

ARIS:
Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

ARIS: Παρουσίαση συστήματος, εφαρμογών και πρακτικών βέλτιστης χρήσης

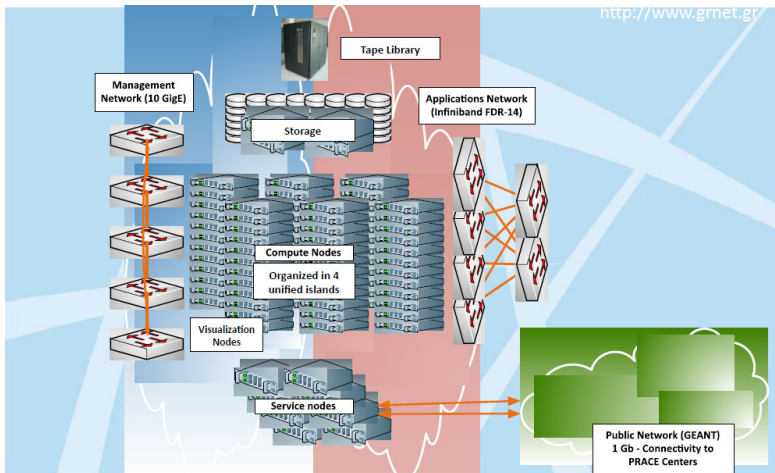
Δρ. Δημήτρης Ντελλής

GRNET

ntell [at] gnet.gr

Περιεχόμενα

- Περιγραφή Συστήματος
- Χρήση Συστήματος
- Environment Modules - Software
- Resources Manager / Batch System
- Βέλτιστες πρακτικές



ARIS:
Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

ARIS:
Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

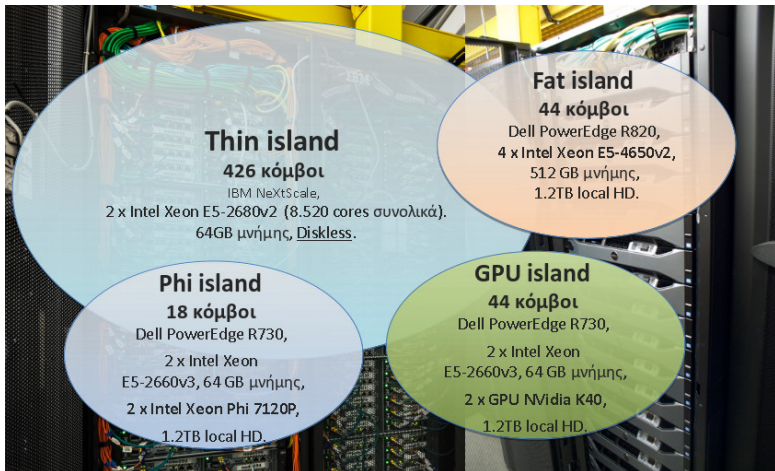
Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές



ARIS:
Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές



- Χώρος εγκατάστασης: Κτίριο Υπουργείου Παιδείας Έρευνας και Θρησκευμάτων, Μαρούσι
- Δύο φάσεις ανάπτυξης:
 - Α' Φάση: Στόχος εφαρμογές υψηλής παραλληλίας
 - Β' Φάση: Εφαρμογές με μεγάλες απαιτήσεις σε μνήμη και εκμετάλλευση τεχνολογιών συνεπεξεργαστών/επιταχυντών

ARIS:
Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές





ARIS:
Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελής

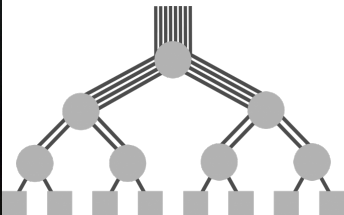
Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές



ARIS:
Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές



ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Πρόσβαση στο Σύστημα

- login nodes : Προσβάσιμοι μέσω Internet, ΜΟΝΟ μέσω SSH, από δηλωμένες IPs/Δίκτυα.
- Σύνδεση SSH με χρήση κλειδιού **ΜΟΝΟ**
- Ιδρυματικά VPN pools ενεργοποιημένα
- compute nodes : χρησιμοποιούνται μόνο από τα jobs, δεν είναι άμεσα προσβάσιμα, δεν έχουν πρόσβαση internet.
- Οι SSH συνδέσεις από το ARIS προς οπουδήποτε **ΔΕΝ** επιτρέπονται.
- Μεταφορές αρχείων προς τα ιδρύματα : Αντί *ARIS* → *PC put*, *PC* → *ARIS get*.
- File system : GPFS, 4 partitions, 2 PB raw capacity

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

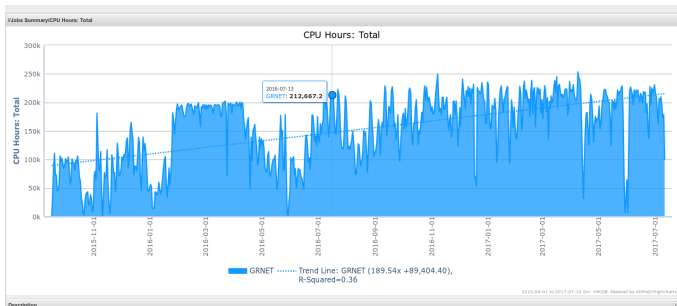
Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Στατιστικά χρήση

- ~ 172M core hours allocated.
- ~ 103M core hours (~ 11800 core years) consumed
- ~ 2.6x theoretical - more in practice - equivalence of GPU/Phi core Hours.



ARIS:

Παρουσίαση συστήματος, εφαρμογών και πρακτικών βέλτιστης χρήσης

Δρ. Δημήτρης Ντελής

Περιγραφή Συστήματος

Χρήση Συστήματος

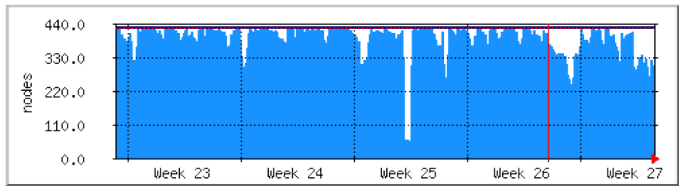
Environment Modules

Batch System

Βέλτιστες Πρακτικές

Στατιστικά χρήσης Thin Nodes

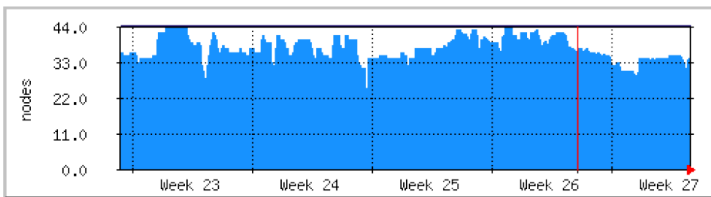
'Monthly' Graph (2 Hour Average)



	Max	Average	Current
Nodes Allocated	426 Nodes (100.0%)	386 Nodes (90.6%)	266 Nodes (62.4%)
Total Nodes	426 Nodes (100.0%)	426 Nodes (100.0%)	426 Nodes (100.0%)

Στατιστικά χρήσης GPU Nodes

'Monthly' Graph (2 Hour Average)



	Max	Average	Current
Nodes Allocated	44 Nodes (100.0%)	37 Nodes (84.1%)	34 Nodes (77.3%)
Total Nodes	44 Nodes (100.0%)	44 Nodes (100.0%)	44 Nodes (100.0%)

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

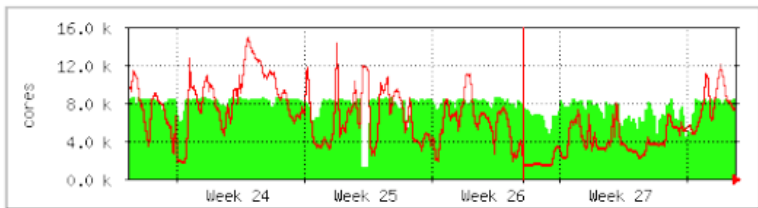
Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Στατιστικά χρήσης

'Monthly' Graph (2 Hour Average)



Max Average Current

Cores used by RUNNING jobs 8508 Cores 7594 Cores 8264 Cores

Cores requested by QUEUED jobs 15 kCores 6184 Cores 6971 Cores

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

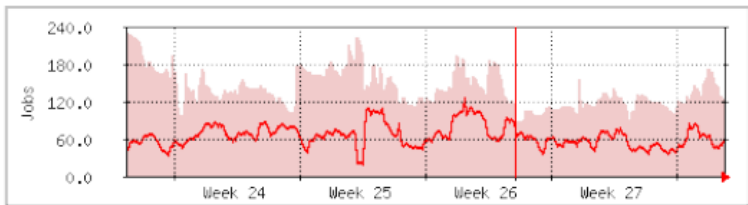
Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Στατιστικά χρήσης

'Monthly' Graph (2 Hour Average)



Max Average Current

Queued Jobs 230 Jobs 139 Jobs 124 Jobs

Running Jobs 123 Jobs 63 Jobs 56 Jobs

ARIS:
Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

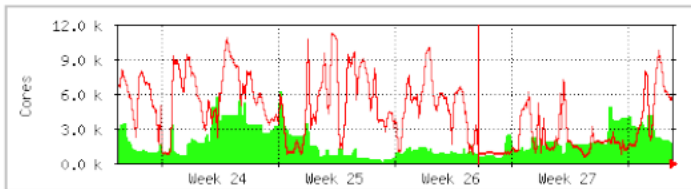
Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Στατιστικά χρήσης

`Monthly' Graph (2 Hour Average)



	Max	Average	Current
Cores queued due Dependency or Limits	6222 Cores	1797 Cores	1714 Cores
Cores queued due to Priority or Resources	11 kCores	4387 Cores	5257 Cores

ARIS:

Παρουσίαση συστήματος, εφαρμογών και πρακτικών βέλτιστης χρήσης

Δρ. Δημήτρης Ντελλής

Περιγραφή Συστήματος

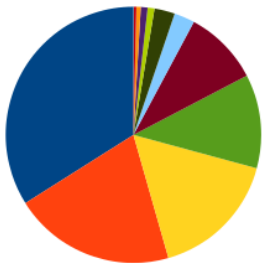
Χρήση Συστήματος

Environment Modules

Batch System

Βέλτιστες Πρακτικές

Στατιστικά χρήσης : pr003 Disciplines



- Chemical Sciences and Materials
- Engineering
- Earth System Sciences
- Biochemistry, Bioinformatics and Life sciences
- Solar Physics
- plasma & fusion physics
- Radiation Oncology – Neurosurgery
- Physiology and Medicine
- Plasma Physics Simulations
- Physics
- Environmental Sciences
- Biophysics

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Στατιστικά χρήσης : pr003 Organizations



■ National & Kapodistrian
University of Athens

■ National Observatory of
Athens

■ Aristotle University of
Thessaloniki

■ National Center for Scientific
Research "Demokritos" (NCSR
"Demokritos")

■ University of Patras

■ National Technical University
of Athens

■ Hellenic Pasteur Institute

■ University of Ioannina

ARIS:
Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Πληροφορίες για Πρόσβαση, Νέα κλπ: <https://hpc.grnet.gr/>

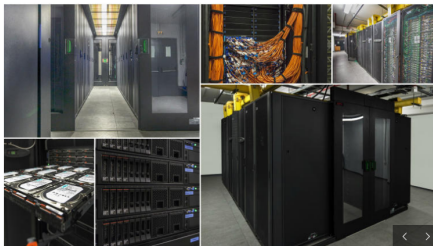


Τεχνική Περιγραφή ▾ Πρόσβαση ▾ Υποστήριξη ▾ Εκπαίδευση ▾ Επιστημονικά Αποτελέσματα ▾

Υπερπολογιστικές Υπηρεσίες ΕΔΕΤ

Το Εθνικό δίκτυο Έρευνας και Τεχνολογίας παρέχει υπολογιστικούς πόρους υψηλών επιδόσεων στις ελληνικές και διεθνείς επιστημονικές και ερευνητικές κοινότητες για την πραγματοποίηση επιστημονικής έρευνας.

[Πρόσβαση στην Υποδομή](#)



Κατάσταση Συστημάτων

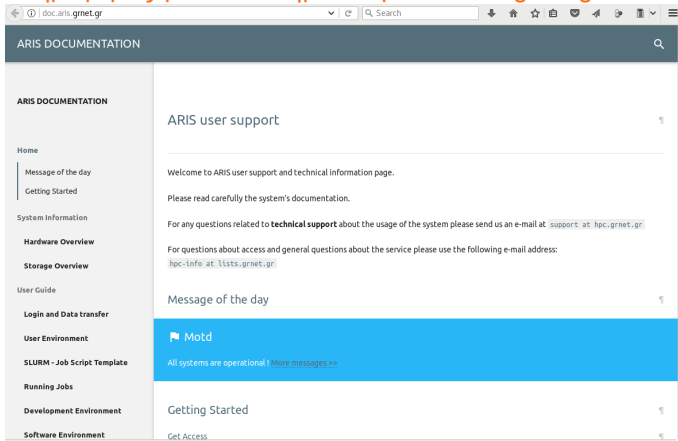
ARIS

Partition Status Jobs (R/Q) Nodes (A/F)

Νέα Εκδηλώσεις

> Προβλέποντας την κλιματική αλλαγή στην Ευρώπη με χρήση της υπερπολογιστικής υποδομής ARIS του Εθνικού δικτύου Έρευνας και Τεχνολογίας
11/07/2017

Πληροφορίες για το Σύστημα : <http://doc.aris.grnet.gr/>



The screenshot shows the ARIS DOCUMENTATION website interface. The browser address bar displays 'doc.aris.grnet.gr'. The page title is 'ARIS DOCUMENTATION'. The main content area is titled 'ARIS user support' and contains the following text:

Welcome to ARIS user support and technical information page.

Please read carefully the system's documentation.

For any questions related to **technical support** about the usage of the system please send us an e-mail at support@hpc.grnet.gr

For questions about access and general questions about the service please use the following e-mail address:
hpc-info@lists.grnet.gr

Message of the day

Motd

All systems are operational | [More messages >>](#)

Getting Started

Get Access

The left sidebar contains a navigation menu with the following items:

- Home
- Message of the day
- Getting Started
- System Information
- Hardware Overview
- Storage Overview
- User Guide
- Login and Data transfer
- User Environment
- SLURM - Job Script Template
- Running Jobs
- Development Environment
- Software Environment

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Environment Modules. Τι είναι ?

- Για τη χρήση εφαρμογών που δεν προέρχονται από το σύστημα, πρέπει να ρυθμιστούν PATH, LD_LIBRARY_PATH και διάφορες άλλες μεταβλητές περιβάλλοντος για τη λειτουργία των εφαρμογών.
- Συνήθης πρακτική να ρυθμίζονται αυτές οι μεταβλητές είτε γενικά σε κάποιο σύστημα που τρέχει μερικές μόνο εφαρμογές, είτε στο .bashrc του κάθε χρήστη.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

- Η κατάσταση περιπλέκεται περισσότερο με την ύπαρξη πάνω της μιας versions του ίδιου πακέτου, οι μεταβλητές των οποίων εξαρτώνται από άλλες μεταβλητές.
- 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.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

- Κάθε module file περιέχει την πληροφορία που χρειάζεται ώστε να ρυθμίσει τις μεταβλητές περιβάλλοντος για κάποια εφαρμογή.
- 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

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

- 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.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

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

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

`module unload MODULENAME`

- 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`

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

```
----- /apps/modulefiles/compiler -----
binutils/2.25      gnu/4.9.4      intel/17.0.0
binutils/2.26      gnu/5.1.0      intel/17.0.1
binutils/2.27      gnu/5.2.0      intel/17.0.3
binutils/2.28 (default) gnu/5.3.0      intel/17.0.4
clang/5.0.0 (default) gnu/5.4.0      java/1.7.0
cuda/6.5.14        gnu/6.1.0      java/1.8.0 (default)
cuda/7.0.28         gnu/6.2.0      pgi/15.5
cuda/7.5.18         gnu/6.3.0      pgi/16.10 (default)
cuda/8.0.27         gnu/7.1.0      pgi/16.4
cuda/8.0.44         intel/15.0.3 (default) pgi/16.5
cuda/8.0.61 (default) intel/15.0.6   pgi/16.7
gdb/7.11.1          intel/16.0.0   pgi/16.9
gdb/7.12.1 (default) intel/16.0.1   pgi/17.1
gdb/7.9.1           intel/16.0.2   pgi/17.4
gnu/4.9.2 (default) intel/16.0.3   sun/17.5
gnu/4.9.3           intel/16.0.4   sun/12.5 (default)
```

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλάης

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

```

----- /apps/modulefiles/applications -----
abinit/7.10.4
abinit/7.10.5 (default)
abinit/8.0.7
abinit/8.0.8
abyss/20150917 (default)
anaconda/2.4.0
ansys/17.0
autodock/4.2.6
bigdft/1.7.6
bigdft/1.7.7 (default)
bowtie/1.1.2
bowtie/2.2.6
cdftools/3.0 (default)
cdo/1.7.0 (default)
code_saturne/4.0.1/intel
comsol/5.2a
cosmo-art/131108_5.00 (default)
cp2k/2.6.1
cp2k/2.6.2 (default)
cp2k/3.0
cp2k/4.1
cpmd/3.17.1
cpmd/4.1 (default)
namd/2.12/purempi/memopt
namd/2.12/purempi/normal
ncarg/6.3.0 (default)
ncbi-blast/2.2.31
ncbi-blast/2.6.0
nco/4.5.2
ncview/2.1.5 (default)
ncview/2.1.6
nwchem/6.5 (default)
nwchem/6.6
octave/4.0.0 (default)
octave/4.0.2
octave/4.2.0
octave-gui/4.0.0 (default)
octopus/4.1.2
octopus/5.0.0
octopus/5.0.1 (default)
octopus/6.0
openbabel/2.3.2 (default)
openfoam/2.3.1
openfoam/2.4.0 (default)
openfoam/3.0.1
openfoam/4.1
  
```

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

cufflinks/2.2.2	openmd/2.2
dalton/2016.2	openmd/2.3
desmond/2013.3	openmd/2.4.1 (default)
desmond/2015.3	orca/3.0.3
desmond/2015.4	paraview/4.3 (default)
desmond/2016.1	paraview/5.0.0
desmond/2016.3	paraview/5.2.0
desmond/3.6.1.1	pasha/1.0.10
dlpoly/2.20	perl/5.22.0 (default)
dlpoly/4.07	plumed/2.1.3 (default)
dlpoly/4.08 (default)	psi4/4.0b5
dlpoly/classic1.19	pyferret/1.2.0
elmerfem/6.1 (default)	python/2.7.10
emboss/6.0.0	python/2.7.13
fenics/20170307 (default)	python/3.5.0 (default)
ferret/6.96 (default)	qhull/2012.1
gamess-US/2014R1	qt/4.8.6 (default)
gamess-US/2016R1 (default)	qt/5.6.0
gate/6.2	quantum-espresso/5.1.1
gate/7.1	quantum-espresso/5.2.0 (default)
gate/7.2 (default)	quantum-espresso/5.2.1
gate/8.0	quantum-espresso/5.3.0
gnuplot/5.0.1	quantum-espresso/5.4.0
gnuplot/5.0.2	quantum-espresso/6.0
gnuplot/5.0.5 (default)	quantum-espresso/6.1

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

gopenmol/3.00 (default)	R/3.2.1 (default)
gpaw/0.10	R/3.2.3
gpaw/0.11	R/3.3.1
gpaw/1.0.0	R/3.3.2
gromacs/2016	Ray/2.3.1
gromacs/2016.1	regcm/4.5.0 (default)
gromacs/2016.2	root/5.34.34
gromacs/2016.3	root/5.34.34gcc44
gromacs/4.5.7	root/6.04.06
gromacs/4.6.7	root/6.06.02
gromacs/5.0.4	root/6.08.06
gromacs/5.0.5	ruby/2.4.0 (default)
gromacs/5.0.6	samtools/1.2
gromacs/5.0.7 (default)	samttools/1.4
gromacs/5.1	schrodinger/2016-2 (default)
gromacs/5.1.1	schrodinger/2016-3
gromacs/5.1.2	schrodinger/2017-1
gromacs/5.1.3	siesta/3.2p15
gromacs/5.1.4	siesta/4.0 (default)
hadoop/2.7.2 (default)	siesta/4.0-b2
hadoop/spark2.0.2	SOAPdenovo2/240 (default)
hmmmer/3.1b2	tcl/8.6.5 (default)
idl/8.4	tophat/2.1.0
lammps/10Aug15	tophat/2.1.1
lammps/14May16	towhee/7.1.0

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

lammps/15May15 (default)	towhee/7.2.0 (default)
lammps/16Feb16	trinity/2.1.1
lammps/17Nov16	upp/3.0 (default)
lammps/30Jul16	visit/2.10.2
lammps/7Dec15	visit/2.11.0
lsdalton/1.2	visit/2.12.0
mdynamix/5.2.7 (default)	visit/2.12.1
molden/5.2	visit/2.8.2 (default)
molden/5.4 (default)	vmd/1.9.2 (default)
molekel/5.4.0 (default)	wgrib2/2.0.5 (default)
mpiblast/1.6.0	wrf/3.4.1/hybrid
mpqc/2.3.1 (default)	wrf/3.4.1/purempi
namd/2.10/hybrid/memopt	wrf/3.6.1/purempi
namd/2.10/hybrid/normal	wrf/3.7/hybrid
namd/2.10/purempi/memopt	wrf/3.7/purempi
namd/2.10/purempi/normal	wrf/3.7.1/purempi
namd/2.11/hybrid/memopt	wrf/3.8/purempi
namd/2.11/hybrid/normal	wrf/3.8.1/purempi
namd/2.11/purempi/memopt	wrf-chem/3.7 (default)
namd/2.11/purempi/normal	wrf-chem/3.7-hybrid
namd/2.12/hybrid/memopt	wrf-chem/3.8
namd/2.12/hybrid/normal	yambo/4.1.1 (default)

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

```
----- /apps/modulefiles/libraries -----
atlas/3.10.2          libxc/3.0.0/gnu
atlas/3.10.3          libxc/3.0.0/intel
atlas/3.11.34 (default)  matlab/runtime/2014b
atlas/3.11.38          matlab/runtime/2016b
boost/1.58.0 (default)  matlab/runtime/2017a
boost/1.62.0           med/3.0.8/intel
boost-py2.7/1.58.0     metis/5.1.0
cgnslib/3.2.1/intel    ncbi_cxx/12.0.0
clhep/2.2.0.5          netcdf/3.6.3/gnu
elpa/2015.05.001/gnu   netcdf/3.6.3/intel
elpa/2015.05.001/intel netcdf/4.1.3/gnu
elpa/2015.11.001/gnu   netcdf/4.1.3/intel
elpa/2015.11.001/intel netcdf/4.4.1/gnu
fftw/2.1.5             netcdf/4.4.1/intel
fftw/3.3.4/avx         netcdf-c/4.3.3.1/gnu
fftw/3.3.4/sse2        netcdf-c/4.3.3.1/intel
fftw/3.3.5 (default)   netcdf-combined/4.3.3.1/intel
fftw/3.3.6             netcdf-fortran/4.4.2/gnu
fgsl/1.0.0/gnu         netcdf-fortran/4.4.2/intel
fgsl/1.0.0/intel       openblas/0.2.14/gnu/int4
flame/5.0/gnu          openblas/0.2.14/gnu/int8
flame/5.0/intel        openblas/0.2.14/intel/int4
gdal/2.2.0             openblas/0.2.14/intel/int8
```

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

geant4/4.10.01	openblas/0.2.15/gnu
geant4/4.10.01.p02	openblas/0.2.15/intel
geant4/4.10.03.p01	openblas/0.2.17/gnu
geant4/4.9.5p01	openblas/0.2.17/intel
glpk/4.55	openblas/0.2.18/gnu
gsl/1.16/gnu	openblas/0.2.18/intel
gsl/2.1/gnu	openblas/0.2.19/gnu
gsl/2.1/intel	openblas/0.2.19/intel
gsl/2.2.1/gnu	papi/5.4.1
gsl/2.2.1/intel	parmetis/4.0.3/gnu
hdf5/1.8.12/gnu	parmetis/4.0.3/intel
hdf5/1.8.12/intel	petsc/3.6.2 (default)
hdf5/1.8.15/gnu	petsc/3.7.2
hdf5/1.8.15/intel	petsc/3.7.4
hdf5/1.8.17/gnu	pnetcdf/1.6.1/gnu
hdf5/1.8.17/intel	pnetcdf/1.6.1/intel
jasper/1.900.1 (default)	proj4/4.9.3
libint/1.1.5	scalapack/2.0.2/gnu
libjpeg-turbo/1.4.1 (default)	scalapack/2.0.2/intel
libsmm/gnu	gzip/2.1 (default)
libsmm/intel	udunits2/2.2.19 (default)
libxc/2.2.2	voropp/0.4.6 (default)

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

```

----- /apps/modulefiles/parallel -----
intelmpi/2017.0      openmpi/1.10.4/gnu
intelmpi/2017.1      openmpi/1.10.4/intel
intelmpi/2017.2      openmpi/1.10.5/gnu
intelmpi/2017.3      openmpi/1.10.5/intel
intelmpi/2017.4      openmpi/1.8.5/gnu
intelmpi/5.0.3(default) openmpi/1.8.5/intel
intelmpi/5.1.1        openmpi/1.8.7/gnu
intelmpi/5.1.2        openmpi/1.8.7/intel
intelmpi/5.1.3        openmpi/1.8.8
intelmpi/5.1.3.258    openmpi/2.0.0/gnu
mpich/3.2/gnu         openmpi/2.0.0/intel
mpich/3.2/intel       openmpi/2.0.1/gnu
mpiP/3.4.1(default)  openmpi/2.0.1/intel
mvapich2/gnu/2.2.2a  openmpi/2.0.2/gnu
mvapich2/intel/2.2.2a openmpi/2.0.2/intel
mvapich2_gpu/gnu/2.2.2a openmpi/2.0.3/gnu
mvapich2_gpu/intel/2.2.2a openmpi/2.0.3/intel
openmpi/1.10.0/gnu   openmpi/2.1.0/gnu
openmpi/1.10.0/intel openmpi/2.1.0/intel
openmpi/1.10.1/gnu   openmpi/2.1.1/gnu
openmpi/1.10.1/intel openmpi/2.1.1/intel
openmpi/1.10.2/gnu   padb/3.3
openmpi/1.10.2/intel scalasca/2.2.2
    
```

ARIS:
Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

```
openmpi/1.10.3/gnu  
openmpi/1.10.3/intel
```

```
scalasca/2.3.1 (default)
```

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Resources Manager - 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

Όταν μια εργασία υποβάλλεται 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.
- Εγγυάται ότι το κάθε run θα έχει πλήρη και **αποκλειστική** πρόσβαση στους πόρους που ζήτησε, π.χ. μνήμη, cores, accelerators κλπ.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

- Μπορώ να στείλω π.χ. 1000 runs, τα οποία θα εκτελεστούν χωρίς ταυτόχρονη εκτέλεση στα ίδια resources (μνήμη, cores).
- Αν κάποιος άλλος χρήστης στείλει run θα πάρει και αυτός το αναλογούν ποσοστό resources χωρίς επικάλυψη.
- 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. Ίσως η χρήση της υποδομής Grid : www.hellasgrid.gr ταιριάζει καλύτερα σε τέτοιες εργασίες.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

SLURM Scripts

- Ένα SLURM Script περιγράφει τους πόρους που χρειάζεται για να τρέξει η εργασία, όπως επίσης τις εντολές εκτέλεσης της εργασίας.
- <http://doc.aris.grnet.gr/scripttemplate/>
- Script generator και validator

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

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
# To %j παίρνει την τιμή του JobID
# Αριθμός nodes
#SBATCH --nodes=200
# Αριθμός MPI Tasks
#SBATCH --ntasks=400
# Αριθμός MPI Tasks / node
#SBATCH --ntasks-per-node=2
# Αριθμός Threads / MPI Task
#SBATCH --cpus-per-task=10
# Μνήμη ανά node # Από τις 2 επιλογές
#SBATCH --mem=56G # Μνήμη ανά core # προτίνεται η πρώτη.
# Accounting tag (θα δοθεί προφορικά αν χρειαστεί)
#SBATCH -A sept2015
# Ζητούμενος χρόνος DD-HH:MM:SS
#SBATCH -t 1-01:00:00
# partition, compute=default στο ARIS. gpu, phi, fat, taskp
# τα εναλλακτικά.

module purge
module load gnu/4.9.2
module load intel/15.0.3
module load intelmpi/5.0.3

if [ x$SLURM_CPUS_PER_TASK == x ]; then #
    export OMP_NUM_THREADS=1 #
else # Δεν σβήνουμε αυτά εκτός αν
    export OMP_NUM_THREADS=$SLURM_CPUS_PER_TASK # ξέρουμε ΑΚΡΙΒΩΣ τι κάνουμε
fi # και τι συνέπειες μπορεί να έχει.

srun EXECUTABLE ARGUMENTS # Εδώ το executable και τα πιθανά arguments που παίρνει.
```

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Χρήση **srun** για την εκτέλεση των εφαρμογών

- Οι εκδόσεις του MPI έχουν η κάθε μια ένα mpiexec/mpirun 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

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

- Η χρήση **mpirun**, **mpiexec** κλπ. δεν συνιστάται. Σε περιπτώσεις που η εφαρμογή έχει προβλήματα και σταματήσει ίσως να παρουσιαστούν προβλήματα (zombie procs) στη χρήση του **scancel**.
- Μπορεί να μεταφέρει σε όλα τα tasks τις μεταβλητές περιβάλλοντος που έχουν οριστεί. Με ssh είναι πολύ πιθανό να μη διαδίδονται σε όλα τα tasks οι μεταβλητές περιβάλλοντος.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Επικοινωνία με το SLURM

- Υποβολή εργασίας

```
sbatch SLURM_JobScript.sh  
Submitted batch job 123456
```

- Κατάλογος εργασιών

```
squeue
```

- Κατάλογος εργασιών με περισσότερες λεπτομέρειες

```
squeue -o "% .8i % .9P % .10j % .10u % .8T % .5C  
% .4D % .6m % .10l % .10M % .10L % .16R"
```

- Ακύρωση εργασίας

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

`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 των πόρων του συστήματος

`sinfo`

- Πληροφορίες για την τρέχουσα χρήση των πόρων συγκεκριμένου partition

π.χ. `sinfo -p gpu`

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

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 και για όλα τα partitions. Αυτά είναι :
 - Αριθμός Jobs που μπορούν να εκτελούνται ταυτόχρονα, είτε συνολικά είτε ανά partition.
 - Αριθμός Jobs που μπορούν να εκτελούνται ή να βρίσκονται σε αναμονή, είτε συνολικά είτε ανά partition.
 - Μέγιστος αριθμός cores ή nodes που μπορούν να χρησιμοποιηθούν ταυτόχρονα από jobs ενός account, είτε συνολικά είτε ανά partition.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

- Μέγιστη χρονική διάρκεια εκτέλεσης ενός Job, είτε συνολικά είτε ανά partition.
- Μέγιστος αριθμός nodes ή και cores που μπορεί να ζητήσει ένα Job, είτε συνολικά είτε ανά partition.
- Συνολικός αριθμός core hours στη διάρκεια ενός project, είτε συνολικά είτε ανά partition.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Χρήση Accelerators

- GPU

#SBATCH --partition=gpu

#SBATCH --gres=gpu:2

Variable : SLURM_JOB_GPUS=0, 1 και

CUDA_VISIBLE_DEVICES=0, 1

- Xeon Phi

#SBATCH --partition=phi

#SBATCH --gres=mic:2

Variable : OFFLOAD_DEVICES=0, 1

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Μοντέλα παράλληλης χρήσης

- MPI vs SMP vs Hybrid
- Ποιό είναι το καλύτερο ?
 - Εξαρτάται από τον αλγόριθμο
 - ...και κυρίως από τα data.
 - Ο ίδιος αλγόριθμος μπορεί να έχει πολύ διαφορετικό efficiency με διαφορετικά data.
 - Για διάφορους αλγορίθμους υπάρχουν οι "χρυσοί" κανόνες τι είναι καλύτερο, αλλά :
 - Μετράμε προσεκτικά την απόδοση συναρτήσεων δεδομένων και αριθμού nodes/cores καθώς και άλλων λεπτομερειών του προβλήματός σας πριν αποφασίσουμε πώς θα τρέξουμε.

ARIS:

Παρουσίαση συστήματος, εφαρμογών και πρακτικών βέλτιστης χρήσης

Δρ. Δημήτρης Ντελλής

Περιγραφή Συστήματος

Χρήση Συστήματος

Environment Modules

Batch System

Βέλτιστες Πρακτικές

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

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

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.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

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.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

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.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

- 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 $20 \times 20 = 400$, με αποτέλεσμα ελλειπτικό performance.
- Στο script template υπάρχει κώδικας που μας προστατεύει από αυτό.
- Παραδόξως, είναι το σημείο που αφαιρείται πολύ συχνά στα υποβαλλόμενα scripts, ακόμα πιο συχνά και από το job-name.....

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Βέλτιστες Πρακτικές

- Εξερευνήστε την εφαρμογή σας για πιθανές λεπτομέρειες που αφορούν τις επιδόσεις, ειδικά εάν υπάρχουν αρκετό I/O.
- Παραδείγματα : quilting στο wrf, Scratch space και direct/semidirect μέθοδοι σε εφαρμογές quantum mechanics.
- Μετρήστε τις επιδόσεις της εφαρμογής εφόσον είναι υβριδική (MPI/OpenMP) για το input σας με διάφορους συνδιασμούς MPI Tasks/Threads per Task (gromacs, namd, lammgs, Quantum Espresso,)

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Βέλτιστες Πρακτικές

- Μάθετε ή εξερευνήστε την απόδοση/κλιμάκωση της εφαρμογής σας συναρτήσει του μεγέθους/χαρακτηριστικών των δεδομένων σας. Χρησιμοποιήστε τόσα resources όσα χρειάζονται ώστε να υπάρχει καλό efficiency.

ARIS:
Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

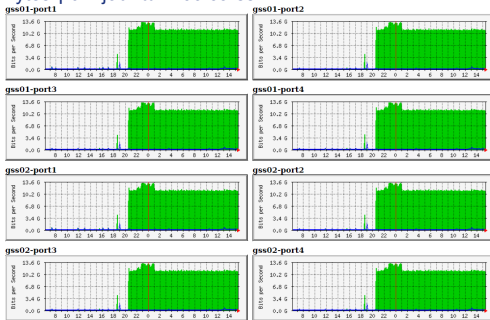
Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

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!!!!.



- Με αλλαγή μόνο ενός flag στο input το I/O γίνεται φυσιολογικό.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

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 dependencies του SLURM. Βασικό πρόβλημα στα Hexascale συστήματα.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

- Στο πρώτο call σε ορισμένους χρήστες δόθηκε η δυνατότητα να τρέχουν jobs των 7 ή 15 ημερών λόγω αδυναμίας save/restart.
Ποσοστό jobs που τελειώσαν κανονικά αρκετά μικρό.
- Οι παραπάνω χρήστες, εξαιτίας 2 downtime για προγραμματισμένες μεγάλης διάρκειας διακοπές ρεύματος για 2 συνεχόμενες Παρασκευές, σε 14 ημέρες δεν έτρεξαν κανένα από τα jobs τους.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

- Αποφύγετε μή υποχρεωτικές παραμέτρους στο input που ρυθμίζουν το μοίρασμα των υπολογισμών σε cores, δημιουργία grid ή τη μέθοδο που θα χρησιμοποιηθεί αν υπάρχει η δυνατότητα να δίνονται δυναμικά σε run time, κλπ. π.χ. NPROC_X/Y στο WRF, processors ή pair_style lj/cut/gpu vs pair_style lj/cut και -sf gpu στο LAMMPS.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Βέλτιστες Πρακτικές

- Εάν τα job σας αποτελούνται από πολλά σειριακά tasks, συγκεντρώστε τα κατά το δυνατόν σε 20άδες για τα compute ή 40άδες/80άδες για τα fat/taskr.
- 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.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

- Εάν στα job descriptions ζητήσουμε π.χ. 10 λεπτά και μας επιτρέπεται να τρέχουμε έως 10 jobs ταυτόχρονα, το σύστημα θα τα προγραμματίσει 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 περισσότερο όταν το σύστημα έχει πολλά jobs που περιμένουν να τρέξουν.

ARIS:

Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Βέλτιστες Πρακτικές

- Στατιστικά Μαρτίου 2017
 - Το 52% των jobs χρειάστηκε για να τελειώσει λιγότερο από το 5% του χρόνου που ζήτησε
 - Το 9% των jobs μεταξύ 5 και 10 %.
 - Το 20% πάνω από 50%
- Στατιστικά Σεπτεμβρίου 2016
 - Το 68.5% των jobs χρειάστηκε για να τελειώσει λιγότερο από το 5% του χρόνου που ζήτησε
 - Το 3.5% των jobs μεταξύ 5 και 10 %.
 - Το 13% πάνω από 50%
- Στατιστικά Μαΐου 2016
 - Το 46% των jobs χρειάστηκε για να τελειώσει λιγότερο από το 5% του χρόνου που ζήτησε
 - Το 7% των jobs μεταξύ 5 και 10 %.
 - Το 15% πάνω από 50%

ARIS:
Παρουσίαση
συστήματος,
εφαρμογών
και πρακτικών
βέλτιστης
χρήσης

Δρ. Δημήτρης
Ντελλής

Περιγραφή
Συστήματος

Χρήση
Συστήματος

Environment
Modules

Batch System

Βέλτιστες
Πρακτικές

Ερωτήσεις ?