Architektury výpočetních systémů (AVS 2023) Projekt č. 2: Paralelizace s OpenMP

Marta Jaroš (martajaros@fit.vutbr.cz)

Termín odevzdání: 15. prosince 2023

1. Úvod

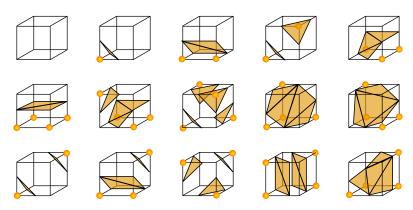
Primárním cílem tohoto projektu je vyzkoušet si přechod od sekvenčního k paralelnímu algoritmu a jeho praktickou implementaci a optimalizaci. Druhotným cílem je pak osvojit si metriky používané při hodnocení efektivity paralelních algoritmů. Vaším prvním úkolem bude paralelizace naivního algoritmu pro rekonstrukci polygonálního povrchu ze skalárního pole ve 3D prostoru (tzv. "Marching Cubes") a vyhodnocení vlastností tohoto řešení. Druhým úkolem bude optimalizace tohoto řešení na úrovni algoritmu pomocí hierarchického dělení prostoru (tzv. "Octree") a rychlé eliminace prázdného prostoru. Veškeré paralelizace budou tvořeny pomocí OpenMP pragem pro vícevláknovou aplikaci se sdílenou pamětí — neboli sekce *pragma omp parallel*. Cílem tedy není program explicitně vektorizovat.

Přístup k překladu a ladění je podobný, jako v prvním projektu. Jen namísto Intel Advisor budete využívat Intel VTune. Projekt lze přeložit a spustit prakticky kdekoliv (vyžaduje CMake a kompilátor), budeme se ale spoléhat na optimalizační reporty poskytované Intel kompilátorem. Referenčním strojem je výpočetní klastr Barbora s kompilátorem Intel (viz A), na jehož výpočetním uzlu provádějte všechna měření do tohoto projektu. K ladění můžete použít i vlastní počítač, jestliže si nainstalujete nástroje od Intelu (jsou pro studenty zdarma). Pro prvotní ladění funkcionality algoritmu je možné využít i překladač GCC — algoritmus navrhnete a odladíte u sebe lokálně a až následně jej spustíte na clusteru.

2. Rekonstrukce povrchu pomocí Marching Cubes

Ačkoli implementace samotného jádra algoritmu "Marching Cubes" není vaším úkolem, je důležité získat určitou představu o jeho fungování. Marching cubes je algoritmus využívaný v počítačové grafice pro rekonstrukci polygonové sítě (povrchu/isosurface²) ze skalárního pole³. Typicky je skalární pole získáváno jako 3D pole například jako data z CT nebo MRI. Pro účely projektu je však skalární pole vyhodnocováno za běhu a pouze v bodech, kde je nutné znát jeho hodnotu.

Samotný algoritmus je založen na rozdělení skalárního pole do krychlí o určité velikosti (udává rozlišení výsledné polygonové sítě). Při následném průchodu takto rozděleného pole je na základě hodnot ve vrcholech každé krychle určena konfigurace polygonů potřebná pro reprezentaci části povrchu procházejícího danou krychlí. Vhodná konfigurace polygonů je vybrána z $2^8 = 256$ možných konfigurací (obrázek 2.1) tak, že hodnoty ve vrcholech krychle jsou převedeny do binární podoby porovnáním s požadovanou hodnotou na povrchu (isosurface level) – těchto 8 binárních hodnot pak tvoří 8-bit ukazatel do tabulky možných konfigurací. Pro příklad uvažujme krychli, kde všechny její vrcholy mají hodnotu menší než požadovaná hodnota – dostáváme 8-bit index 0 (0000000b), který ukazuje na konfiguraci bez polygonů (celá krychle leží pod povrchem). Stejný výsledek získáme, pokud celá krychle leží nad povrchem – index 255 (11111111b).



Obrázek 2.1: 16 z 256 možných konfigurací polygonů

Konečně posledním krokem je lineární interpolace vygenerovaných vrcholů podél hrany krychle, tak aby výsledný vrchol ležel přesně na průsečíku mezi povrchem a příslušnou hranou krychle. Obrázek 2.1 ukazuje stav před interpolací a vrcholy tedy vždy leží ve středu hrany.

Algoritmus tedy může být rozdělen do tří pomyslných částí: rozdělení a průchod skalárním polem, výpočet hodnoty skalárního pole v daném bodě a vytvoření výstupních polygonů. Tento projekt je zaměřen na první dvě z těchto částí, které mohou být snadno paralelizovány pomocí OpenMP.

¹https://en.wikipedia.org/wiki/Marching_cubes

²https://en.wikipedia.org/wiki/Isosurface

³https://en.wikipedia.org/wiki/Scalar_field

3. Struktura projektu, překlad a spuštění

Archiv zadání obsahuje:

PMC-xlogin00.txt data/ scripts/

Soubor PMC-xlogin00.txt obsahuje otázky, které je třeba zodpovědět v průběhu řešení projektu. Složka data osahuje data pro testování a měření výkonnosti vašeho řešení. Složka scripts obsahuje skripty pro generování vstupních dat a grafů škálování. A dále obahuje zdrojový kód projektu. Navíc jsou k dispozici dva skripty pro cluster — vtune.sl, který provede měření a evaluate.sl, který vaši implementaci ohodnotí pro různá nastavení.

Zdrojový kód projektu je strukturován do několika tříd, které kopírují základní části algoritmu marching cubes. Hlavní část algoritmu je rozdělena mezi virtuální třídu Base-MeshBuilder a z ní dědící třídu RefMeshBuilder. Třída BaseMeshBuilder obsahuje kód samotného generování trojúhelníků, ale způsob průchodu skalárním polem a výpočet hodnoty v bodě je delegován virtuálními metodami (pure virtual) do dceřiné třídy RefMeshBuilder. Pro načítání a předzpracování vstupních dat slouží třída Parametric-ScalarField, která vstupní data zpřístupňuje v podobě kolekce bodů v 3D prostoru. A konečně prázdné třídy LoopMeshBuilder a TreeMeshBuilder dědící z BaseMeshBuilder jsou připraveny pro vaše paralelní implementace (RefMeshBuilder je tedy vzorem pro vaše řešení). Zdrojový kód je rozdělen do několika souborů:

- main.cpp: Obsahuje vstupní bod programu, zpracování parametrů (knihovna cxxopts⁴), nastavení počtu OpenMP vláken a výběr požadované implementace (referenční, paralelní smyčka, paralelní strom).
- common/vector_helpers.h: Obsahuje pomocnou třídu pro reprezentaci bodu v 3D prostoru (Vec3_t) a nástroje pro přesné měření realného času pomocí C++11.
- common/base_mesh_builder.*: Bázová třída pro vaše paralelní implementace Marching cubes.
- common/parametric_scalar_field.*: Třída reprezentující skalární pole jako množinu bodů v 3D prostoru.
- common/ref_mesh_builder.*: Referenční implementace třídy BaseMeshBuilder.
 Její metody marchCubes, evaluateFieldAt a emitTriangle implementují průchod
 polem, vyhodnocení hodnoty pole v bodě a uložení jednoho vygenerovaného trojúhelníku.
 Metoda getTrianglesArray naopak vrací ukazatel na pole obsahující všechny vygenerované trojúhelníky.
- parallel_builder/loop_mesh_builder.*: Bude obsahovat vaši implementaci (obdobu RefMeshBuilder) pomocí paralelních smyček OpenMP.

⁴https://github.com/jarro2783/cxxopts

• parallel_builder/tree_mesh_builder.*: Bude obsahovat vaši implementaci (obdobu RefMeshBuilder) optimalizovanou pomocí paralelního stromového průchodu a OpenMP tasků.

Pro přeložení projektu je možné použít CMake následujícím způsobem:

```
~$ cd Assignment
~/Assignment$ mkdir build && cd build
~/Assignment/build$ CC=icc CXX=icpc cmake ..
~/Assignment$ make -j
```

Výstupem překladu by měl být jediný spustitelný soubor PMC (Parallel Marching Cubes), jehož výstupem je:

Missing required arguments: "INPUT"

Argumenty programu mají následující významy:

• INPUT soubor

Vstupní soubor obsahující body, které definují skalární pole.

• OUTPUT soubor

Výstupní soubor pro vytvořený model ve formátu "Wavefront *.obj". Tento parametr lze vynechat – výstup je pak zahozen (vhodné pro měření rychlosti).

• --level l

Udává hodnotu "isosurface", tedy vzdálenost k nejbližšímu bodu ve vstupním souboru, na které leží hledaný povrch. Ve zdrojovém kódu lze tuto honotu přečíst z proměnné mIsoLevel ve třídě BaseMeshBuilder, nebo voláním metody getIsoLevel na objektu třídy ParametricScalarField.

• --grid g

Udává délku hrany diskretizační mřížky a s ní rozlišení diskretizace a celkový počet "Marching cubes" $(N=\mathrm{g}^3)$. Hodnotu tohoto parametru lze získat v proměnné mGridSize ve třídě BaseMeshBuilder.

• --builder

Umožňuje zvolit konkrétní implementaci algoritmu "Marching cubes". Možnosti jsou:

- ref Referenční implementace v souborech common/ref_mesh_builder.*
- loop Vaše implementace pomocí paralelní smyčky (viz sekce 5.1)
- tree Vaše implementace pomocí paralelního průchodu stromem (viz sekce 5.2)

• --threads N

Maximální počet OpenMP vláken (pokud není hodnota specifikována použije se nastavení prostředí). Nastavení je realizováno voláním funkce omp_set_num_threads z knihovny OpenMP.

• --batch

Přepnutí do režimu minimálních výpisů ve formátu CSV, vhodné pro vytváření tabulek a grafů.

Spuštění programu s některým ze vstupních souborů ze složky data vygeneruje příslušný polygonální povrch:

~/Assignment/build\$./PMC ../data/bun_zipper_res4.pts bun_zipper_res4.obj

------ Barching Cubes Mesh Builder -------

Mesh Builder: Reference

Input Field File: ../data/bun_zipper_res4.pts

Output Mesh File: bun_zipper_res4.obj

Grid Size: 64
Iso Level: 0.15
Field Elements: 453

Number of Threads: 16 Elapsed Time: 8679 ms Mesh Triangle Count: 42476

Output File Size: 5441 KB

----- DONE -----

Výstup programu ukazuje, že byla použita referenční implementace na vstupním souboru ../data/bun_zipper_res4.pts a výstup byl uložen do souboru bun_zipper_res4.obj. Hrana mřížky byla 64, "iso-level" měl hodnotu 0.15 a vstupní soubor obsahoval 453 bodů. Výstupní model byl vygenerován za 8679 ms, obsahuje 42476 trojúhelníků a soubor má velikost 5441 KB.

FORMÁT VSTUPNÍCH A VÝSTUPNÍCH SOUBORŮ

Vstupní soubory obsahují sekvenci bodů v 3D prostoru:

```
../data/bun_zipper_res4.pts
p -0.312216 1.263040 0.051492
p -0.446774 1.312040 0.057048
p -0.683011 1.448280 0.413688
...
```

Výstupem je polygonální síť ve formátu "Wavefront *.obj", soubor tedy obsahuje seznam vrcholů a seznam trojic indexů spojující vrcholy do trojúhelníků:

```
bun_zipper_res4.obj
v 9.88281631 8.1788826 0.339680344
v 9.86799812 8.1788826 0.340786725
v 9.88281631 8.17489433 0.340786755
...
f 1 2 3
f 4 5 6
f 7 8 9
```

Soubor tohoto formátu lze vizualizovat většinou nástrojů pro práci s 3D grafikou — ve Windows Microsoft 3D Viewer, online nástroj https://3dviewer.net/, nebo opensource Blender⁵. Je možné vizualizovat pouze výstup algoritmu.

Pro ladění byl vytvořen skript scripts/check_output.py <A.obj> <B.obj>, který otestuje, zda jsou výstupy shodné a jaký je jejich rozdíl. Pro rychlejší ladění byl vytvořen i skript bash scripts/compare.sh, který na dvou velikostech zkusí, za obě dvě implementace pro bun_zipper_res3.pts dávají stejné výsledky, jako referenční algoritmus.

4. Výstup a hodnocení projektu

Výstupem projektu bude soubor xlogin00.zip obsahující vámi modifikované soubory, textový soubor s otázkami a grafy škálování (viz sekce 5.3). Do textového souboru uveď te výsledky měření a zodpovězte požadované otázky. V každém souboru (který jste změnili) nezapomeňte uvést svůj login! Hodnotit se bude jak funkčnost a správnost implementace, tak textový komentář – ten by měl dostatečně popisovat výsledky měření a odpovídat na otázky uvedené v zadání. Hodnocení je uvedené u jednotlivých částí zadání a dohromady tvoří 20 bodů. Projekt odevzdejte v uvedeném termínu do informačního systému.

Shrnutí obsahu odevzdávaného archivu:

- parallel_builder/loop_mesh_builder.{h/cpp} Vaše implementace pomocí paralelních smyček – sekce 5.1
- parallel_builder/tree_mesh_builder.{h/cpp} Vaše implementace pomocí paralelního stromu – sekce 5.2
- PMC-xlogin00.txt (přejmenujte dle vašeho loginu)
 Odpovědi na uvedené otázky.
- input_scaling_strong.png, input_scaling_weak.png a grid_scaling.png Grafy silného a slabého škálování vzhledem ke vstupu a graf škálování vzhledem k velikosti mřížky.

⁵https://www.blender.org/ File -¿ Import -¿ Wavefront (*.obj)

5. Paralelní Marching Cubes (20 bodů)

Cílem projektu je vytvořit trojici tříd implementující hlavní části algoritmu Marching cubes, tak aby bylo možné využít více-jádrové CPU. Následující výpis ukazuje signaturu těchto tříd a referenční (sekvenční) implementaci je možné nalézt v souboru common/ref_mesh_builder.cpp.

```
class MyMeshBuilder : public BaseMeshBuilder
1
2
   public:
3
        MyMeshBuilder(unsigned gridEdgeSize);
4
5
6
        unsigned marchCubes(const ParametricScalarField &field);
7
        float evaluateFieldAt(const Vec3_t<float> &pos, const ParametricScalarField &field);
8
        void emitTriangle(const Triangle_t &triangle);
9
10
        const Triangle_t *getTrianglesArray() const;
11
   };
```

Každá z těchto tříd musí implementovat následující virtuální metody:

- unsigned marchCubes(const ParametricScalarField & field)
 Implementace průchodu mřížkou, tedy každou pozicí v 3D prostoru, kde je třeba vygenerovat polygony. Pro samotné vyhodnocení/vygenerování polygonů na dané pozici lze zavolat metodu unsigned buildCube(/* position */, /* field */), která je definovaná ve třídě BaseMeshBuilder a očekává pozici krychle v mřížce a příslušné pole "field" a vrací počet vygenerovaných trojúhelníků.

 Metoda marchCubes je volána metodou BaseMeshBuilder::buildMesh, která očekává, že návratová hodnota marchCubes bude celkový počet vygenerovaných polygonů.
- float evaluateFieldAt(const Vec3_t<float> &pos, const /* ... */ &field)
 Implementuje výpočet hodnoty skalárního pole field v bodě pos a vrací vypočtenou hodnotu. Tato hodnota je dána výrazem 5.1, který je vlastně pouhým nalezením vzdálenosti od bodu pos k nejbližšímu bodu s v poli field.

$$\min_{s \in F} \sqrt{\sum_{\xi \in \{x, y, z\}} (s_{\xi} - p_{\xi})^2}$$
 (5.1)

Kde F je pole field, s je jeden z bodů definující pole F, $i \in \{x, y, z\}$ označuje dimenze a p je bod pos.

POZOR: Tato metoda je volána z BaseMeshBuilder::buildCube!

void emitTriangle(const Triangle_t &triangle)
 Metoda je volána po vygenerování každého trojúhelníku a jejím úkolem je uložit daný trojúhelník do vhodné datové struktury (v referenční implementaci postačuje C++ vektor). Metoda může být volána několikrát v rámci jednoho volání BaseMeshBuilder:: buildCube, což vyžaduje zvýšenou pozornost.

POZOR: Tato metoda je volána z BaseMeshBuilder::buildCube!

const Triangle_t *getTrianglesArray() const
 Metoda vrací ukazatel na pole trojúhelníků (tj. oblast paměti, kde jsou trojúhelníky těsně za sebou) a je volána pouze 1× z BaseMeshBuilder::buildMesh těsně před uložením polygonů do výstupního souboru. Pořadí trojúhelníků v tomto poli je nedefinované.

Uspořádání prostoru

Pro práci s již implementovanými metodami jako buildCube je důležité korektní předávání souřadnic jako pozice krychle. Kód pracuje pouze v kladném oktantu, všechny souřadnice tedy leží v intervalu $\langle 0, S_{i \in \{x,y,z\}} \rangle$, kde S_i je délka hrany osově zarovnaného kvádru kolem vstupních dat. Vstupní data jsou po načtení do tohoto prostoru mapovány jednoduchým posunutím.

Rozlišení mřížky (tedy velikost jedné "Marching cube") je vypočtena jako

$$\texttt{mGridResolution} = \frac{\max_{i \in \{x,y,z\}} S_i}{\texttt{mGridSize}}. \tag{5.2}$$

Tím vzniká prostor celočíselných indexů $0,1,\ldots,\frac{\text{mGridSize}}{\text{mGridResolution}}$ v každé dimenzi. Metoda buildCube očekává souřadnice krychle právě v těchto celočíselných indexech. Naproti tomu metoda evaluateFieldAt očekává pozici v původním spojitém prostoru! Výstupní polygony jsou taktéž v původním spojitém prostoru. Při řešení předpokládejte pouze velikosti mřížek v mocninách 2 (mGridSize $\in 2^i$) – což znatelně zjednodušuje stromovou implementaci (viz dále).

5.1. Paralelizace původního řešení (5 bodů)

Prvním úkolem je tedy vytvořit paralelní implementaci třídy LoopMeshBuilder v souborech parallel_builder/loop_mesh_builder.{h/cpp}. Jako výchozí kód můžete použít referenční implementaci v common/ref_mesh_builder.{h/cpp}, která obsahuje dvě vhodné smyčky: průchod mřížkou v marchCubes a výpočet minimální vzdálenosti v evaluateFieldAt. Pro paralelizaci použijte vhodné prostředky OpenMP.

V rámci úlohy vyzkoušejte paralelizaci obou smyček (nezávisle) a jako výsledné řešení odevzdejte to, které bude vykazovat lepší výsledky. Pokud se pokusíte paralelizovat obě smyčky zároveň, nezapomeňte, že půjde o vnořený paralelismus (evaluateFieldAt je efektivně volána ze smyčky procházející mřížkou).

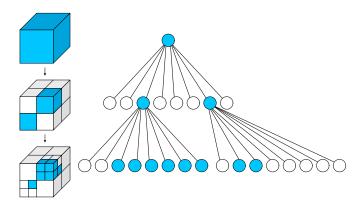
Při paralelizaci smyček také ověřte vliv různých možností rozdělení práce mezi vlákna (OpenMP static/dynamic/guided sheduling) a výsledná zjištění stručně popište v textovém souboru s odpověďmi.

5.2. Paralelní průchod stromem (8 bodů)

Druhým úkolem je vytvořit optimalizovanou paralelní implementaci třídy TreeMeshBuilder v souborech parallel_builder/tree_mesh_builder.{h/cpp}. V tomto případě je však cílem nejen paralelizace, ale také optimalizace samotného algoritmu průchodu mřížkou.

Vzhledem k tomu, že hledaný povrch se nachází ve specifikované vzdálenosti od nejbližšího bodu s (výraz 5.1 v kombinaci s parametrem programu) lze relativně snadno určit oblast mřížky, kde není možné, aby jí procházel hledaný povrch. To umožňuje optimalizovat průchod mřížkou tak, že se tyto oblasti vyloučí a nebude se pro ně volat metoda buildCube.

Typickým přístupem k řešení tohoto problému je hierarchická dekompozice prostoru. V našem případě použijeme stromovou dekompozici (Octree decomposition⁶), kde se prostor dělí na každé úrovni na 8 potomků (viz obrázek 5.1).



Obrázek 5.1: Octree dekompozice, kde modře vyznačenými bloky prochází hledaný povrch.

Průchod takovýmto stromem je pak následující:

- Aktuální blok (na začátku celá mřížka) je rozdělena do 8 potomků (bloky o poloviční délce hrany).
- Pro každého potomka ověříme, zda je možné, aby jeho podprostorem procházel
 hledaný povrch (isosurface). Pro účely tohoto projektu lze tento test snadno aproximovat pomocí opsané koule kolem aktuálního bloku (povrch je totiž také definovaný množinou bodů a vzdáleností tedy množinou koulí na různých pozicích).
 Podmínka prázdnosti bloku je tedy

$$F(p) > l + \frac{\sqrt{3}}{2}a\tag{5.3}$$

Kde F(p) je hodnota pole (tedy 5.1) ve středu bloku, l je aktuální "iso-level" a a je délka hrany bloku. Při implementaci si dejte pozor na celočíselné operace (např. double b = a / 2 je stále celé číslo, pokud a je integer).

 Konečně, každý neprázdný potomek je rozdělen na dalších 8 potomků až do předem specifikované hloubky (tzv. "cut-off"), nebo velikosti hrany a (která je zmenšena na polovinu s každým zanořením).

⁶https://en.wikipedia.org/wiki/Octree

 Na nejnižší úrovni jsou pak voláním BaseMeshBuilder::buildCube (jako v předchozím případě) vygenerovány samotné polygony pro všechny krychle náležející do daného podprostoru.

Je zřejmé, že pro tento rekurzivní proces jsou vhodným mechanismem pro paralelizaci OpenMP tasky a jejich využití je v tomto případě tedy povinné! Nezapomeňte také, že metoda marchCubes vrací počet vygenerovaných trojúhelníků. Jelikož tento počet bude známý až po zanoření na poslední úroveň, je vhodné použít synchronizaci tasků (rodič čeká na potomky) a případně atomické operace pro sesbírání počtu od každého potomka. Konečně, pro výpočet "fyzické" velikosti bloků stromu a pozice jejich středů je možno použít třídní proměnnou mGridResolution (deklarováno v BaseMeshBuilder). Proměnná mIsoLevel obsahuje aktuální "iso-level" potřebný pro vyhodnocení prázdnosti bloku.

5.3. VYHODNOCENÍ ŠKÁLOVÁNÍ JEDNOTLIVÝCH ŘEŠENÍ (7 BODŮ)

Pro všechny varianty algoritmu vytvořte grafy silného a slabého škálování vzhledem k počtu bodů ve vstupním souboru a počtu vláken. Vytvořte také společný graf škálování vzhledem k velikosti mřížky pro hranu délky 8-512 bodů při použití maximálního počtu vláken.

Pro zjednodušení byl vytvořen skript pro Slurm evaluate.sl, který smaže původní výsledky a vytvoří data i grafy (do adresáře projektu). Vzhledem k náročnosti aplikace se tento skript musí pouštět v dávkovém režimu (přes sbatch).

Dále budete měřit využití jednotlivých jader pro celý dvouprocesorový systém (36 jader) a pro polovinu (18 jader). Měření automaticky provede Slurm skript vtune.sl, který pro jednotlivé konfigurace vytvoří adresář build_vtune/vtune-{builder}-{threads}. Vy potom v nástroji Intel VTune (který můžete pustit lokálně, v CVT, nebo i na uzlu (login uzel nemusí funguvat kvůli paměťovým nárokům) vyhodnotíte, jak byla využita jednotlivá jádra. V nástroji VTune stačí otevřít soubor (results, ne projekt!) textttbuild_vtune-{builder}-{threads}/vtune-{builder}-{threads}.vtune.

Dosažené výsledky stručně zhodnoťte (a pokud možno vysvětlete) v textovém souboru s odpověďmi na otázky.

A. Superpočítač Barbora

Superpočítač Barbora umístěný na VŠB v Ostravě je složen z celkem 192 uzlů, každý uzel je osazen dvěma 18jádrovými procesory Intel Cascade Lake 6240 a 192 GB RAM. Tyto procesory podporují tedy vektorové instrukce AVX-512. Pro připojení na superpočítač Brbora je potřeba mít vytvořený účet, se kterým je možné se připojit na jeden z dvojice tzv. čelních (login) uzlů – barbora.it4i.cz (round-robin DNS). Postup získání přístupu byl popsaný v prvním projektu. Stejně tak připojení ke grafickému prostředí. Nezapomeňte na závěr smazat běžící instance VNC.

Po připojení ke vzdálené ploše můžete otevřít emulátor terminálu (menu Aplikace \to Systémové nástroje \to Terminál) a vytvořit interaktivní úlohu následujícím způsobem:

```
[user@login1.barbora ~]$ sbatch vtune.sl
[user@login1.barbora ~]$ squeue --me
# pockat, az uloha dobehne
[user@login1.barbora ~]$ ml VTune
[user@login1.barbora ~]$ vtune-gui
# pokud uloha skonci se segfault, je nutne VTune pustit na uzlu (použijte salloc pro získání interaktivní úlohy)
# nebo spustit interaktivni ulohu na uzlu
[user@login1.barbora ~]$ salloc -A DD-23-135 -p qcpu_exp -N 1 --comment 'use:vtune=2022.2.0' --x11
salloc: Pending job allocation 68455
salloc: job 68455 queued and waiting for resources
...
salloc: job 68455 ready
[user@cn49.barbora ~]$
```

Příkaz sbatch zadá požadavek na spuštění úlohy do fronty; jakmile bude v systému dostatek volných uzlů, dojde ke spuštění úlohy. Parametr -A určuje projekt, v rámci kterého máme alokované výpočetní hodiny (neměnit), -p určuje frontu, do které bude úloha zařazena (používejte qcpu_exp nebo qcpu), parametr -N určuje zdroje, které budou úloze přiděleny (počet uzlů) a další možnosti (v našem případě načtení modulu pro profiler). Interaktivní úlohu pak obdobně pomocí příkazu salloc. Pomocí --x11 tunelujeme XWindow system. Více o spouštění úloh na superpočítačích IT4I naleznete v dokumentaci⁷.

Nyní jste již v terminálu připojeni k výpočetnímu uzlu (viz nový hostname v terminálu) s tím, že by jste měli být schopní spustit grafickou aplikaci:

```
[user@cn49.barbora ~]$ ml VTune [user@cn49.barbora ~]$ vtune-gui
```

Software na superpočítači je dostupný pomocí tzv. *modulů*. Práci s nimi zajišťuje příkaz ml (*module load*). Tento příkaz bez parametrů vypíše aktuálně načtené moduly, a všechny moduly specifikované jako parametry se pokusí načíst. Příkaz ml purge je všechny odstraní.

Moduly je potřeba načíst po každém přihlášení nebo získání výpočetního uzlu (jsou implementovány proměnnými prostředí). V tomto projektu budou pro překlad (a spouštění) potřeba moduly intel-compilers (kompilátor), CMake (překladový systém) a pro profilování modul VTune (jak bylo již demonstrováno výše). Jestliže jej potřebujete, modul profileru načtěte jako první! Závisí na starších knihovnách, které mohou být přepsány novějšími po načtení kompilátoru. Pro profilování kvůli knihovnám musíte mít načtený i modul intel-compilers, jinak se vaše přeložená aplikace nespustí. Pro vykreslení výsledků budete potřebovat Python3 s knihovnami NumPy a Matplotlib matplotlib.

Výstupy z PBS skriptů naleznete v souborech AVS.*. {oe}{0-9}*.

⁷https://docs.it4i.cz/general/job-submission-and-execution/