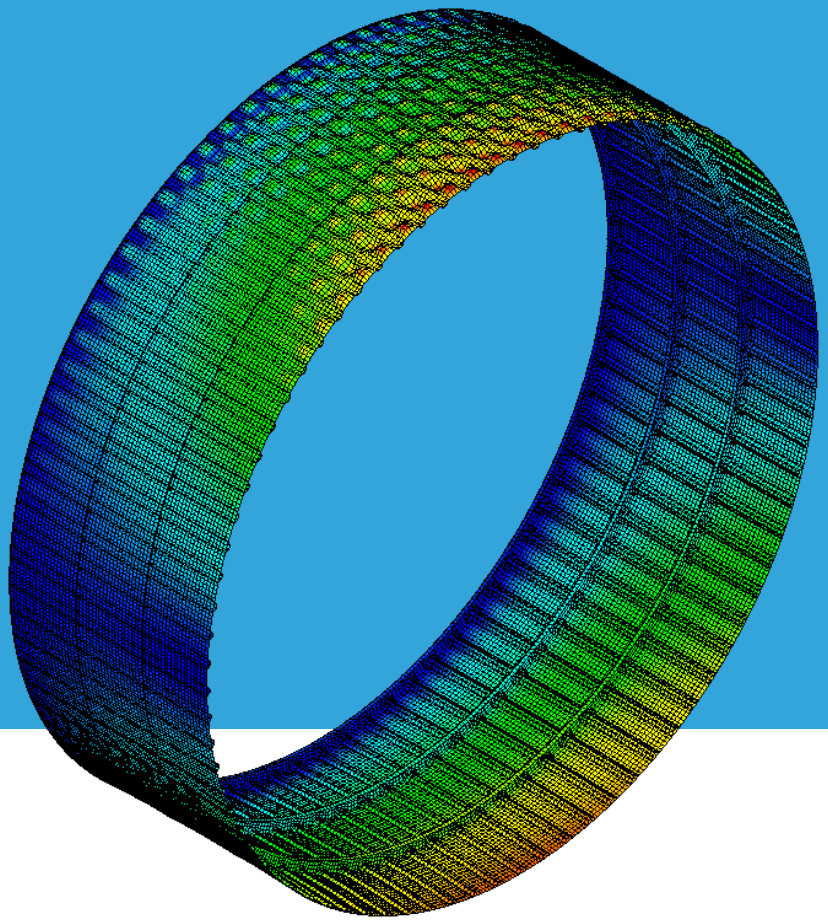
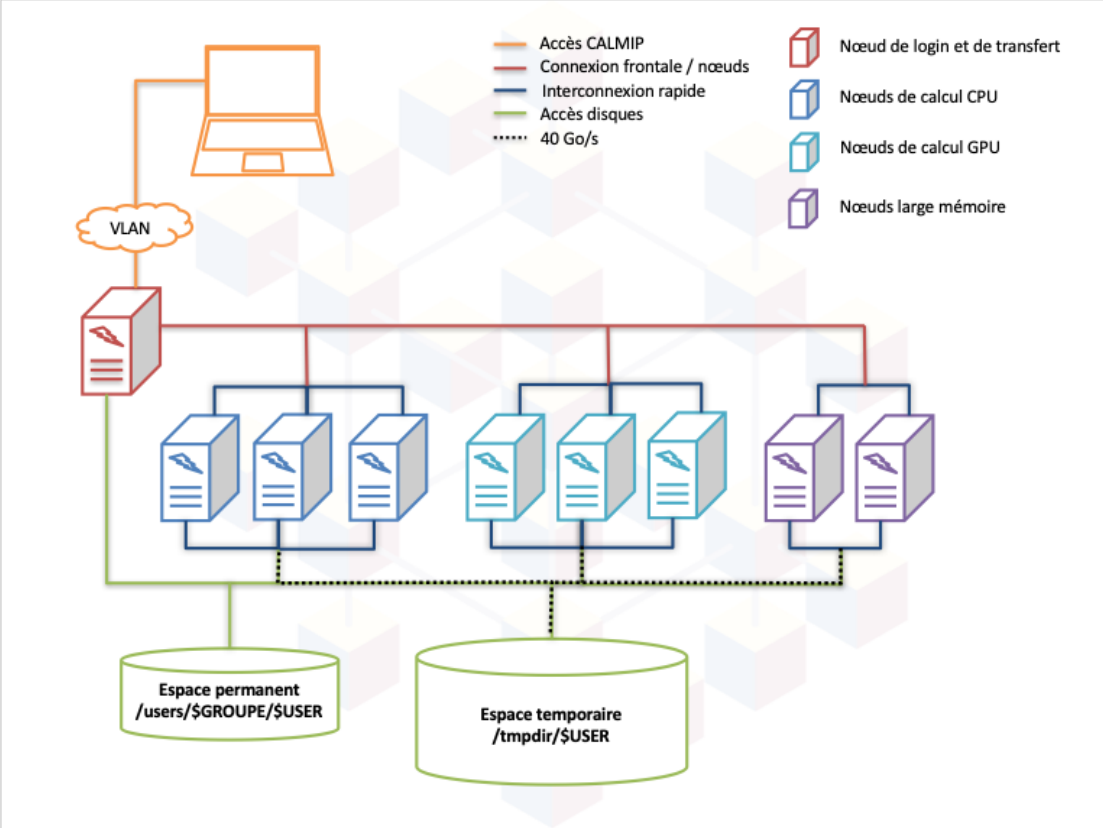


PLATEFORME DE CALCUL INTENSIF : KIT TECHNIQUE

CALMIP (UAR 3667)
Espace Clément Ader
www.calmip.univ-toulouse.fr

PRÉSENTATION : SCHÉMA DU SYSTÈME DE CALCUL



- Page web associée

Frontales de connexion :

- 3 x (36-cores,192 GB RAM)

Cluster distribué Sequana (Atos-Bull) :

- 12 960 cores - 360 nodes
- Intel® Skylake 2,3 Ghz 2x18-cores
- 192 GB RAM / nœud
- Interconnection : Infiniband EDR

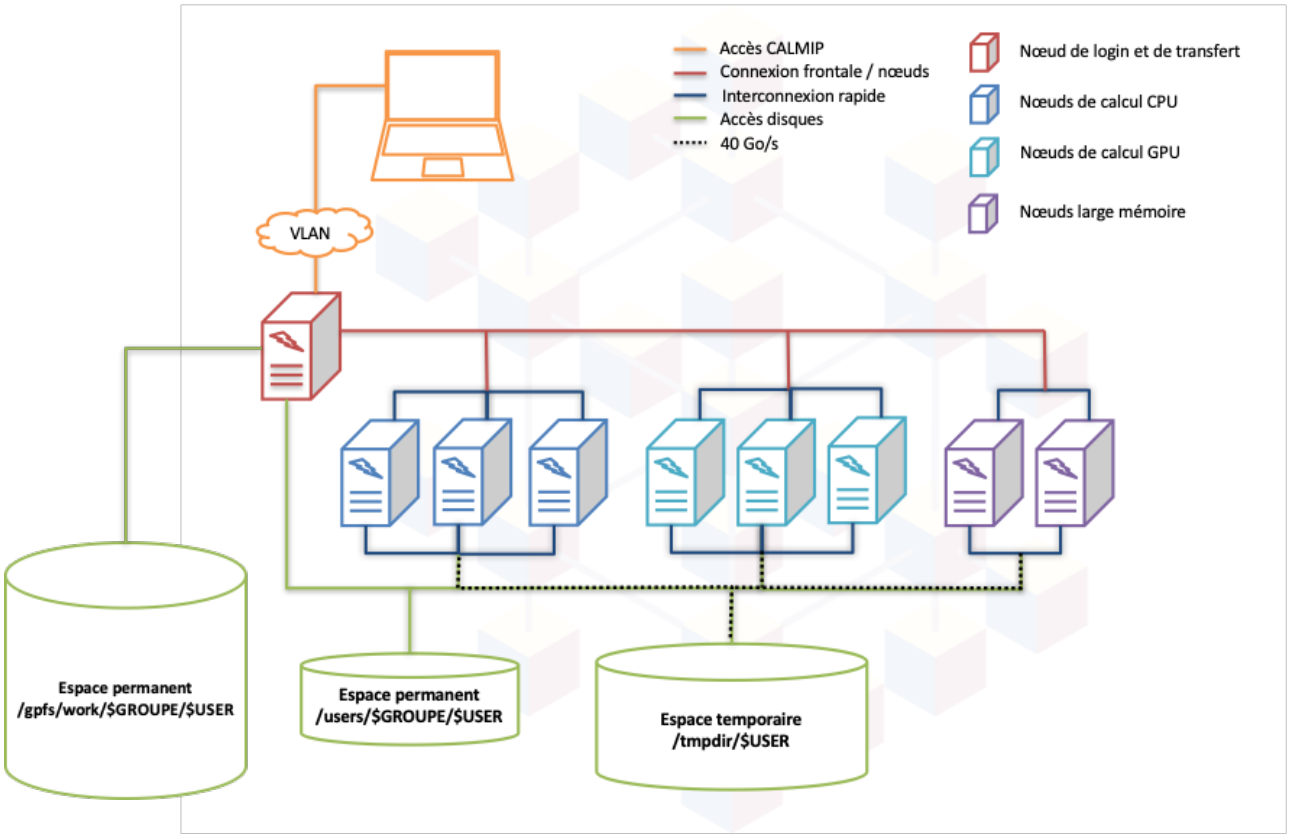
Noeuds GPU :

- Intel® Skylake 2,3 Ghz 2x18-cores
- 12 nœuds (4 GPU, 384 GB RAM)
- Cartes GPU Nvidia Volta (V100)

Nœuds large mémoire :

- Intel® Skylake 2,3 Ghz 2x18-cores
- 1,5 TB RAM / noeud

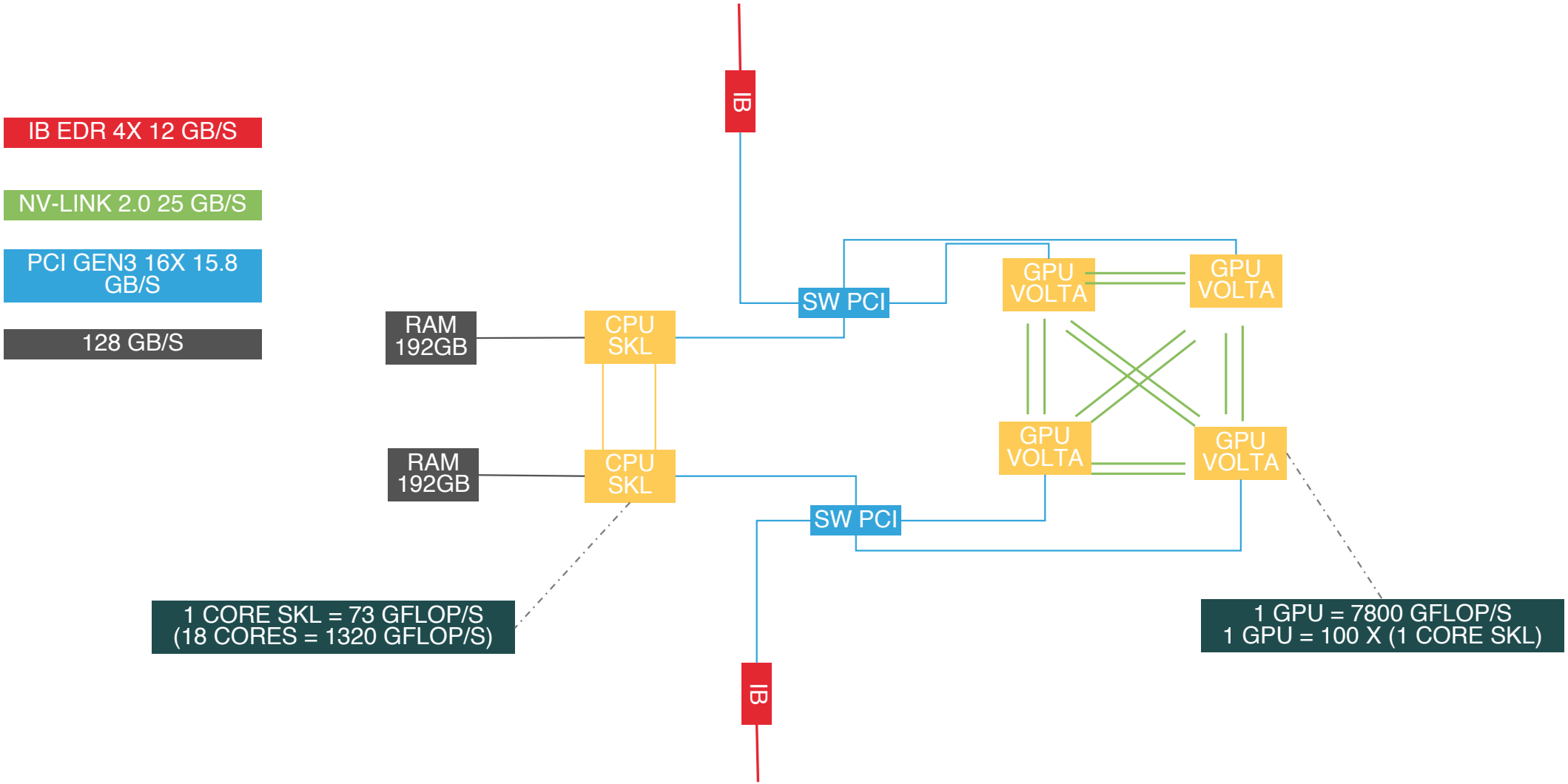
PRÉSENTATION : ESPACES FICHIERS



- Page web associée

- Espace permanent (NFS) :
  - 5 Go par utilisateur
  - sauvegardes quotidiennes
- Espace temporaire (Lustre) :
  - 1,5 Po partagés par tous les utilisateurs
  - effacement des fichiers non accédés après 100 jours
- Stockage sécurisé ATLAS (GPFS) :
  - 3 Po partagés par tous les utilisateurs
  - dédié au stockage de données massives (sur demande)

OLYMPE : NŒUDS GPU « VOLTA »



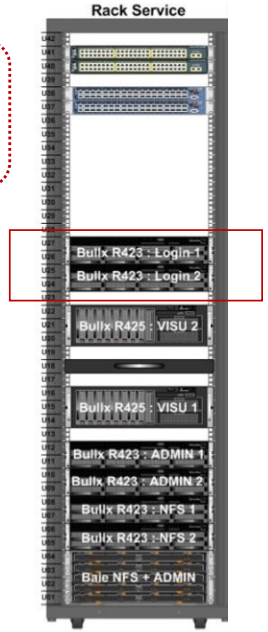
PRISE EN MAIN D'OLYMPE : LA FRONTALE DE CONNEXION

- Connexion « Secure Shell » (ssh)
  - À partir d'un poste Linux / macOS

    ssh -X {login}@olympe.calmip.univ-toulouse.fr
  - À partir d'un poste Windows

    Client ssh avec serveur X (Putty/Xming, MobaXterm)

Frontales de connexion :
- 3 x (36-cores,192 GB RAM)

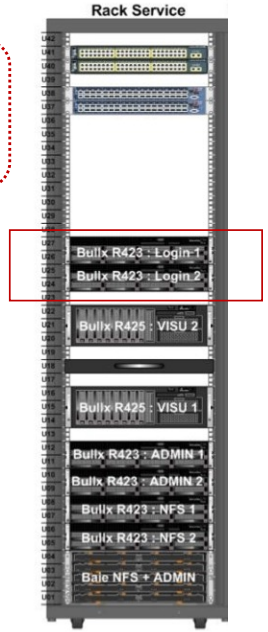


- Page web associée

PRISE EN MAIN D'OLYMPE : LA FRONTALE DE CONNEXION

- Ce que l'on peut faire sur une frontale
  - compiler, installer un code
  - transférer des fichiers
  - effectuer des (petits) test, debugger
- Ce que l'on ne peut PAS faire sur une frontale
  - faire des calculs
  - ➢ mode batch obligatoire

Frontales de connexion :
- 3 x (36-cores,192 GB RAM)



- Page web associée

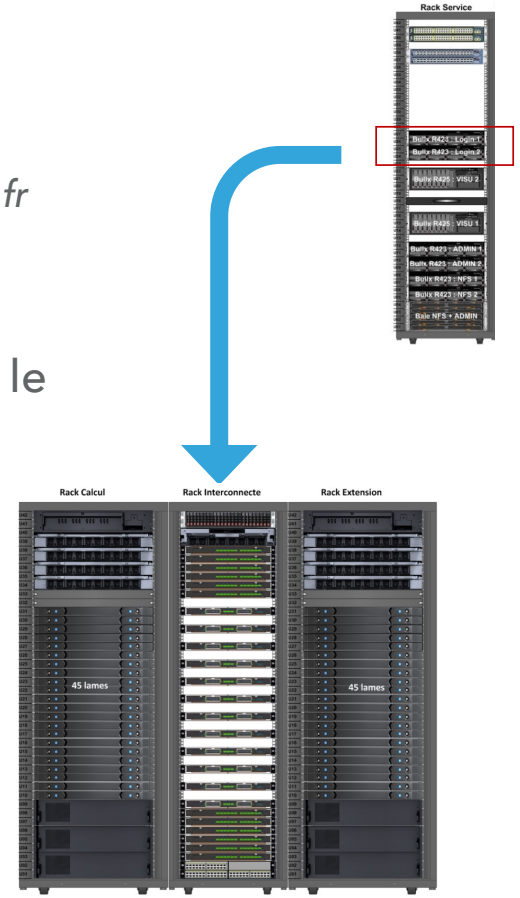
LANCEMENT DES CALCULS : PRINCIPES

- Connexion sur la frontale

  ssh -X {login}@olympe.calmip.univ-toulouse.fr

- Lancement des calculs en différé avec le gestionnaire de batch (SLURM)

  sbatch mon_job



Frontales de connexion :

- 3 x (36-cores,192 GB RAM)

- Atos-Bull Sequana (13 464 cores - 374 nodes)
- Processeurs Intel® Skylake 2,3 Ghz 2x18-cores
- 12 x 4 GPU Nvidia Volta V100
- 192-384 GB RAM / nœud
- Interconnection : Infiniband EDR

LANCEMENT DES CALCULS : COMMANDES SLURM

- Lancer un calcul

  sbatch mon_job

- Arrêter un calcul

  scancel $SLURM_JOBID

- Afficher les informations sur le calcul

  scontrol show jobid=$SLURM_JOBID

- Afficher la liste des calculs

  squeue -u $USER

 - Page web associée

LANCEMENT DES CALCULS : SCRIPT BATCH

```
#!/bin/bash
#SBATCH –job-name=script_BATCH
#SBATCH –nodes=2
#SBATCH –ntasks=72
#SBATCH –ntasks-per-node=36
#SBATCH –ntasks-per-core=1
#SBATCH –time=0-01:00:00
#SBATCH –mail-user=toto@mail.com

dirname=$SLURM_JOBID
mkdir /tmpdir/$USER/$dirname
cp mes_inputs  /tmpdir/$USER/$dirname
cd /tmpdir/$USER/$dirname

module purge
module load module1 module2
module list

./mon_appli.exe  > output_$SLURM_JOBID}.log

mv mes_outputs $SLURM_SUBMIT_DIR
```

en-tête du script : balises SLURM

balises spécifiques à la réservation des ressources

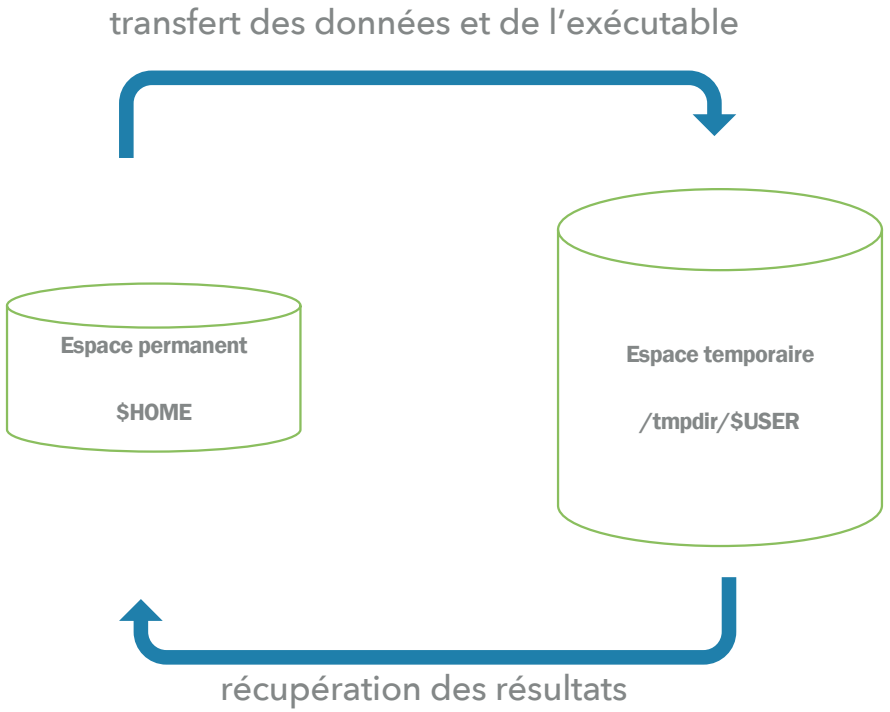
- nombre de nœuds, de tâches, temps maximum …

- Page web associée

LANCEMENT DES CALCULS : SCRIPT BATCH

```
#!/bin/bash
#SBATCH –job-name=script_BATCH
#SBATCH –nodes=2
#SBATCH –ntasks=72
#SBATCH –ntasks-per-node=36
#SBATCH –ntasks-per-core=1
#SBATCH –time=0-01:00:00
#SBATCH –mail-user=toto@mail.com

dirname=$SLURM_JOBID
mkdir /tmpdir/$USER/$dirname
cp mes_inputs  /tmpdir/$USER/$dirname
cd /tmpdir/$USER/$dirname

module purge
module load module1 module2
module list

./mon_appli.exe  > output_$SLURM_JOBID}.log

mv mes_outputs $SLURM_SUBMIT_DIR
```

- Page web associée



LANCEMENT DES CALCULS : SCRIPT BATCH

```
#!/bin/bash
#SBATCH –job-name=script_batch
#SBATCH –nodes=2
#SBATCH –ntasks=72
#SBATCH –ntasks-per-node=36
#SBATCH –ntasks-per-core=1
#SBATCH –time=0-01:00:00
#SBATCH –mail-user=toto@mail.com

dirname=$SLURM_JOBID
mkdir /tmpdir/$USER/$dirname
cp mes_inputs  /tmpdir/$USER/$dirname
cd /tmpdir/$USER/$dirname

module purge
module load module1 module2
module list

./mon_appli.exe  > output_$SLURM_JOBID}.log

mv mes_outputs $SLURM_SUBMIT_DIR
```

chargement des modules requis

- Page web associée

LANCEMENT DES CALCULS : RESERVATION DES RESSOURCES

- Réservation de plus de 18 tâches : nœud entier alloué

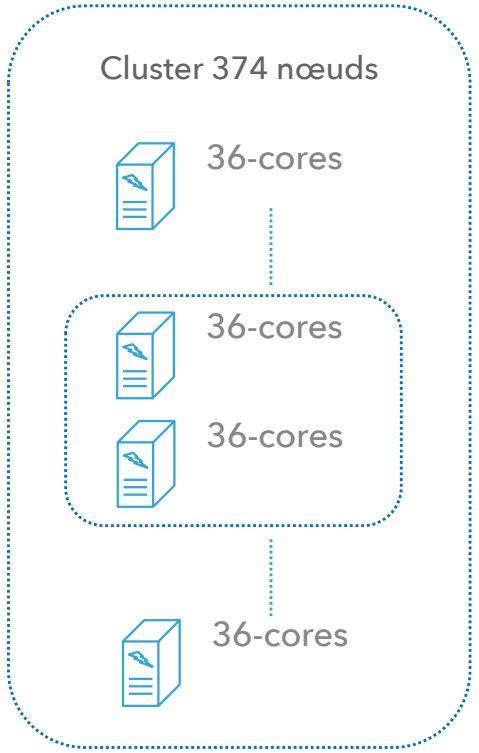
```
#SBATCH –nodes=1
#SBATCH —ntasks=36
#SBATCH –ntasks-per-node=36
```

```
#SBATCH –nodes=2
#SBATCH –ntasks=72
#SBATCH –ntasks-per-node=36
```

- Réservation de moins de 18 tâches : spécifier la mémoire requise

```
#SBATCH –nodes=1
#SBATCH –ntasks=5
#SBATCH –ntasks-per-node=5
#SBATCH –mem=10000
```

- Page web associée



- Principe général : on réserve un certain nombre de noeuds

LANCEMENT DES CALCULS : RESERVATION GPU

- Réservation GPU partagée

```
#!/bin/bash
#SBATCH –nodes=1
#SBATCH –ntasks=9
#SBATCH –ntasks-per-node=9
#SBATCH –ntasks-per-core=1
#SBATCH –gres=gpu:1
#SBATCH –mem=20000
#SBATCH –time=01:00:00

module load cuda/9.1.85.3
```

- Réservation jusqu'à 2 GPU
- Réservation jusqu'à 18 coeurs CPU
- Réservation mémoire jusqu'à 192 Go

- Réservation GPU exclusive

```
#!/bin/bash
#SBATCH –nodes=2
#SBATCH –ntasks=72
#SBATCH –ntasks-per-node=36
#SBATCH –ntasks-per-core=1
#SBATCH –gres=gpu:4
#SBATCH –time=01:00:00

module load cuda/9.1.85.3
```

- Réservation jusqu'à 44 GPU
- Réservation jusqu'à 396 coeurs CPU
- Réservation mémoire jusqu'à 377 Go/noeud

- Page web associée

LANCEMENT DES CALCULS : FILES D'ATTENTE

File d'attente	Nombre de cœurs	Nombre de nœuds	Nombre de GPU	Walltime	jobs/user	RAM	Partition
mono	< 18	1	0	400 h	3 max	96 Go max	shared
nœud	36	1	0	250 h	2 max	192 Go	exclusive
nœud5	72 - 180	2 - 5	0	150 h	2 max	187 Go / nœud	exclusive
noeud10	216 - 360	6 - 10	0	110 h	2 max	187 Go / nœud	exclusive
noeud20	396 - 720	11 - 20	0	75 h	1 max	187 Go / nœud	exclusive
noeud40	756 - 1440	21 - 40	0	36 h	1 max	187 Go / nœud	exclusive
noeud50	1476 - 1800	41 - 50	0	24 h	1 max	187 Go / nœud	exclusive
visu	1 - 36	1	0	4 h	1 max	192 Go max	visu
mesca	1 - 18	1	0	100 h	1 max	750 Go max	mesca
voltam	1 - 18	1	1 - 2	100 h	1 max	192 Go max	volta
volta	18 - 396	1 - 11	1 - 44	100 h	1 max	377 Go max / noeud	volta

 - Page web associée

LANCEMENT DES CALCULS : ACCOUNTING

- Pour un calcul de moins de 18 tâches (nœud partagé) :

  *(nombre de CPUS réservés) * (temps de réservation effectivement utilisé)*

- Pour un calcul de plus de 18 tâches (nœuds alloués exclusivement) :

  *(nombre de nœuds réservés) * (36 CPUS) * (temps de réservation effectivement utilisé)*

- Pour connaître sa consommation :

  maconso

- Pour connaître la consommation de chacun des collaborateurs du projet :

  maconso_detail

 - Page web associée

ENVIRONNEMENT DE CALCUL : LES MODULES

- Environnement par défaut :

```
[user@olympelogin1 ~]$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
  1) intel/18.2      2) intelmpi/18.2


[user@olympelogin1 ~]$ ifort -V
Intel(R) Fortran Intel(R) 64 Compiler for applications running on Intel(R) 64, Version 18.0.2.199
Build 20180210
Copyright (C) 1985-2018 Intel Corporation.  All rights reserved.
```

- Modules disponibles :

```
[user@olympelogin1 ~]$ module available
------------------------------------------------------------------------------ /usr/share/Modules/modulefiles ------------------------------------------------------------------------------
openmpi/gnu/mt/ilp64/2.0.2.10 openmpi/icc/mt/ilp64/2.0.2.10
openmpi/gnu/2.0.2.10          openmpi/icc/2.0.2.10          use.own
openmpi/gnu/ilp64/2.0.2.10    openmpi/icc/ilp64/2.0.2.10
openmpi/gnu/mt/2.0.2.10       openmpi/icc/mt/2.0.2.10

------------------------------------------------------------ /usr/local/modules/modulefiles/compilers_and_libraries -------------------------------------------------------------
cuda/8.0.61.2    gcc/7.3.0        intel/16.4       intelmpi/13.2    intelmpi/17.1    pgi/18.3
cuda/9.0.176.2   intel/09.1       intel/17.1       intelmpi/14.0    intelmpi/18.2    tcltk/8.6.3
cuda/9.1.85.3    intel/12.1.5     intel/18.2       intelmpi/15.0    petsc/3.7.4/impi
gcc/5.4.0        intel/14.0       intel/18.2.199   intelmpi/16.4    petsc/3.7.4/ompi

---------------------------------------------------------- /usr/local/modules/modulefiles/scientific_applications ----------------------------------------------------------
amber/amber16          geos-gdal/2.3.1        namd/2.12              pnetcdf/1.9.0-intelmpi relion/2.1-dp
amber/amber16-ompi     gpaw/1.4.0             namd/2.12-gpu          pnetcdf/1.9.0-openmpi  relion/2.1-sp
cpmd/3.17              gromacs/2018.3-ompi    netcdf/4.6.1           python/2.7.14
dalton/2016.2          hdf5/1.10.2-intelmpi   octave/4.0.0           python/3.6.3
gabedit/2.5.0          hdf5/1.10.2-openmpi    octopus/8.0            quantume/6.2
gamess/18              hdf5/1.10.2-seq        openfoam/v1706-impi    R/3.5.0

------------------------------------------------------------------ /usr/local/modules/modulefiles/tools ------------------------------------------------------------------
allinea/18.2                    git/2.9.5                       profilers/mpiprof-openmpi/1.0.1
automake/1.15                   ncl/6.4.0                       swig-python-2.7.14
chdb/1.0                        nco/4.7.5                       swig-python-3.6.3
```

- Page web associée

ENVIRONNEMENT DE CALCUL : LES MODULES

- Opérations supplémentaires sur les modules
  - Charger un module

    module load new_module
  - Décharger un module

    module unload old_module
  - Décharger tous les modules

    module purge
  - Echanger un module

    module switch old_module new_module
  - Décharger un module

    module unload old_module
  - Visualiser l'effet d'un module sur les variables d'environnement

    module display new_module

 - Page web associée

ENVIRONNEMENT DE CALCUL : LES LIBRAIRIES SCIENTIFIQUES

- Intel® Math Kernel Library (MKL) : BLAS, LAPACK, ScaLAPACK …
  - Les modules Intel intègrent la MKL

```
[user@olympelogin1 ~]$ module show intel/18.2
prepend-path    INCLUDE      /usr/local/intel/2018.2.046/mkl/include
```

  - Linker BLAS-LAPACK avec le compilateur Intel

ifort mon_prog.f90 -mkl=sequential

ifort mon_prog.f90 -mkl=parallel

  - Linker ScaLAPACK avec le compilateur Intel et IntelMPI

mpiifort mon_prog.f90 -mkl=cluster

 - Page web associée

ENVIRONNEMENT DE CALCUL : LES BIBLIOTHÈQUES ET LOGICIELS

- Bibliothèques scientifiques
  - FFTW, HDF5, MUMPS, NetCFD, PETSc …
- Logiciels scientifiques
  - Python, R, OpenFOAM, Gaussian, VASP, Quantum Espresso …
- Logiciels de visualisation
  - Paraview, Salome, Gaussview, Jmol …

- Page web associée

ENVIRONNEMENT DE CALCUL : LANCER UN CODE MPI

- Parallélisme en mémoire distribué (avec IntelMPI) :

```
#!/bin/bash
#SBATCH –job-name=script_batch
#SBATCH –nodes=2
#SBATCH –ntasks=72
#SBATCH –ntasks-per-node=36
#SBATCH –time=0-01:00:00
#SBATCH –mail-user=toto@mail.com

module load intelmpi/18.2


srun ./mon_appli.exe
```

- application multi-nœud / multi-processus
- spécification du nombre de tâches MPI

chargement du module Intel MPI (d'autres implémentation MPI sont disponibles)

- Page web associée

ENVIRONNEMENT DE CALCUL : LANCER UN CODE OPENMP

- Parallélisme en mémoire partagée (multithreading) :

```
#!/bin/bash
#SBATCH –job-name=script_batch
#SBATCH –nodes=1
#SBATCH –ntasks=1
#SBATCH –cpus-per-task=36
#SBATCH –time=0-01:00:00
#SBATCH –mail-user=toto@mail.com

export OMP_NUM_THREADS=36
export OMP_PROC_BIND=true

# Si utilisation de la MKL
export MKL_NUM_THREADS=$OMP_NUM_THREADS

srun ./mon_appli.exe
```

- application mono-nœud / mono-processus
- spécification du nombre de cores dédiés au processus

variable OpenMP spécification le nombre de threads

- Page web associée

POUR ALLER PLUS LOIN

- Améliorer les performances
  - Compiler, Debugger, Mesurer, Vectoriser …

 - Page web associée

- Une simulation en vidéo
  - Exemple complet de simulation sur CALMIP

 - Page web associée

Université Fédérale Toulouse Midi-Pyrénées

cnrs

INP TOULOUSE

INSA INSTITUT NATIONAL DES SCIENCES APPLIQUÉES TOULOUSE

isae SUPAERO

UNIVERSITÉ TOULOUSE III PAUL SABATIER