



CentraleSupélec

Comment interagir avec le Mesocentre ?

(CE N'EST PAS LA VERSION FINALE)

HENRI DURLIAT ET DIMITRI GLADKOV

Table des matières

I	Introduction	2
II	Installer Bash sous Windows	2
II.1	Première méthode	2
II.2	Deuxième méthode	3
III	Connexion au Mesocentre	4
IV	Lancer des calculs dans le Mesocentre	4
V	Les fichiers PBS	6
VI	Récupérer les résultats du Mésocentre	8
VII	Quelques commandes utiles	9

I Introduction

Ce document a été rédigé à l'occasion de notre projet long de deuxième année. Ce dernier a été réalisé sous la direction de Jean Michel Gillet et porte sur la reconstruction de matrices densité à partir d'expériences de diffraction. Pour cela, il nous a fallu utiliser le logiciel Crystal qui permet de résoudre l'équation de Schrödinger dans un milieu périodique (nous nous sommes intéressés à des cristaux moléculaires). Nous ne pouvions pas lancer les calculs directement sur nos ordinateurs et il nous a fallu faire appel à des machines plus puissantes d'où l'utilisation du Mesocentre. Ce qui suit est donc orienté pour une utilisation de Crystal sous le Mesocentre. Le lecteur pourra s'en inspirer pour l'utilisation d'autres logiciels et pourra également se référer au site du Mesocentre (<http://mesocentre.centralesupelec.fr/>) pour plus d'informations. Ce document, loin d'être complet, vise à simplifier l'utilisation du Mesocentre pour des novices qui ne cherchent pas à en acquérir une maîtrise fine.

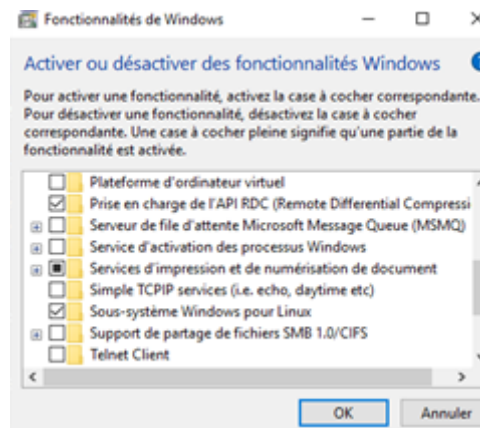
II Installer Bash sous Windows

La communication entre son ordinateur et le Mesocentre s'effectue en ssh par l'intermédiaire de son invite de commande. Les macs possèdent par défaut un terminal mais sur Windows il faut installer une invite de commande comme par exemple BASH. Pour cela il existe plusieurs façons de faire.

II.1 Première méthode

La première n'est possible que si vous disposez de windows 10 64 bits. En fait, windows a intégré des fonctionnalités linux dans windows 10. Il faut les activer ! Commençons par nous placer en mode "développeur". Il faut se rendre dans "paramètre". Pour y accéder il suffit de taper "paramètre" dans la barre de recherche en bas à gauche de l'écran.

Aller dans "mises à jour et sécurité", puis, sur la barre de droite, cliquer sur "espace développeur" et cocher "mode développeur". Un message apparaît et vous demande alors si vous en êtes sûr. Répondre "oui". Après, se rendre dans le panneau de configuration (encore une fois disponible depuis la barre de recherche), puis dans le menu Programmes => Programmes et fonctionnalités. Dans la barre de gauche, cliquer sur "Activer ou désactiver des fonctionnalités Windows". Dans la liste de fichier qui apparaît alors, sélectionner "Sous-système Windows pour Linux".



Redémarrer le PC. Ça devrait être bon.

II.2 Deuxième méthode

Pour la deuxième méthode, il est possible d'installer le logiciel UBUNTU (et non pas l'OS !). Pour cela, se rendre dans le windows store et chercher "Ubuntu" et installer le logiciel Ubuntu 18.4 LTS. On a donc accès à un terminal. Il vous demande alors de vous créer un identifiant et un mot de passe. Gardez-les en tête ! Après installation, il peut être utile de télécharger les dernières mises à jour des commandes UNIX. On utilise la commande :

sudo apt update sudo apt full-upgrade -y

Si cela ne marche pas, c'est peut-être que votre antivirus bloque cela. Il faut que vous réussissiez à rendre le port HTTP 80 inactif durant la durée des mises à jour. Si vous utilisez Kaspersky, cliquer sur l'icône Kaspersky. Cliquer sur l'icône paramètre (roue dentée) qui se trouve tout en bas à gauche de la fenêtre. Dans la barre de gauche, cliquer sur "Avancé" puis, sur "Réseau". Dans la partie "Ports contrôlés", cliquer sur "sélectionner" et rendez le contrôle du port HTTP 80 inactif (il suffit de sélectionner le port et de cliquer sur modifier). Ensuite, relancer la commande ci-dessus. Cela devrait fonctionner maintenant.

Remarque: la commande est un sudo (super user), le mot de passe que vous avez renseigné lors de l'installation de Ubuntu vous sera demandé. Si vous le souhaitez, vous pouvez, après installation des mises à jour, rendre le port HTTP 80 de nouveau actif.

III Connexion au Mesocentre

Une fois en possession d'une invite de commande, on peut se connecter au Mesocentre en ssh. Pour cela, il faut rentrer la commande suivante :

ssh nomutilisateur

Qui utilise votre identifiant de la forme (exemple pour Dimitri Gladkov) :

gladkovd@fusion.centralesupelec.fr

(= nomdefamille+premièrelettre duprenom@fusion.centralesupelec.fr)

Il faut ensuite renseigner son mot de passe. Lors de la première utilisation, utiliser le mot de passe envoyé par mail par fusion CentraleSupélec. Il vous est demandé directement après d'en choisir un nouveau et de le confirmer.

IV Lancer des calculs dans le Mesocentre

Il faut ensuite se placer dans son espace de travail en utilisant la commande :

cd \$WORKDIR

Le dossier est normalement vide à la première utilisation. On peut le vérifier en utilisant la commande :

ls (en rajoutant ' -lrt', les fichiers sont triés du moins récent au plus récent)

Pour effectuer nos calculs dans le Mesocentre, il faut tout d'abord créer un projet :

mkdir nomduprojet

Remarque : la commande **pwd** permet d'obtenir le chemin d'accès où l'on se trouve dans le Mesocentre.

Il s'agit ensuite d'importer les fichiers qui vont nous permettre de faire les calculs (qui se trouvent sur l'ordinateur de l'utilisateur). Il faut pour cela ouvrir une deuxième console et aller dans le répertoire où se trouvent les fichiers qui nous intéressent (en utilisant la commande **cd**). Ensuite, il faut rentrer la commande :

rsync -avz nomdufichier+identifiant:/chemindanslemesocentre

Exemple : **rsync -avz PROP_pbs.sh gladkovd@fusion.centralesupelec.fr:/workdir/gladkovd/crystal**

Où **crystal** est le nom du projet.

Remarque : on peut mettre plusieurs fichiers les uns à la suite des autres.

Après avoir utilisé cette commande, il vous est demandé de rentrer votre mot de passe.
Une fois les fichiers d'input pour les calculs importés dans le Mésocentre, on peut utiliser la commande :

emacs nomdufichier

Qui permet de lire le fichier (en supposant que l'on s'est placé dans le bon répertoire).
Pour enregistrer les modifications apportées au fichier il faut utiliser la commande :

ctrl x ctrl s (ctrl étant la touche du clavier)

Et pour sortir du fichier :

ctrl x ctrl c

Pour lancer les calculs contenus dans un fichier, il faut rentrer la commande :

qsub nomdufichier

Pour suivre l'avancement des calculs, on peut utiliser la commande :

qstat -u \$USER

Qui permet de voir les calculs du compte de l'utilisateur qui sont en train de tourner.
Pour récupérer les résultats des calculs, on applique la commande **ls -lrt** et on choisit le fichier dont le nom est de la forme :

nomdufichier.o+numérocalcul

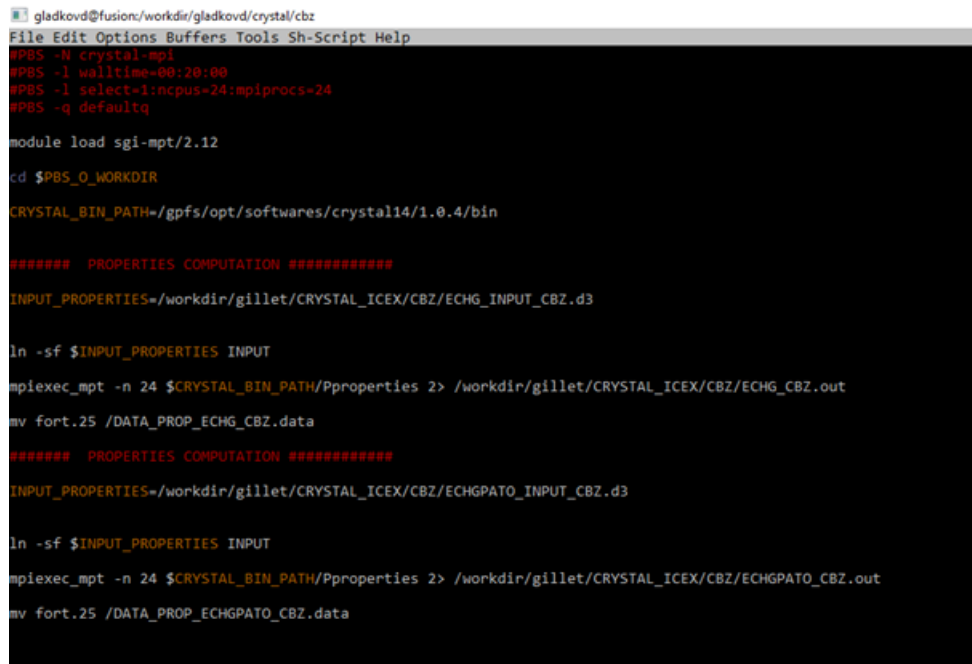
Exemple : **SCF.o2128846**

Remarque : un calcul va générer un fichier d'output mais également un fichier d'erreur et l'objectif est évidemment que celui-ci soit de taille nulle.

V Les fichiers PBS

Les fichiers utilisés pour faire des calculs dans le Mésocentre ne sont pas quelconques mais sont au format PBS.

Exemple de fichier PBS :



```
gladkovd@fusion:/workdir/gladkovd/crystal/cbz
File Edit Options Buffers Tools Sh-Script Help
#PBS -N crystal-mpi
#PBS -l walltime=00:20:00
#PBS -l select=1:ncpus=24:mpiprocs=24
#PBS -q defaultq

module load sgi-mpt/2.12

cd $PBS_O_WORKDIR

CRYSTAL_BIN_PATH=/gpfs/opt/software/crystal14/1.0.4/bin

##### PROPERTIES COMPUTATION #####
INPUT_PROPERTIES=/workdir/gillet/CRYSTAL_ICEX/CBZ/ECHG_INPUT_CBZ.d3

ln -sf $INPUT_PROPERTIES INPUT

mpiexec_mpt -n 24 $CRYSTAL_BIN_PATH/Pproperties 2> /workdir/gillet/CRYSTAL_ICEX/CBZ/ECHG_CBZ.out

mv fort.25 /DATA_PROP_ECHG_CBZ.data

##### PROPERTIES COMPUTATION #####
INPUT_PROPERTIES=/workdir/gillet/CRYSTAL_ICEX/CBZ/ECHGPATO_INPUT_CBZ.d3

ln -sf $INPUT_PROPERTIES INPUT

mpiexec_mpt -n 24 $CRYSTAL_BIN_PATH/Pproperties 2> /workdir/gillet/CRYSTAL_ICEX/CBZ/ECHGPATO_CBZ.out

mv fort.25 /DATA_PROP_ECHGPATO_CBZ.data
```

Remarque : sous Windows des ”^M” apparaissent à la fin des lignes. Un tel fichier est inexploitable. Pour résoudre ce problème, il faut rentrer la commande suivante (avant le **qsub**) dans l’invite de commande :

dos2unix nomdufichierpbs

Nous allons expliquer comment nous avons procédé pour modifier le PBS précédent (qui nous avait été donné tel quel) pour aboutir à un fichier spécifique à l’utilisation du lecteur. Ce PBS contient toutes les informations utiles au calcul : temps de calcul, nombre de processeurs, nom du logiciel... C’est lui qui sera soumis au serveur avec la commande **qsub**.

Les lignes **PBS** donnent plusieurs informations :

- **PBS -N** indique le nom que l'on souhaite donner au fichier de sortie (celui qui sera suivi de .o ou .e).
- **PBS -l walltime** donne des informations sur la durée du calcul que l'on souhaite mener. Si on ne sait pas prévoir sa durée, on y va à tâtons.
- **PBS -l select=...** donne le nombre de processeurs que l'on souhaite utiliser.
- **PBS -q defaultq** dit que l'on se place dans la queue par défaut.

Il faut rajouter une dernière ligne à la suite :

- **PBS -P 1rdm** cette ligne sert à indiquer le projet pour lequel on travaille. Ici il s'appelle 1rdm. Ce nom est celui choisi lors de votre inscription au Mésocentre.

Il est possible, par commodité, de rajouter encore une autre ligne :

- **PBS -j oe** qui permet de joindre les fichier output et erreur ensemble.

Maintenant, on peut commencer à lire la suite :

cd \$PBS_O_WORKDIR permet de spécifier que les données sont à chercher soit dans PBS soit dans notre WORKDIR.

CRYSTAL_BIS_PATH indique le chemin d'accès au logiciel Crystal, ainsi que la version du logiciel que nous souhaitons utiliser. On ne touchera donc pas à cette ligne.

Nous entrons alors dans la partie **PROPERTIES COMPUTATION** qui spécifie où trouver les fichiers d'input.

INPUT_PROPERTIES permet d'indiquer le chemin d'accès du fichier à donner en entrée du logiciel. Ici, il se trouve dans le workdir de M. Gillet et dans un fichier CRYSTAL-ICEX que nous n'avons évidemment pas. Il faudra modifier tout cela! On remplace cette ligne par :

INPUT_PROPERTIES =\$WORKDIR/crystal/cbz/ECHG_INPUT_CBZ.d3.

cbz étant le nom de notre projet et **ECHG_INPUT_CBZ.d3** étant le fichier en question.

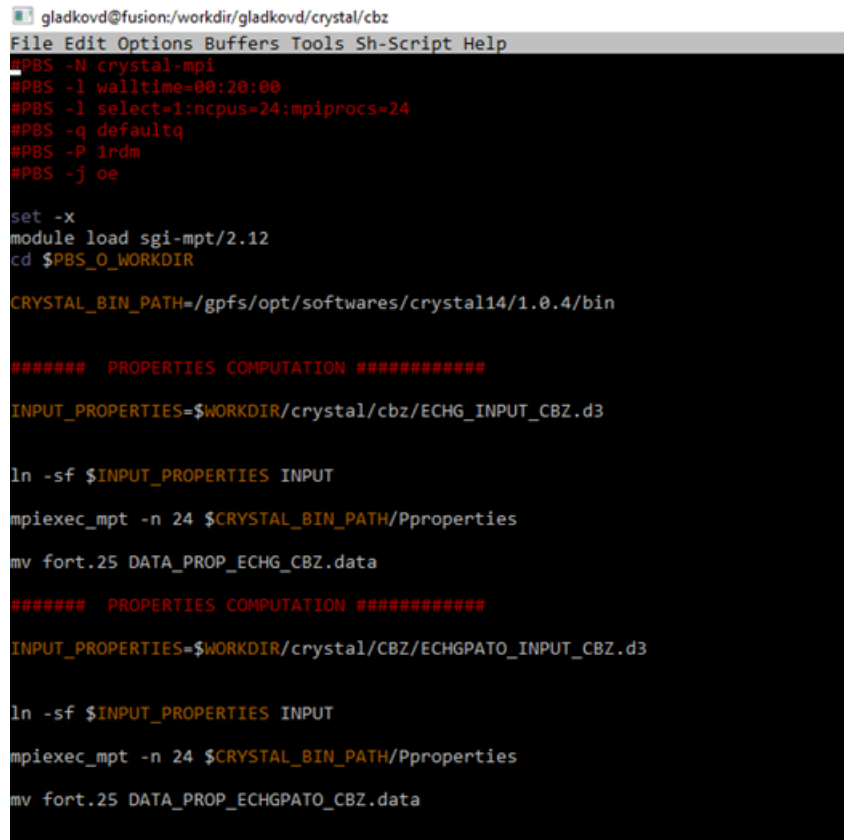
La ligne **ln -sf ...** signifie que l'on souhaite faire un lien (d'où le ln) entre INPUT_PROPERTIES et INPUT. Ainsi, dès que INPUT apparaîtra, il s'agira en fait de INPUT_PROPERTIES.

Ensuite apparaît la ligne:

```
mpirun -n 24 $CRYSTAL_BIN_PATH/Pproperties 2> /workdir/gillet/CRYSTAL_ICEX/CBZ/ECHG_CBZ.out
```


On va supprimer tout ce qu'il y a après `"2> /workdir..."`. Pour cela, placer le curseur au niveau de l'espace entre Properties et 2, puis faire ctrl + k.

Voici, in fine, ce à quoi on devrait s'attendre :



```
gladkovd@fusion:/workdir/gladkovd/crystal/cbz
File Edit Options Buffers Tools Sh-Script Help
#PBS -N crystal-mpi
#PBS -l walltime=00:20:00
#PBS -l select=1:ncpus=24:mpiprocs=24
#PBS -q defaultq
#PBS -P 1rdm
#PBS -j oe

set -x
module load sgi-mpt/2.12
cd $PBS_O_WORKDIR

CRYSTAL_BIN_PATH=/gpfs/opt/software/crystal14/1.0.4/bin

##### PROPERTIES COMPUTATION #####
INPUT_PROPERTIES=$WORKDIR/crystal/cbz/ECHG_INPUT_CBZ.d3

ln -sf $INPUT_PROPERTIES INPUT
mpiexec_mpt -n 24 $CRYSTAL_BIN_PATH/Pproperties
mv fort.25 DATA_PROP_ECHG_CBZ.data

##### PROPERTIES COMPUTATION #####
INPUT_PROPERTIES=$WORKDIR/crystal/CBZ/ECHGPATO_INPUT_CBZ.d3

ln -sf $INPUT_PROPERTIES INPUT
mpiexec_mpt -n 24 $CRYSTAL_BIN_PATH/Pproperties
mv fort.25 DATA_PROP_ECHGPATO_CBZ.data
```

Le fichier PBS ainsi modifié est prêt à être soumis pour le calcul !

Dernière remarque : on a ajouté la ligne `"set -x"` après les lignes de type PBS. Cela permet au shell d'afficher les commandes exécutées dans le terminal dans le fichier de sortie.

VI Récupérer les résultats du Mésocentre

Il faut aller dans le dossier contenant les fichiers de sortie en suivant la procédure détaillée précédemment :

- connexion au Mésocentre
- `cd $WORKDIR`
- `cd crystal` (nom du projet)
- `cd cbz` (nom du fichier avec les inputs, les procédures de calcul et les outputs une fois le calcul effectué)

Pour trouver le fichier correspondant à l'output dans cbz, il faut l'avoir renommé dans le code PBS en rajoutant :

`$WORKDIR/crystal/cbz/SCF_OUTPUT_uree` (SCF_OUTPUT_uree est le nom du fichier de sortie)

À la suite de la ligne :

`mpiexec_mpt -n 10 $CRYSTAL_BIN_PATH/PCrystal 2`

Toujours pareil, on peut consulter le fichier en utilisant la commande `emacs`.

Pour un traitement ultérieur des données de sortie, il peut être intéressant de télécharger le fichier de sortie en local sur son ordinateur. Pour cela, il faut se placer dans l'emplacement où l'on veut copier le fichier (en utilisant des `cd`) et utiliser la commande :

`rsync -avz`
`gladkovd@fusion.centralesupelec.fr:/workdir/gladkovd/crystal/cbz/SCF_OUTPUT_uree`
`.`

Dans cet exemple, on récupère le fichier de sortie `SCF_OUTPUT_uree` de l'utilisateur `gladkovd`.

VII Quelques commandes utiles

On mentionne dans cette partie quelques commandes qui peuvent être utiles pour gérer ses espaces de travail dans le Mesocentre :

- Supprimer un fichier : `rm nomdufichier` (ou chemin du fichier si on n'est pas dans son emplacement)
- Supprimer les fichiers de taille nulle : `find . -type f -size 0c -delete`
- Enlever tous les fichiers du répertoire courant commençant par blablabla (attention à bien mettre l'étoile * accolée à la fin) : `rm -f blablabla*`
- Changer de nom et/ou déplacer fichier par nouveau_nom_de_fichier dans chemin/d/acces : `mv fichier chemin/d/acces/nouveau_nom_de_fichier`