatrix}$$

- Για κάθε στοιχείο του πίνακα C απαιτούνται N πολλαπλασιασμοί και N προσθέσεις.
- Συνολικά $N \times M \times K$ πολλαπλασιασμοί και $N \times M \times K$ προσθέσεις, $=2 \times N \times M \times K$ πράξεις κινητής υποδιαστολής.
- Για $M = N = K = 1000$, χρειάζονται $2 \times 10^9$ πράξεις. Εάν μια μηχανή κάνει αυτές τις πράξεις σε 1 δευτερόλεπτο, τότε η απόδοσή της είναι 2 GFlops.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Πολλαπλασιασμός Πινάκων

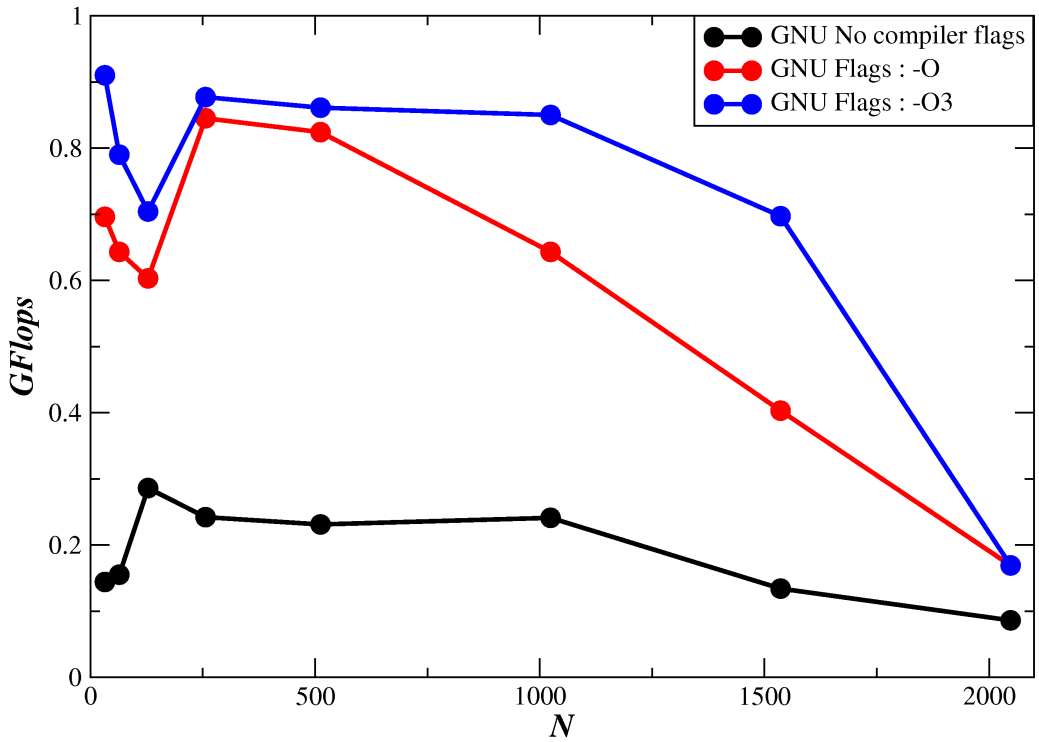
- Τα nodes του ARIS έχουν επίδοση 422 GFlops= 21 GFlops/core.
- Το ARIS έχει συνολική επίδοση 180 TFlops.
- Να το δούμε στην πράξη : Κώδικας σε Fortran, N=M=K

```
do i = 1, N
     do j = 1, N
        c(i,j)= 0.00000000000000
         do ij = 1, N
           c(i,j)=c(i,j)+a(i,ij)*b(ij,j)
         enddo
      enddo
enddo
```

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Πολλαπλασιασμός Πινάκων

- GNU Compilers



Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

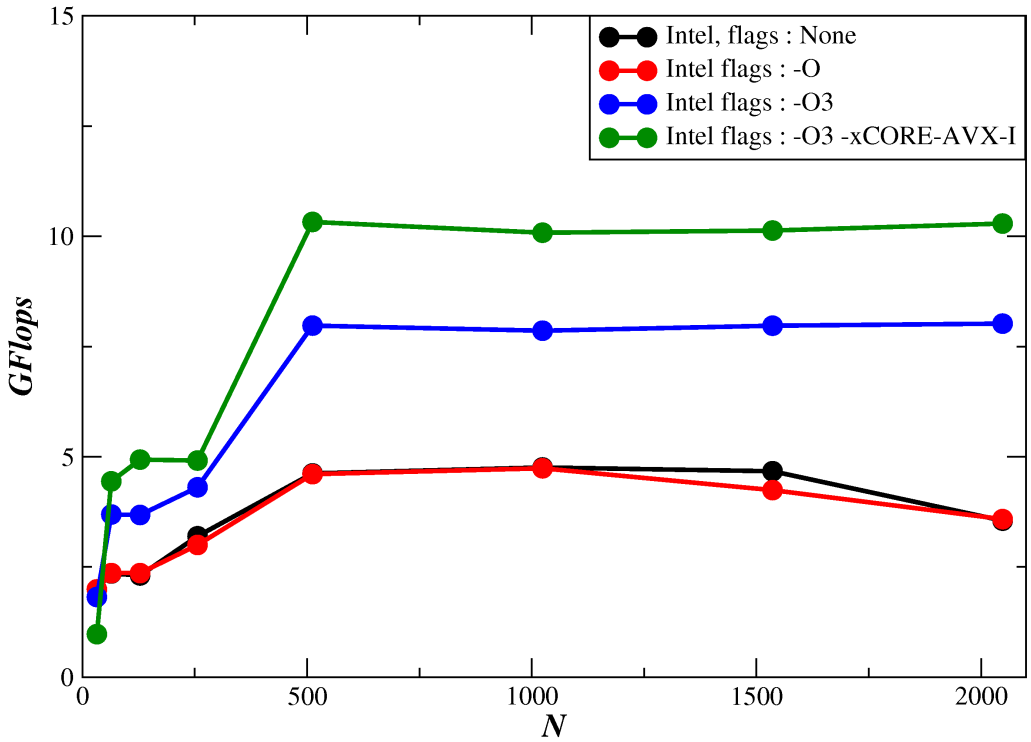
# Πολλαπλασιασμός Πινάκων

- Παρατηρήσεις :
  - Σημαντική διαφορά απόδοσης αναλόγως compiler flags
  - Σημαντική διαφορά απόδοσης αναλόγως μεγέθους (N)
  - Αυξάνοντας το N η απόδοση πέφτει για N > 1000
  - Πολύ μικρότερη απόδοση (25-250 φορές μικρότερη) από την θεωρητική/μετρημένη

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Πολλαπλασιασμός Πινάκων

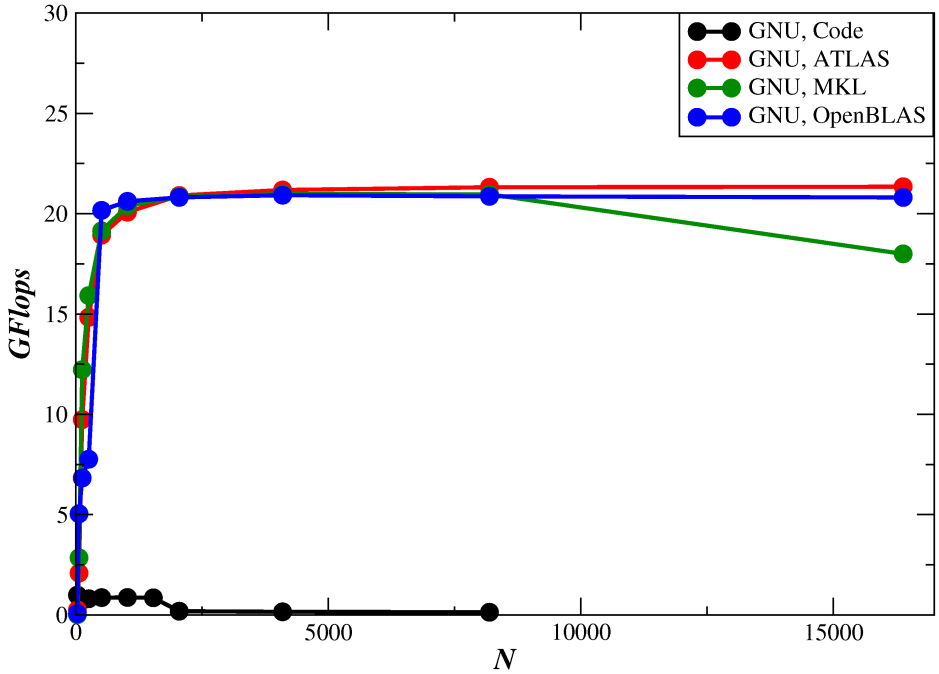
- Intel Compilers



Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## Πολλαπλασιασμός Πινάκων

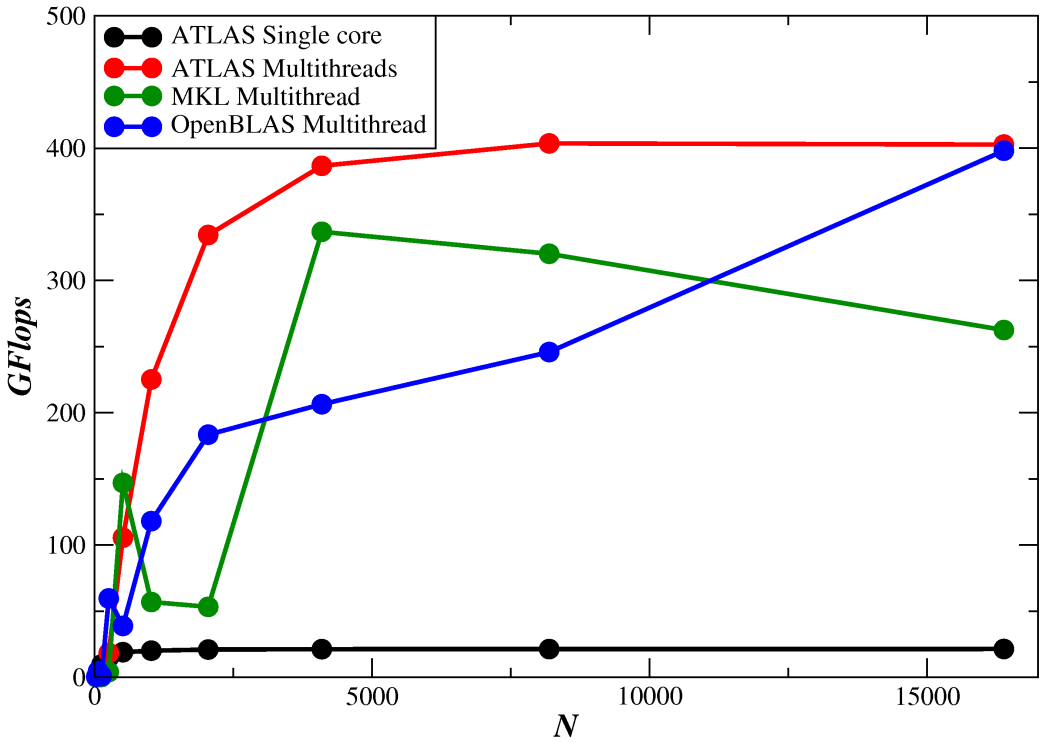
- GNU Compilers, Optimized Libraries
- Αντικατάσταση του κώδικα που είδαμε πιο πρίν με :
  call dgemm('N','N',N,N,N,ONE,a,lda,b,ldb,ONE,c,ldc)



Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Πολλαπλασιασμός Πινάκων

- GNU Compilers, SMP Optimized Libraries



Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Πολλαπλασιασμός Πινάκων

- Παρατηρήσεις :
  - Σημαντική αύξηση επίδοσης, περίπου ανάλογη με τον αριθμό cores, σε όλα τα N.
  - Τεράστια (500x) διαφοροποίηση επίδοσης ως προς απλό, single core κώδικα.
  - Σημαντικές διαφοροποιήσεις επίδοσης αναλόγως N.
  - Η ATLAS συστηματικά πιο γρήγορη σε όλα τα N μέχρι 16384, με συγκλίνουσα επίδοση.
  - Η OpenBLAS αν και σε μικρά N υπολείπεται της ATLAS, σε μεγάλα N είναι αρκετά καλή με αυξητική τάση επίδοσης.
  - Η MKL παρουσιάζει αρκετές διακυμάνσεις επίδοσης σε διάφορα N, με πτωτική τάση σε μεγάλα N.
  - Σε μεγάλα N, απόδοση πολύ κοντά στην θεωρητική/μετρημένη επίδοση των nodes.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## Πολλαπλασιασμός Πινάκων

- Τελειώσαμε εδώ φτάνοντας πολύ κοντά στη θεωρητική επίδοση σε μεγάλα N ?
- Σε κάποιες περιπτώσεις εφαρμογών, γίνεται μεγάλος αριθμός πολλαπλασιαμών πινάκων μικρών διαστάσεων με διαστάσεις που είναι σε μεγάλο ποσοστό πρώτοι αριθμοί, π.χ. A(11,7) x B(3,11). Οι optimized BLAS συνήθως δεν έχουν ικανοποιητική επίδοση.
- LibSMM (Small Matrices Multiplication) developed by Cray Inc.
  - Επιλέγοντας compiler, flags και κάποια BLAS αναφοράς, βρίσκει την επίδοση για N/M/K στο εύρος 1-32, και αφού κάνει αρκετές χρονομετρήσεις αποφασίζει για κάθε συνδιασμό N/M/K αν θα χρησιμοποιήσει το δικό της κώδικα ή την βιβλιοθήκη αναφοράς.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Πολλαπλασιασμός Πινάκων

- Αντικατάσταση είτε του κώδικα είτε της κλήσης dgemm με call smm_dnn(M,N,K,A,B,C).
- Χρονομετρώντας 2000 πολλαπλασιασμούς πινάκων όλων των διαστάσεων N,M,K=1-32, η μέση επίδοση σε GFlops είναι :

| Code | ATLAS | LibSMM |
|---|---|---|
| 1.63 | 5.02 | 5.21 |

- Μέγιστη σχετική επίδοση LibSMM ως προς ATLAS για τα ίδια μεγέθη : 10.95.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

## Πολλαπλασιασμός Πινάκων

- Ακολουθώντας πρακτικές βέλτιστης χρήσης, επιταχύνθηκε ο πολλαπλασιασμός πινάκως έως $\sim 3000$ φορές σε ένα μόνο node : ATLAS SMP vs code, gnu, no flags.

Γενική Χρήση του ARIS
Δρ. Δημήτρης Ντελλής
Περιεχόμενα
Σύνδεση στο σύστημα
Σύστημα αρχείων
Environment Modules
Χρήση των modules
Batch System
SLURM
Accounting
Διαθέσιμα πακέτα
Βέλτιστες Πρακτικές - Κοινά προβλήματα
Παράδειγμα

# Ερωτήσεις ?