

Cluster THOR

Accéder au cluster MPI (THOR)

Pour vous connecter au cluster MPI thor, vous devez avoir un login/passe que vous pouvez obtenir à l'adresse : <https://forge.univ-poitiers.fr/projects/polehpc-git>

Pour vous connecter

```
ssh      ssh [user]@thor.univ-poitiers.fr -p86
sftp     sftp -P [user]@thor.univ-poitiers.fr
scp      scp -p86 /home/[user] [user]@thor.univ-poitiers.fr:/
```

Architecture

La machine de calcul Thor est un cluster MPI SGI ICE-X de 2300 coeurs. Il est composé de 115 lames de calcul bi-socket Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2680 v2 @ 2.80GHz (20 coeurs par lames) avec 32 Go de mémoire par socket soit 1.6 Go par socket. Chaque lame est raccordée à un réseau Infiniband hypercube enhanced FDR à 56 Gbit/s. Le stockage des données de calcul est basé sur un système de fichier parallèle Lustre 2.5 via le réseau Infiniband. Il offre une capacité de 56 To pour le répertoire /scratch et de 21 To pour le répertoire /home.

Gérer ses calculs

Les simulations sont soumises à la machine par un script.

Exemple de script

```
#PBS -q default
#PBS -l select=16:ncpus=20:mpiproc=20
#PBS -N NomDuJob
```

```
module load mpt
NCPUS='wc -l $PBS_NODEFILE'
mpiexec_mpt -np $NCPUS ./moncode
```

Entêtes d'un script PBS

| | |
|---------|-------------------------------------|
| #PBS -l | Ressources demandées (cf rubrique). |
| #PBS -N | Nom du job. |
| #PBS -o | Stdout du job. |
| #PBS -e | Stderr du job. |
| #PBS -q | File de destination. |
| #PBS -M | Adresse mail pour suivi du job. |
| #PBS -J | Tableau de jobs. |

Demander des ressources avec PBS

| | |
|-------------------|--------------------------------|
| select=xx | Nb de noeuds. |
| ncpus=xx | Nb de processeurs par noeuds. |
| mpiprocs=xx | Nb de process MPI. |
| walltime=hh:mm:ss | Walltime demandé. |
| mem=xx | Mémoire demandée (b,kb,mb,gb). |
| place=xx | scatter / excl. |

Exemple 1: Je demande 180 coeurs pour un calcul MPI.

```
-l select=9:ncpus=20:mpiprocs=20
```

Exemple 2: Je demande 200 coeurs pour un calcul MPI nécessitant 3 Go par coeur.

```
-l select=20:ncpus=10:mpiprocs=10
```

Variables d'environnement PBS

Toutes les variables d'environnement PBS, présentées ci-dessous, peuvent être utilisées dans vos scripts pour lancer vos simulations:

| | |
|---------------|--|
| PBS_JOBID | Id du job en cours. |
| PBS_JOBNAME | Nom du job. |
| PBS_NODEFILE | Fichier contenant la liste des noeuds. |
| PBS_QUEUE | File de soumission du job. |
| PBS_O_HOME | \$HOME copiée par qsub. |
| PBS_O_LANG | \$LANG copiée par qsub. |
| PBS_O_LOGNAME | \$LOGNAME copiée par qsub. |
| PBS_O_PATH | \$PATH copiée par qsub. |
| PBS_O_MAIL | \$MAIL copiée par qsub. |
| PBS_O_SHELL | \$SHELL copiée par qsub. |
| PBS_O_TZ | \$TZ copiée par qsub. |
| PBS_O_HOST | Hostname où qsub a été exécuté. |
| PBS_O_QUEUE | File de soumission utilisée par le job. |
| PBS_O_WORKDIR | Répertoire à partir duquel qsub est exécuté. |

Principales commandes

| | |
|---------------------------|---|
| qsub script.pbs | Lancer un script. |
| qsub -I | Lancer un job interactif. |
| qdel -p JOBID | Supprimer le job ID. |
| qstat -a | Lister tous les jobs en cours. |
| qstat -f JOBID | Affiche tous les détails du JOBID. |
| qstat -u [user] | Lister ses jobs en cours. |
| qstat -q | Afficher les files de soumission. |
| qstat -T | Affiche une estimation du démarrage du job. |
| qstat -x -u [user] | Affiche l'historique des jobs pour user. |
| tracejob -n NBJOURS JOBID | Affiche les états du job JOBID en cherchant depuis NBJOURS. |

Modules

Les modules permettent de charger simplement un code, un compilateur, une librairie.

| | |
|---------------------|---------------------------------|
| module avail | Lister les modules disponibles. |
| module load [MOD] | Charger un code. |
| module unload [MOD] | Décharger un code. |
| module list | Lister les modules chargés. |

Exemple: Je veux compiler un code avec Intel Studio et la librairie OpenMPI.

```
module load intel-compilers-14/14.0.2.144
module load openmpi/1.8.3
```

Stockage

Commandes principales

| | |
|-----|--|
| ldf | Afficher son quota sur les répertoires /home & /scratch. |
|-----|--|

Support

Pour toutes demandes d'aide ou de support, envoyez un mail à l'adresse: hpc@support.univ-poitiers.fr

Mésocentre SPIN.
<https://forge.univ-poitiers.fr/pole-hpc-git>