NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Introducción al uso de la infraestructura del NLHPC

Objetivos

- Accediendo al cluster Guacolda-Leftraru
  - SSH
  - Infraestructura y recursos
- Uso de Slurm
  - Parámetros
  - Uso interactivo y encolado de tareas
  - Uso de comandos informativos
  - Monitoreo de las tareas
- Uso de Módulos
  - Consultando por software y sus versiones
  - Cargando módulos
- Escalamiento
- Ejercicios prácticos

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Participación general

Nuestra metodología busca ser dinámica y participativa

- Realizar consultas durante la presentación
- Se realizarán ejercicios en grupo
- En cada ejercicio los usuarios deberán:
  - Participar en la realización de los ejercicios
  - Compartir pantalla de manera grupal
  - Explicar los resultados de los ejercicios
- Se asignarán distintos usuarios para la realización de cada ejercicio

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Infraestructura

Nodo Login/debug (gn)

Partición Debug

- 4 Nodos
  - Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2660
  - 20 CPUs
  - 59 GB RAM

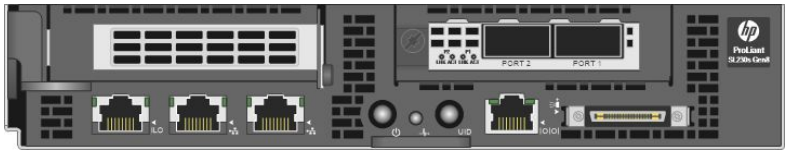
- Límites de tiempo de ejecución a 30 minutos
- Orientado a acceso y pruebas de compilación

- **Total partición:**
- 80 CPUs
- 236 GB RAM

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Infraestructura - Leftraru

Nodo Slims (cn)



Partición Slims

- 132 Nodos
  - Intel(R) Xeon E5-2660 v2
  - 20 CPUs
  - 46 GB RAM

- Límites de tiempo de ejecución: 30 días
- Partición **por defecto**

- **Total partición:**
- 2.640 CPUs
- 6.072 GB RAM

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Infraestructura - Leftraru

Nodo General (sn)

Partición General

- 48 nodos
  - Intel(R) Xeon Gold 6152
  - 44 cores
  - 187 GB RAM DIMM DDR4
- Límites de tiempo de ejecución: 30 días
- **Total partición:**
  - 2.112 CPUs
  - 8.976 GB RAM

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Infraestructura - Leftraru

Nodo Largemem (fn)

Partición Largemem

- 9 nodos
  - Intel(R) Xeon Gold 6152
  - 44 cores
  - 765 GB RAM

- Destinado para tareas de 192G+ RAM
- Límites de tiempo de ejecución: 30 días

- **Total partición:**
- 396 CPUs
- 6.885 GB RAM

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Infraestructura - Guacolda

Nodo GPU (gn)

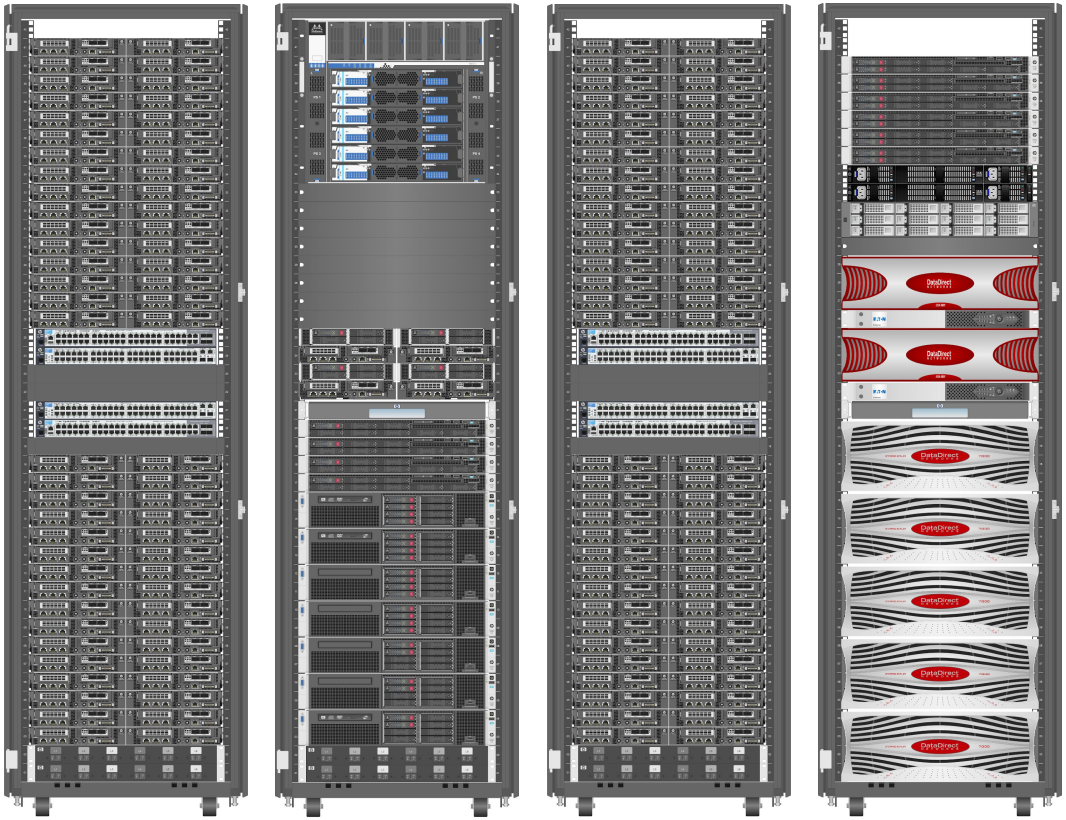
Partición GPU

- 2 Nodos
  - Intel(R) Xeon Gold 6152
  - 44 cores
  - 187 GB RAM
  - 2 NVIDIA Volta V100 cada nodo
    - 16GB
    - 5120 CUDA cores cada una
- Destinado a tareas que requieran uso de GPUs
- Límites de tiempo de ejecución: 30 días
- **Total partición:**

- 88 CPUs
- 374 GB RAM
- 20.480 CUDA cores

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Infraestructura NLHPC

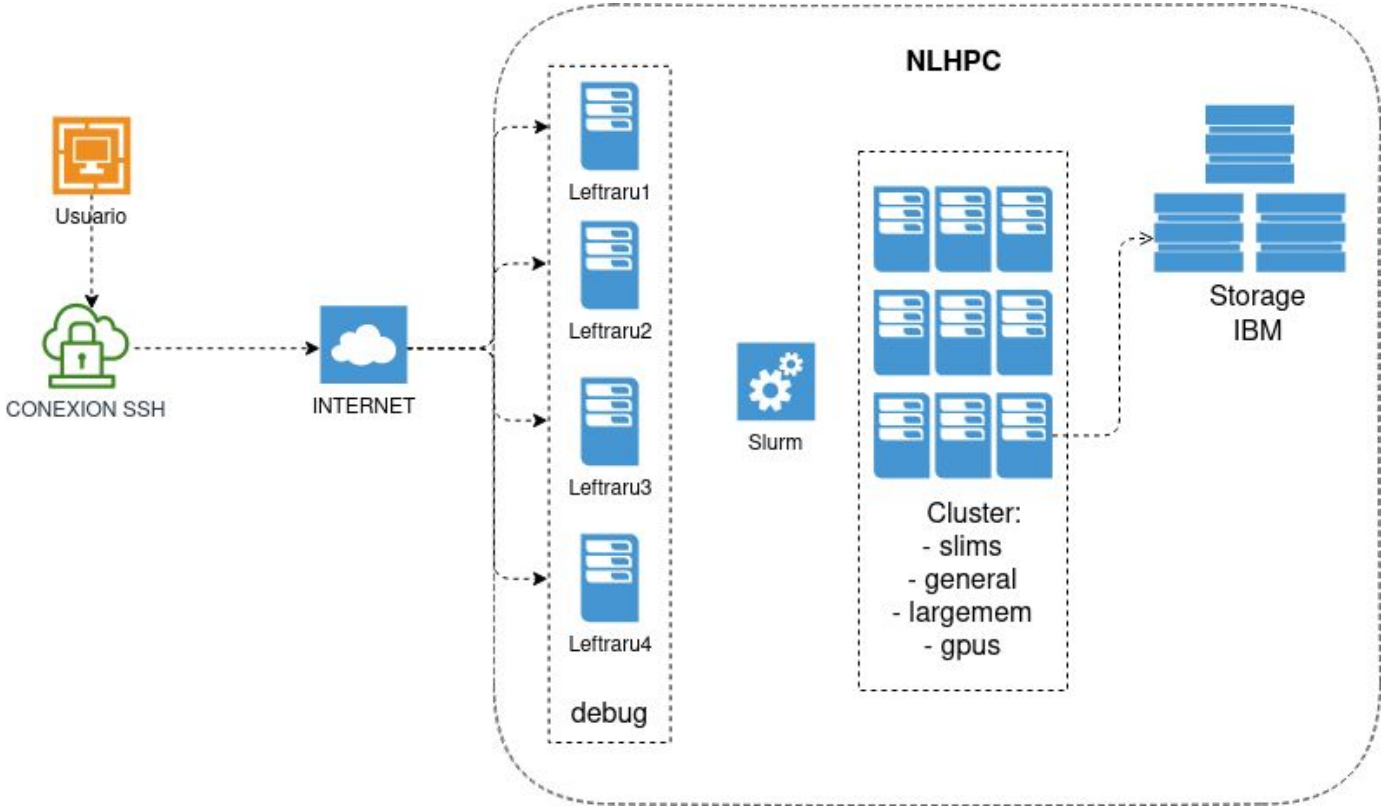


- 266 TFlops
- 5236 cores
- 191 nodos
- 4 PB almacenamiento IBM Spectrum Scale
- Red LAN Infiniband FDR 56Gbps

https://wiki.nlhpc.cl/Hardware_Disponible

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Accediendo al Cluster



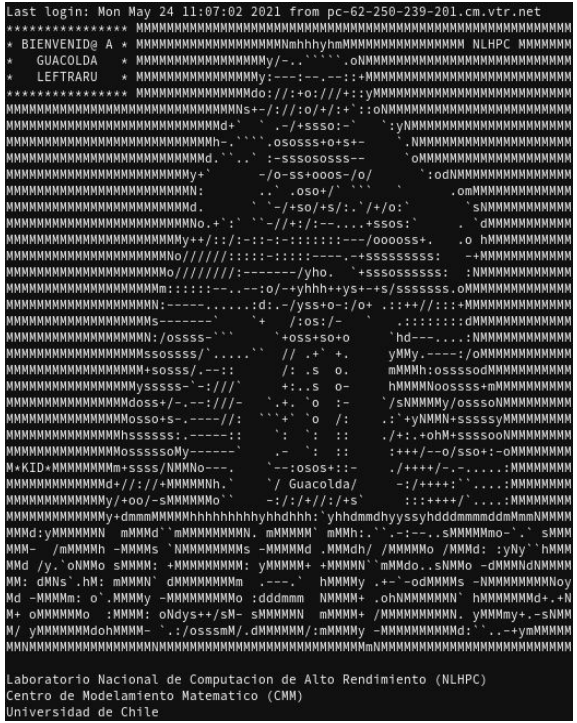
NLHPC
National Laboratory
for High Performance
Computing
Chile

Accediendo al Cluster

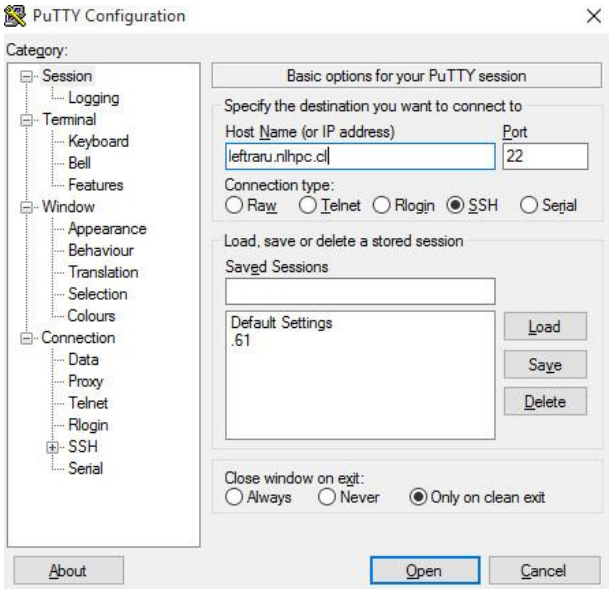
Protocolo: SSH
Host: leftraru.nlhpc.cl

Linux, macOS:

```
ssh usuario@leftraru.nlhpc.cl
```



Windows:



NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing
Chile

Llaves SSH

Generar llave SSH

```
[dbowman@HAL ~] ssh-keygen -t ed25519
Enter file in which to save the key (/home/dbowman/.ssh/id_ed25519)
Enter passphrase (empty for no passphrase)
```

Copiar llave SSH

```
[dbowman@HAL ~] ssh-copy-id dbowman@leftraru.nlhpc.cl
```

Acceder al cluster

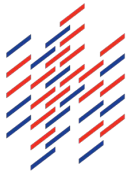
```
[dbowman@HAL ~] ssh dbowman@leftraru.nlhpc.cl
```

El uso de llaves SSH ofrece un método de autenticación más seguro.

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

¿Qué es SLURM

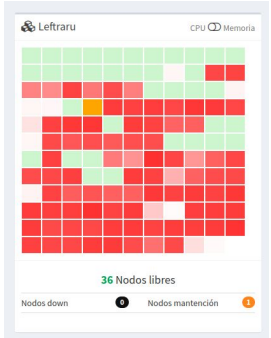
- Gestor de recursos
- Administra los recursos de las particiones de Leftraru y Guacolda.
- Gestiona las tareas en ejecución y en espera en el cluster.
- Reserva recursos compartidos.
- Permite la ejecución de tareas hasta por 30 días



Obteniendo información de las particiones

- ***sinfo***: ver estado de las particiones

```
[dbowman@leftraru1 ~]# sinfo
PARTITION AVAIL  TIMELIMIT  NODES  STATE NODELIST
slims*       up   infinite      1  drain cn037
slims*       up   infinite     12    mix cn[023-024,026,045,072-073,079,087,096,107,129,131]
slims*       up   infinite     63  alloc cn[019-020,038-044,....108-128,130]
slims*       up   infinite     55   idle cn[001-018,021-022,...082-083,086,088-090,132]
general      up   infinite      9    mix sn[002,006,014-016,021,028,030-031]
general      up   infinite     39  alloc sn[001,003-005,007-013,...032-048]
largemem     up   infinite      2    mix fn[001,007]
largemem     up   infinite      2  alloc fn[002,004]
largemem     up   infinite      5   idle fn[003,005-006,008-009]
gpus         up   infinite      2    mix gn[001-002]
debug        up   infinite      4   idle leftraru[1-4]
```



squeue: listado de tareas en ejecución y pendientes

Monitorear desde la consola:

```
[dbowman@leftraru1 ~]$ squeue
  JOBID     PARTITION  NAME       USER      ST    TIME  NODES NODELIST(REASON)
4400799     slims      example    usuario   R     0:00      1           cn042
```

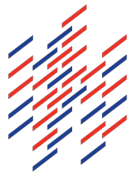
slurm workload manager

NLHPC National Laboratory for High Performance Computing Chile

sacct: estados de tareas ejecutadas


```
[dbowman@leftraru1 ~]$ sacct -X
```

JobID	JobName	Partition	Account	AllocCPUS	State	ExitCode
24118136	14131-DIA+	slims	users	2	RUNNING	0:0
24118147	14132-DIA+	slims	users	2	RUNNING	0:0
24118148	14133-DIA+	slims	users	2	COMPLETED	0:0
24118154	14137-DIA+	slims	users	2	COMPLETED	0:0



Información detallada de job

```
[dbowman@leftraru1 ~]# scontrol -dd show job 9160565

JobId=9160565 JobName=w.fepc-f-cnt-oo.m2
   UserId=dbowman(wxyz) GroupId=users(wxyz) MCS_label=N/A
   Priority=109951 Nice=0 Account=users QOS=88-30-std
   JobState=RUNNING Reason=None Dependency=(null)
   Requeue=0 Restarts=0 BatchFlag=1 Reboot=0 ExitCode=0:0
   RunTime=04:28:03 TimeLimit=3-00:00:00 TimeMin=N/A
   SubmitTime=2017-10-09T11:25:36 EligibleTime=2017-10-09T11:25:36
   StartTime=2017-10-09T15:04:40 EndTime=2017-10-12T15:04:40 Deadline=N/A
   PreemptTime=None SuspendTime=None SecsPreSuspend=0
   Partition=slims AllocNode:Sid=leftraru4:52235
   ReqNodeList=(null) ExcNodeList=(null)
```

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Enviar trabajos en SLURM

```
[dbowman@leftraru1 ~]$ srun hostname
cn028
[dbowman@leftraru1 ~]$ sbatch <job_script>
Submitted batch job 9142401
[dbowman@leftraru1 ~]$ squeue
             JOBID     PARTITION  NAME      USER    ST      TIME  NODES   NODELIST(REASON)
           9142401     slims      pi_levqu  root     R      0:08   1           cn105
[dbowman@leftraru1 ~]$ scancel 9142401
```

Comando

Salida comando

Cancelar trabajo

slurm workload manager

NLHPC National Laboratory for High Performance Computing Chile

Parámetros en SLURM

Parámetro	Uso	Acción
-J	`-J mi-tarea`	Asigna nombre a la tarea
-p	`-p slims`	Indica partición a utilizar
-n	`-n 1`	Nº de procesos
-c	`-c 20`	CPUs por proceso
--ntasks-per-node	`--ntasks-per-node=20`	Procesos por nodo
--mem-per-cpu	`--mem-per-cpu=2300`	Memoria por CPUs
-o	`-o salida_%j.out`	Log de salida
-e	`-e errores_%j.err`	Log de salida de errores
–mail-user	`–mail-user=user@abc.xyz`	Donde se envia info del JOBs
–mail-type	`–mail-user=ALL`	Tipo de información a enviar

slurm
workload manager

NLHPC
National Laboratory
for High Performance
Computing
Chile

Ejercicio 1

- Ejecute el comando **`hostname`** en la partición *Slims* con **`srun`**:
  - Con un único proceso.
  - Con dos procesos iguales.
  - Con dos procesos en distintos nodos.
  - Asignando dos CPU por proceso.
- ¿Qué resultados se han obtenido?
- En la partición *slims*
  - ¿Cuántas CPU puedo reservar por proceso? ¿Por qué ese número?
  - ¿Qué diferencia hay en la partición *general*?
  - ¿Qué ocurre si reservo más CPU de los disponibles?
- ¿Qué ocurre si no especifico la partición en la que quiero ejecutar mi comando?

slurm
workload manager

NLHPC
National Laboratory
for High Performance
Computing
Chile

Ejemplo de script básico SBATCH

Utilizar su editor por consola preferido: nvim, vim, vi, nano

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J ejemplo
#SBATCH -p slims
#SBATCH -n 1
#SBATCH -c 1
#SBATCH -o archivo_%j.out
#SBATCH -e archivo_%j.err
#SBATCH --mail-user=foo@example.org
#SBATCH --mail-type=ALL

sleep 10
```

Y ejecutar el script:

```
sbatch test.sh
```

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Ejercicio 2

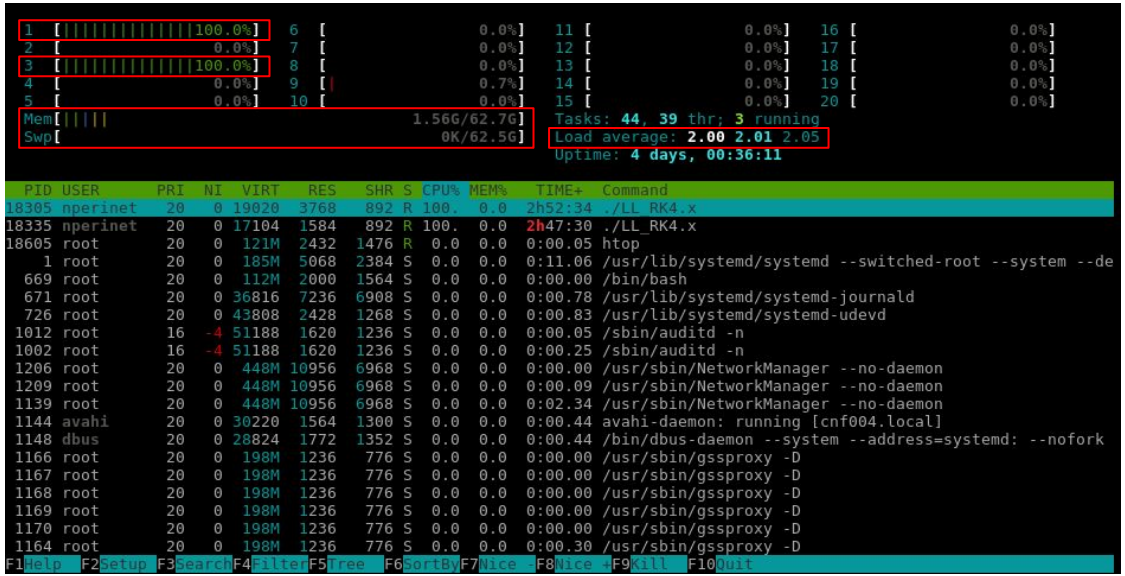
- Crea un *script* de ejecución para lanzarlo con **`sbatch`**, con las siguientes consideraciones:
  - Utilizar la partición *slims*.
  - Reserva una única CPU.
  - Ejecuta el comando **`stress -c 1`**
- El comando **`stress`** sirve para poner a prueba los distintos componentes de un computador. En este ejemplo estamos pidiendo usar una CPU (al 100%) durante un tiempo ilimitado. Ya que no se le ha especificado al comando un tiempo de término, en principio, la tarea no debiera terminar nunca. En relación a esto:
  - ¿Cuánto tiempo estará la tarea en ejecución?
  - ¿Qué comando puede utilizar para obtener información acerca de la tarea en ejecución?
  - ¿Cómo puedo cancelar mi tarea?
- Para poder lanzar tareas, debo conocer el uso del Cluster ¿Qué comando me permite conocer el estado de las particiones?

slurm
workload manager

NLHPC
National Laboratory
for High Performance
Computing
Chile

Monitorear Job - *htop*

Puede ingresar a través de ssh a un nodo en donde tenga una tarea en ejecución y ejecutar **`htop`**



NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Generador de scripts SBATCH

En el siguiente link podrá crear de forma simple sus scripts SBATCH para ser ejecutados en el cluster.
https://wiki.nlhpc.cl/Generador_Scripts

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Ejercicio 3

- Crea un *script* para lanzarlo con **`sbatch`**, con las siguientes consideraciones:
  - La partición a lanzar es *slims*.
  - Reserva un nodo completo.
  - Ejecuta el comando **`stress -c 40 -t 10m`**.
- Verifica en qué nodo se está ejecutando tu tarea, accede mediante ssh al nodo y ejecuta htop.
- ¿Cuántos procesos se están ejecutando?
- ¿Cuál es el porcentaje de uso de cada proceso?
- ¿Cómo sería la manera correcta de lanzar la tarea con el fin de que cada proceso se ejecute al 100%?
- Compara y explica el uso de CPU entre el proceso inicial y el último.

slurm
workload manager

NLHPC
National Laboratory
for High Performance
Computing
Chile

Reserva Memoria RAM

Límite en la memoria RAM:

- Por defecto se reserva 1GB de RAM por core reservado
- Si se excede se obtendrá el error: “Exceeded job memory limit”
- Reservar RAM por *core* usado: **`#SBATCH --mem-per-cpu=2300`**

 # systemd-cgtop -m | grep job_id

```
Path                          Tasks   %CPU   Memory  Input/s Output/s

/                               485 4356.4    23.4G        -        -
/slurm                            -      -    14.3G        -        -
/slurm/uid_2398                   -      -    14.3G        -        -
/slurm/u...8/job_24117526         -      -    14.3G        -        -
/system.slice                     - 4354.2     8.4G        -        -
```

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Ejercicio 4

- Crea un *script* para lanzarlo con **`sbatch`**, con las siguientes consideraciones:
  - La partición a lanzar es *slims*.
  - No asignar memoria RAM
  - Reserva una CPU por proceso.
  - Debe enviar un correo electrónico cuando la tarea cambie de estado.
  - Ejecutar **`stress -m 1 --vm-bytes 2048M -t 15m`**
- ¿Qué ocurre con la ejecución? ¿Cuál es la razón?
- Modifica el script para ejecutar la tarea.
- ¿Cuántos recursos de RAM está utilizando la tarea?

Sistema de Módulos LMOD

- Permite tener diferentes aplicaciones y versiones de estos en un mismo sistema operativo.
- En el NLHPC usamos **Lmod** (https://github.com/TACC/Lmod).
- El actual sistema de módulos está disponible para las distintas arquitecturas de procesador (AVX512, AVX, SSE4.2)

NLHPC
National Laboratory
for High Performance
Computing
Chile

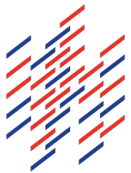
Lmod: Buscar módulo

```
[dbowman@leftraru1 ~]$ ml spider Python

----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------
  Python:
----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------
    Description:
      Python is a programming language that lets you work more quickly and integrate your systems more effectively.

     Versions:
        Python/2.7.15
        Python/3.7.2
        Python/3.7.3
     Other possible modules matches:
        Biopython  IPython  protobuf-python

----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------
  To find other possible module matches execute:

      $ module -r spider '.*Python.*'

----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------
  For detailed information about a specific "Python" module (including how to load the modules) use the module's full
name.
  For example:

     $ module spider Python/3.7.3
```

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Lmod: Cargar distintas versiones

```
[dbowman@leftraru1 ~]$ ml Python/3.7.3
[dbowman@leftraru1 ~]$ ml

Currently Loaded Modules:
  1) GCCcore/8.2.0                      4) impi/2019.2.187   7) intel/2019b  10) libreadline/8.0  13) SQLite/3.27.1  16) libffi/3.2.1
  2) icc/2019.2.187-GCC-8.2.0-2.31.1    5) imkl/2019.2.187   8) bzip2/1.0.6  11) ncurses/6.1      14) XZ/5.2.4       17) Python/3.7.3
  3) ifort/2019.2.187-GCC-8.2.0-2.31.1  6) binutils/2.32     9) zlib/1.2.11  12) Tcl/8.6.9        15) GMP/6.1.2


[dbowman@leftraru1 ~]$ python -V
Python 3.7.3

[dbowman@leftraru1 ~]$ ml Python/2.7.15

The following have been reloaded with a version change:
  1) Python/3.7.3 => Python/2.7.15

[dbowman@leftraru1 ~]$ ml

Currently Loaded Modules:
  1) GCCcore/8.2.0                      4) impi/2019.2.187   7) intel/2019b  10) libreadline/8.0  13) SQLite/3.27.1  16) libffi/3.2.1
  2) icc/2019.2.187-GCC-8.2.0-2.31.1    5) imkl/2019.2.187   8) bzip2/1.0.6  11) ncurses/6.1      14) XZ/5.2.4       17) Python/2.7.15
  3) ifort/2019.2.187-GCC-8.2.0-2.31.1  6) binutils/2.32     9) zlib/1.2.11  12) Tcl/8.6.9        15) GMP/6.1.2


[dbowman@leftraru1 ~]$ python -V
Python 2.7.15
```



NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Ejercicio 5

- Descarga el siguiente código Python con wget: n-queens-problem-3.py en tu directorio de trabajo.
- Crea un *script* de para lanzarlo con **`sbatch`**, con las siguientes consideraciones:
  - Utilizar la partición *slims*.
  - Cada proceso reserva una CPU.
  - Supondremos que cada trabajo reserva 2300 Mb de RAM.
  - Ejecuta el código con la versión de Python/3.9.5

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Ver cuota de disco

```
[dbowman@leftraru1 ~]# usoDisco

Uso de disco del usuario: dbowman

Cuota       = 200G

Utilizado   = 148.95G

% de utilización = 74.5%
```

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Eficiencia Computacional

- Comportamiento de un programa al ejecutarlo de manera paralela (más de una CPU)
- Un programa puede escalar en un rango de procesadores [1..n]
- Se logra la eficiencia cuando la medición se mantiene constante sobre un factor de 0,5
- Esto es importante, ya que un programa no se ejecutará en la mitad de tiempo si se ejecuta en un doble de procesadores.
    - Buscamos hacer un uso **óptimo** y **eficiente** de los recursos

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Eficiencia Computacional - Speedup y Eficiencia

- **SpeedUp** es la métrica que nos indica la ganancia mediante la paralelización:
  - SpeedUp = Tiempo Original / Tiempo Mejora

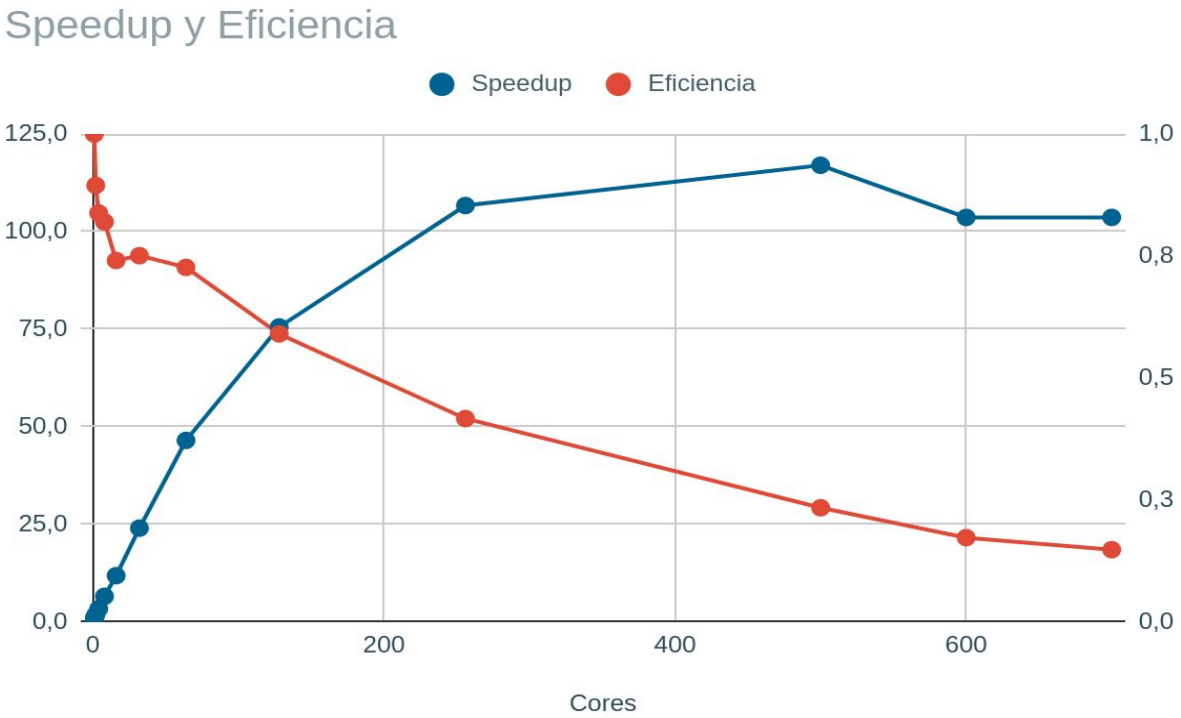
- **Eficiencia** es la métrica del uso de los recursos computacionales
  - Eficiencia = SpeedUp / Número de CPU

Procesadores	Tiempo de Ejecución	Speedup	Eficiencia
1	1:00:27	1,0	1,0
2	0:33:47	1,8	0,9
4	0:18:02	3,4	0,8
8	0:09:13	6,6	0,8
16	0:05:06	11,9	0,7
32	0:02:31	24,0	0,8
64	0:01:18	46,5	0,7
128	0:00:48	75,6	0,6
256	0:00:34	106,7	0,4
500	0:00:31	117,0	0,2
600	0:00:35	103,6	0,2
700	0:00:35	103,6	0,1

https://wiki.nlhpc.cl/Escalamiento

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Eficiencia Computacional - Speedup y Eficiencia - Gráfico



NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Uso de partición GPUS

- ¿Cómo ejecutar un programa mediante Slurm que necesite utilizar la partición gpus?
  - ¿Qué opciones existen actualmente en el Cluster?
  - ¿Qué módulos se deben cargar para utilizar la partición gpus?

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J gpu-example
#SBATCH -p gpus

#SBATCH -n 1
#SBATCH -c 1
#SBATCH --gres=gpu:1
#SBATCH --mem-per-cpu=4250

ml purge
ml fosscuda/2019b
ml NAMD/3.0alpha9
...
```

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

Enlaces de interés

Los invitamos a visitar nuestra página web:

www.nlhpc.cl

También tenemos una wiki pública con información útil:

https://wiki.nlhpc.cl/Bienvenida_NLHPC

Solicitud de cuentas de usuarios

https://solicitudes.nlhpc.cl/

Dashboard

https://dashboard.nlhpc.cl/

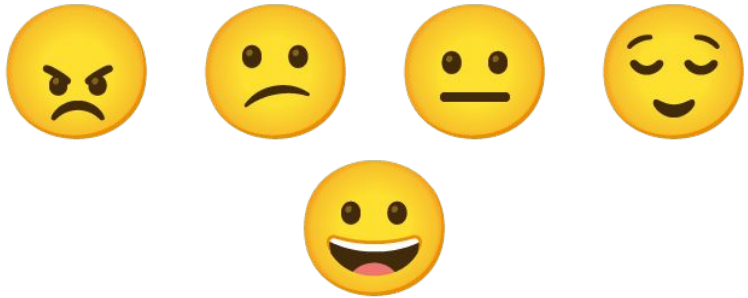
En caso de dudas, pueden escribirnos a soporte@nlhpc.cl

NLHPC
National Laboratory
for High Performance
Computing
Chile

Queremos saber tu opinión

- Encuesta de satisfacción
- Correo de agradecimiento

¿Cómo evalúa el curso recibido?



NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

NLHPC
National Laboratory for High Performance Computing Chile

¡Gracias por participar! :)

www.nlhpc.cl
2023