

Manual para usar o HigFlow no cluster Euler

HigFlow e HigTree

18 de novembro de 2022

1 Comandos úteis para se usar no cluster

Comandos das distribuições Linux que ainda continuam válidos no cluster Euler e servem para fazer modificações locais em arquivos no cluster.

- **mkdir nome_do_diretorio** := Cria o diretório <nome_do_diretorio>;
- **cd nome_do_diretorio** := Acessa o diretório <nome_do_diretorio>;
- **cd ..** := Retorna ao diretório anterior;
- **cd ../..** := Retorna dois diretórios anteriores;
- **pwd** := Mostra o diretório;
- **cd ~** := Retorna ao diretório raiz;
- **rm nome_do_arquivo** := Remove permanentemente o arquivo <nome_do_arquivo>. Importante colocar a extensão do arquivo a ser deletado;
- **rm *.txt** := Remove permanentemente todos os arquivos com a extensão ‘.txt’. Serve para outras extensões também;
- **rm -r nome_do_diretorio** := Remove permanentemente o diretório <nome_do_diretorio>;
- **mv nome_antigo_do_arquivo nome_novo_do_arquivo** := Renomeia o arquivo <nome_antigo_do_arquivo> para <nome_novo_do_arquivo>;
- **mv -r nome_antigo_do_diretorio nome_novo_do_diretorio** := Renomeia o diretório <nome_antigo_do_diretorio> para <nome_novo_do_diretorio>;
- **scp nome_do_arquivo diretorio_de_destino/** := Copia o arquivo <nome_do_arquivo> para o diretório <diretorio_de_destino>. Pode-se também copiar um arquivo que esteja em outro diretório fazendo, **scp diretorio_de_origem/nome_do_arquivo diretorio_de_destino/**. Vale ressaltar que estes comandos só copiam arquivos que já tenham sido enviados para o cluster;
- **scp -r nome_do_diretorio diretorio_de_destino/** := Copia o diretório <nome_do_diretorio> para o diretório <diretorio_de_destino>. Pode-se também copiar um diretório que esteja em outro diretório fazendo, **scp diretorio_de_origem/nome_do_diretorio diretorio_de_destino/**;

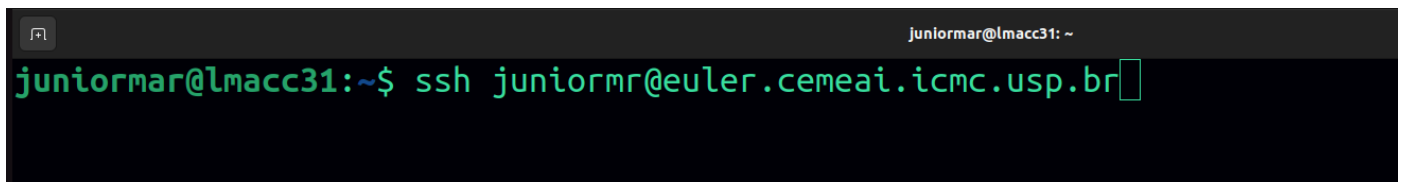
- **vim nome_do_arquivo** := Edita o arquivo <nome_do_arquivo> com o editor “vim”. O cluster não conta com editores gráficos;
- **emacs nome_do_arquivo** := Edita o arquivo <nome_do_arquivo> com o editor “emacs”.

2 Cluster Euler

Antes de apresentar alguns comandos para usar o cluster, visite o [site do Cluster](#) e leia o [manual](#) para maiores informações.

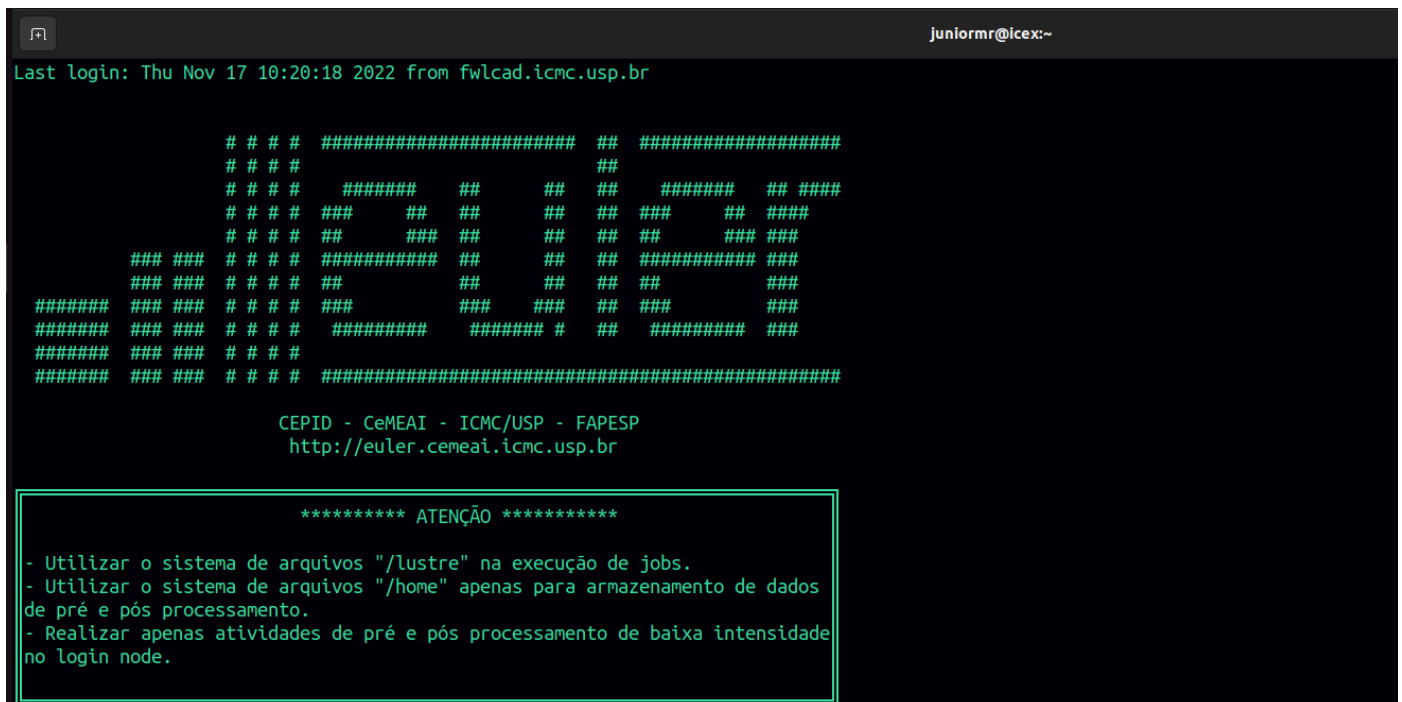
- **ssh usuario@euler.cemeai.icmc.usp.br** := Dá início ao acesso para o cluster.

Exemplo:



```
juniormar@lmacc31:~$ ssh juniormr@euler.cemeai.icmc.usp.br
```

Após digitar as senhas, deverá aparecer a tela inicial do Euler



```
Last login: Thu Nov 17 10:20:18 2022 from fwlcad.icmc.usp.br

#####
# # # #####
# # #      ##  ##  ##  #####
# # # #####  ##  ##  #####
# # #      ##  ##  ##  #####
# # #      ##  ##  ##  #####
### ## # # # #####
### ## # # #      ##  ##  #####
##### ### ## # # #      ##  ##  #####
##### ### ## # # #      ##  ##  #####
##### ### ## # # #      ##  ##  #####
##### ### ## # # #      #####

CEPID - CeMEAI - ICMC/USP - FAPESP
http://euler.cemeai.icmc.usp.br

***** ATENÇÃO *****

- Utilizar o sistema de arquivos "/lustre" na execução de jobs.
- Utilizar o sistema de arquivos "/home" apenas para armazenamento de dados
  de pré e pós processamento.
- Realizar apenas atividades de pré e pós processamento de baixa intensidade
  no login node.
```

- **Observação importante!!!** Neste ponto de acesso ao cluster faz-se necessário alertar da correta utilização dos ambientes “home” e “lustre” do Cluster Euler. Para uma boa utilização de todos os usuários, recomenda-se **NUNCA** rodar um código ou simular algo diretamente nos nós de login, para isso, deve-se fazer a submissão dos trabalhos para os nós de simulação

por meio de um arquivo com extensão *.job*. O ambiente home tem como finalidade principal o armazenamento de dados e, o ambiente lustre, é destinado para a submissão das simulações. Para tal, faça o que segue:

- `cd /lustre/usuario` := Muda do diretório “home” para o “lustre” do usuário.

Exemplo:

```
juniormr@icex:/lustre/juniormr
[juniormr@icex ~]$ pwd
/home/juniormr
[juniormr@icex ~]$ cd /lustre/juniormr/
[juniormr@icex juniormr]$ pwd
/lustre/juniormr
[juniormr@icex juniormr]$
```

- Para copiar um diretório da sua máquina para o cluster deve-se inicialmente abrir um terminal no diretório do que se deseja enviar para o cluster (diretório ou arquivo) e utilizar o seguinte comando:

`scp -r nome_do_diretorio usuario@euler.cemeai.icmc.usp.br:/diretorio_de_destino_no_cluster/`

Exemplo:

```
juniormar@lmacc31: ~
juniormar@lmacc31:~$ scp -r Documents juniormr@euler.cemeai.icmc.usp.br:/lustre/juniormr/
```

- Para copiar/baixar um diretório ou arquivo do cluster para sua máquina deve-se inicialmente abrir um terminal no diretório ao qual se deseja baixar o arquivo ou o diretório que estão no cluster e utilizar o seguinte comando:

`scp -r usuario@euler.cemeai.icmc.usp.br:/local_do_arquivo/nome_do_diretorio local_de_destino/ .`

Exemplo:

```
juniormar@lmacc31: ~
juniormar@lmacc31:~$ scp -r juniormr@euler.cemeai.icmc.usp.br:/lustre/juniormr/ .
```

- Para conseguir executar o código no cluster é necessário submeter o código. Para isso, é necessário o uso de um arquivo de submissão com a extensão *.job*, como apresentado no exemplo da figura abaixo:

```

#PBS -N bolha_newt
#PBS -l select=1:ncpus=10
#PBS -l walltime=336:00:00
#PBS -q Higflow

module load higtree/deps

cd /lustre/juniormr/HigFlow_Cluster
source varsrc

cd /lustre/juniormr/HigFlow_Cluster/higtree
make clean
make DIM=2
make DIM=3

cd /lustre/juniormr/HigFlow_Cluster/higflow
make clean
make DIM=2

cd /lustre/juniormr/HigFlow_Cluster/higflow/bolha_newtoniana
make clean
make
make run
```

1. Cabeçalho:
 - #PBS -N bolha_newt:** Dá o nome “bolha_newt” ao trabalho na fila dos trabalhos no cluster;
 - #PBS -l select=1:ncpus=10:** Seleciona o número de nós e de ‘cpus’ que devem ser utilizados (neste caso foram 10 processadores/cpus);
 - #PBS -l walltime=336:00:00:** Seleciona o tempo estimado de simulação (depois do termino do tempo estipulado, a simulação é interrompida);
 - #PBS -q Higflow:** Coloca a submissão em uma fila especial do cluster (denominada “Higflow”). Atualmente é necessário que se peça ao técnico responsável que se adicione a essa fila especial para que se consiga executar teste do projeto no cluster;
2. Módulos a serem carregados para compilação e execução das simulações (neste caso carrega todas as dependências necessárias para executar o projeto atual que está no GitHub no cluster);
3. Localização do arquivo para submissão;
4. O arquivo “varsrc” disponível no projeto dispensa a necessidade de se alterar o arquivo “.bashrc” que era necessário antigamente. Para esse arquivo deve tomar um cuidado especial com o caminho destinado para o Petsc. No caso do Cluster Euler esse caminho, que está definido no arquivo, não é necessário e portanto deve-se editar o arquivo retirando esse caminho do arquivo “varsrc”;
5. Comando para compilar e executar o código no cluster (como já é feito normalmente);

6. `qsub nome_do_arquivo.job`: Utilizado para submissão de um trabalho.

3 HigFlow no Cluster - Passos iniciais

Para que consiga utilizar o cluster para realizar os testes do HigFlow, inicialmente deve-se criar uma conta pelo do site [site do Cluster](#) (Manual para uso do cluster - [manual](#)). Para enviar o código para cluster, deve inicialmente criar uma pasta no cluster onde será armazenado o código. Para o envio existem duas possibilidades

- `git clone https://github.com/antoniocastelofilho/HigFlow.git` := faz uma cópia do código armazenado no GitHub. Para esse caso, deve-se ter acesso ao projeto no GitHub
- `scp -r diretorio usuario@euler.cemeai.icmc.usp.br:/diretorio_de_destino_no_cluster/` := Envia o “diretorio”(com o código do HigFlow) para o cluster Euler para o “diretorio_de_destino_no_cluster”

Após o envio do código, deve-se alterar o arquivo “bashrc” do cluster seguindo os passos abaixo:

- `vi ~/.bashrc` := Abre o arquivo “bashrc” para ser editado pelo `vi`;
- Acrescente as linhas a seguir no arquivo “bashrc”:
`export HIGTREE_DIR=/diretorio_do_higflow_no_cluster/higtrees`
`export HIGFLOW_DIR=/diretorio_do_higflow_no_cluster/higflow`

Exemplo: Como exemplo, no usuário “juniormr” fez-se o download do código no diretório “/lustre/juniormr/HigFlow”, assim as linhas adicionadas serão

```
export HIGTREE_DIR=/lustre/juniormr/HigFlow/higtrees
export HIGFLOW_DIR=/lustre/juniormr/HigFlow/higflow
```

4 Modulo “higtrees/deps” para o sistema HigFlow no cluster

Para conseguir compilar o código no cluster é necessário carregar o modulo “higtrees/deps”, fazendo

- `module load higtrees/deps` := Comando que carrega os módulos necessários para compilar;
- `module list` := Comando para mostrar os módulos carregados. Quando carregado o modulo “higtrees/deps”, ao digitar “module list” tem-se

```
[juniormr@icex ~]$ module list
Currently Loaded Modulefiles:
 1) gcc/6.4.0           4) hdf5/1.8.14        7) petsc/3.6.4        10) parmetis/4.0.3    13) zoltan/trilinos-13.1
 2) openmpi/3.0.0       5) valgrind/3.13.0-1  8) scotch/6.0.4       11) boost/1.64.0      14) higtrees/deps
 3) szip/2.1.1         6) cmake/3.2.1       9) metis/5.1.0        12) hypre/2.11.2
```

5 Job

Para rodar os teste é necessário criar um arquivo “.job” para submeter ao cluster. Abaixo segue um exemplo

```
#PBS -N name_job
#PBS -l select=1:ncpus=40
#PBS -l walltime=96:00:00

module load higtree/deps

cd /lustre/juniormr/HigFlow/higtree
make clean
make DIM=2
make DIM=3

cd /lustre/juniormr/HigFlow/higflow
make clean
make DIM=2

cd /lustre/juniormr/HigFlow/higflow/examples2D_vof
make clean
make
make run
```