Introduction au Calcul à Haute Performance
Utilisation d'un cluster avec SLURM

Module de l'Ecole Doctorale SPI UCA

H. Toussaint

15 janvier 2019

Présentation générale

- Tous les TP du module ont lieu sur le cluster du LIMOS (comptes temporaires => pensez à récupérer votre travail)
- Un mésocentre accessible à tous les personnels UCA (compte créé sur demande) `https://mesocentre.uca.fr/navigation/ressources/`
- Documentation LIMOS + exemples : `http://hpc.isima.fr/`

Cluster SLURM

Accès au cluster :

- Un gestionnaire de ressources : SLURM
- Connexion en ssh sur la machine frontale uniquement
- Accès aux noeuds de calcul via SLURM

Intérêt d'un gestionnaire de ressources :

- Possibilité de réserver des ressources, mise en file d'attente si pas de ressource disponible, reproductibilité des temps de calcul (attention à l'hyperthreading)

Présentation de SLURM

Qu'est-ce que SLURM ?

- Gestionnaire de ressources et ordonnanceur de tâches
- Répartit au mieux les ressources de calcul (CPU, GPU, RAM) entre utilisateurs en gérant des files d'attente avec priorité
- Confinement des ressources (CPU notamment) : un utilisateur ne peut pas accéder aux ressources réservées par d'autres
- Documentation complète : `http://slurm.schedmd.com/`

Vocabulaire

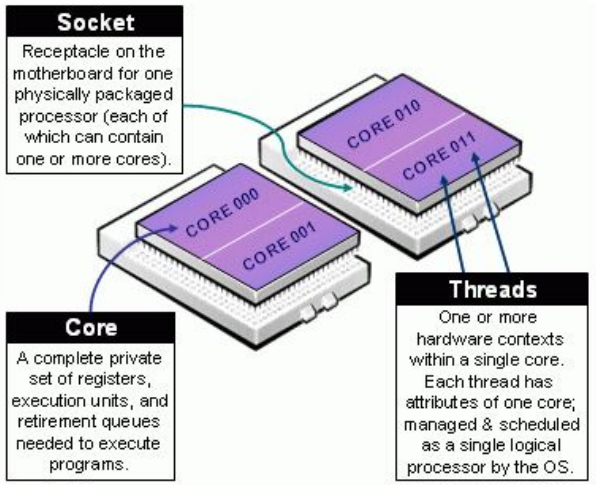


Figure : `https://slurm.schedmd.com/mc_support.html`

- Nœud de calcul (**node**) = une machine physique
- Un noeud contient des processeurs physiques (**sockets**) contenant eux-mêmes des cœurs physiques (**cores**)
- Si hyperthreading activé, chaque cœur physique donne 2 cœurs logiques (**threads**)
- Un **CPU** au sens SLURM = un cœur logique

Vocabulaire

Jobs et Tasks :

- Un **job** correspond à une requête d'allocation de ressources (CPU, RAM, temps de calcul)
- Un job est composé d'une ou plusieurs étapes (**steps**) et chaque étape effectue une tâche (**task**)
- Une task peut utiliser un ou plusieurs CPU.

Vocabulaire

Partition :

- Une **partition** dans SLURM correspond à un groupement logique de nœuds de calcul
- Chaque partition est associée à des contraintes en termes de ressources (en particulier le temps de calcul maximum d'un job)
- Une partition peut être vue comme une file d'attente

Features :

- L'administrateur peut affecter des **features** (tags) aux nœuds en fonction de leurs caractéristiques (RAM / GPU / type de processeur ...).
- L'utilisateur peut préciser les features nécessaires pour ses jobs afin que SLURM affecte les jobs uniquement aux nœuds possédant le / les features demandés.

Obtenir des informations sur le cluster

Informations sur les nœuds et les partitions :

- La commande `sinfo` affiche la liste des partitions disponibles
- La commande `sinfo -N` donne l'état des nœuds :
  - **alloc** : le nœud est entièrement utilisé
  - **mix** : le nœud est en partie utilisé
  - **idle** : aucun job ne tourne sur le nœud
  - **drain** : le nœud termine les jobs qui lui ont été soumis mais n'en accepte plus d'autres (typiquement le nœud est sur le point d'être arrêté pour une opération de maintenance)

Soumission d'un job

2 solutions :

- Définir le job dans un script et le lancer à l'aide de la commande `sbatch` (**solution conseillée**)
- Lancer directement le job en ligne de commande à l'aide de la commande `srun`

Attention : les jobs ne doivent en aucun cas s'exécuter sur le frontal (sous peine d'être tués par l'administrateur)

Soumission d'un job avec un script

- Ecriture d'un script bash (.sh)
- Possibilité de mettre des options (toutes les options sont facultatives)
- Soumission du script avec la commande `sbatch`
- SLURM attribue un numéro au job
- Quand le job est terminé un fichier `slurm-<numJob>.out` est créé par SLURM, il contient la sortie du programme

Voir exemple1.sh et exempleC

exemple1.sh

```
1  #!/bin/bash
2
3  # ========================================
4  # progamme (ligne de commande à exécuter)
5
6  hostname
```

```
[toussain@frontalhpc formationSLURMDec2017]$ sbatch exemple1.sh
Submitted batch job 19968
[toussain@frontalhpc formationSLURMDec2017]$ cat slurm-19968.out
iroise.rcisima.isima.fr
```

Ajouter des options

- Par défaut (sur le cluster du LIMOS) SLURM attribue à un job :
  - 1 CPU
  - 2Go de RAM
  - 7 jours max de temps de calcul (partition par défaut)
- On peut modifier ce comportement par défaut à l'aide d'options
- Les options sont précisées dans le script à l'aide du mot clé #SBATCH

exemple1.sh | exemple2.sh

```
1  #!/bin/bash
2
3  #=============================================================================
4  # exemples d'options
5
6  #SBATCH --partition=normal    # choix de la partition où soumettre le job
7  #SBATCH --time=10:0           # temps max alloué au job (format = m:s ou h:m:s ou j-h:m:s)
8  #SBATCH --ntasks=1            # nb de tasks total pour le job
9  #SBATCH --cpus-per-task=1     # 1 seul CPU pour une task
10 #SBATCH --mem=1000            # mémoire nécessaire (par noeud) en Mo
11
12 #=============================================================================
13 #exécution du programme
14 hostname
```

Quelques options

La commande `sbatch --help` donne une synthèse des options existantes.

Options de gestion du job

option		utilisation
-a,	--array=<indexes>	valeurs des indices pour un tableau de jobs
-e,	--error=<fic>	nom du fichier de sortie pour les erreurs
-I,	--immediate	le job est tué si les ressources ne sont pas immédiatement disponibles
-J,	--job-name=<jobname>	donne un nom au job
	--mail-type=<type>	notification par mail, type = BEGIN, END, FAIL ou ALL
	--mail-user=<user>	adresse mail à qui envoyer les notifications
-o,	--output=<out>	fichier de sortie
-t,	--time=<time>	temps max alloué au job (format = m:s ou h:m:s ou j-h:m:s)

Quelques options

option		utilisation
-c,	--cpus-per-task=<ncpus>	nombre de CPU pour une tâche
-n,	--ntasks=<ntasks>	nombre de tâches du job
	--ntasks-per-node=<n>	nombre de tâches désirées sur chaque noeud
-N,	--nodes=<N>	nombre de nœuds désirés (N = min[-max]), N = 1 par défaut
-C,	--constraint=<features>	*features* désirées (plusieurs features peuvent être spécifiées, dans ce cas les séparer par &)
	--mem=<MB>	quantité minimale de mémoire pour le job en Mo
	--mincpus=<n>	nombre minimal de CPU (coeur logique) par noeuds = nb de threads
-w,	--nodelist=<hosts>	précise les nœuds désirés (séparés par des virgules), cette liste doit contenir autant que noeuds que le nombre de noeuds réservés par l'option --nodes
-x,	--exclude=<hosts>	exclut certains nœuds de la partition (séparés par des virgules)

Voir exemple2.sh

Suivi des jobs

File d'attente :

- `squeue` affiche la liste des jobs en cours et en attente
  - `squeue -u <user>` affiche les jobs en cours et en attente pour l'utilisateur user
  - `squeue -p <nomPart>` affiche les jobs en cours et en attente pour la partition demandée
  - `squeue -i <sec>` actualise la liste des jobs en cours toutes les sec secondes

Suppression d'un job :

- `scancel <jobID>` supprime le job <jobID> (en cours ou en attente)
- `scancel -u <user>` supprime les jobs de l'utilisateur <user> (en cours ou en attente)

Suivi des jobs

Informations sur l'état d'un job :

- `sacct` affiche l'état des jobs de l'utilisateur qu'ils soient en cours ou déjà terminés :
  - **CA, cancelled** : le job a été annulé par l'utilisateur ou l'administrateur
  - **CD, completed** : le job s'est terminé avec succès
  - **CG, completing** : job en cours
  - **F, failed** : le job s'est terminé avec un échec
  - **PD, pending** : le job attend des ressources
  - **R, running** : le job est en cours d'exécution
  - **TO, timeout** : le job s'est terminé car il a atteint son temps d'exécution limite
- `scontrol show job` <jobID> donne des informations détaillées sur le job <jobID> (en cours)

Tableaux de jobs

A quoi sert un tableau de jobs ?

- Soumettre à l'aide d'un seul script plusieurs jobs indépendants.
- Utile par exemple pour appliquer le même programme à différentes données d'entrée

Comment le définir ?

- A l'aide de l'option `--array=indiceMin-indiceMax`

Remarque : soyez parcimonieux dans vos demandes d'allocation.

Tableaux de jobs : exemple

Contexte :

- On dispose de 10 instances : insA.txt à insJ.txt
- On souhaite exécuter le programme exe sur chacune de ces instances

Voir le dossier `exempleTableau`

exemple3.sh | test.c | submit.sh

```
1  #!/bin/bash
2
3  #================= OPTIONS (s'applique à chaque job du tableau) ==================
4  #SBATCH --array=0-9              # création d'un tableau de 10 jobs indicés de 0 à 9
5  #SBATCH --ntasks=1               # chaque job possède une seule task
6
7  #========================== execution ================================
8  tab=(A B C D E F G H I J)
9  ./exe ins${tab[$SLURM_ARRAY_TASK_ID]}.txt
```

On lance le script de la manière habituelle avec `sbatch`.
SLURM attribue à chaque job du tableau à un identifiant propre constitué du numéro du job principal et de son indice dans le tableau

Variables d'environnement

Les variables d'environnement peuvent être utilisées dans les scripts pour afficher des informations sur le job :

- `SLURM_JOB_ID` : numéro du job
- `SLURM_JOB_NAME` : nom du job
- `SLURM_JOB_NUM_NODES` : nombre total de nœuds alloués pour le job
- `SLURM_SUBMIT_DIR` : répertoire à partir duquel le job est soumis
- `SLURMD_NODENAME` : nom du nœuds sur lequel le job s'exécute
- `SLURM_JOB_PARTITION` : nom de la partition sur laquelle le job s'exécute

Variables d'environnement

Exemple d'utilisation :

exemple3.sh

```
1  #!/bin/bash
2
3  # ================================================
4  # OPTIONS
5  #SBATCH --job-name=testVarEnv
6
7  # ================================================
8  # progamme (ligne de commande à exécuter)
9  echo mon job $SLURM_JOB_NAME, num $SLURM_JOB_ID,
10 echo "s'execute" dans la partition $SLURM_JOB_PARTITION sur le noeud $SLURMD_NODENAME
11 hostname
12 sleep 60
```

Variables d'environnement

D'autres variables sont liées aux tableaux de jobs :

- `SLURM_ARRAY_JOB_ID` : numéro du job principal
- `SLURM_ARRAY_TASK_ID` : indice de la tâche dans le tableau
- `SLURM_ARRAY_TASK_COUNT` : nombre total de tâches dans un tableau de jobs
- `SLURM_ARRAY_TASK_MAX` : indice max du tableau de jobs
- `SLURM_ARRAY_TASK_MIN` : indice min du tableau de jobs

Scripts pour programme multithread

Mémoire partagée (type openMP)

- une task ...
- ... qui utilise plusieurs CPU

Voir l'exemple dans le dossier `exempleOpenMP`

exemple3.sh | test.c | submit.sh | submit.sh | prodMatriciel_parallelfor.c

```
1  #!/bin/bash
2
3  #=======================  OPTIONS de sbatch ====================================
4  #SBATCH --job-name=openMP
5  #SBATCH --ntasks=1                # on a une seule tache, elle utilise 8 coeurs (mémoire partagée)
6  #SBATCH --cpus-per-task=8         # Allocation de 8 CPU
7  #SBATCH --mem-per-cpu=10240       # RAM par CPU (en Mo)
8
9  #SBATCH --partition=court
10 #SBATCH --nodelist=dellware
11
12 #SBATCH --time=2:00
13
14 #=======================  programme a executer=================================
15 ./exe
```

Scripts pour programme multithread

Mémoire partagée (type openMP)

Pour avoir de bonnes performances :

- Le nombre de threads utilisés par openMP ne doit pas excéder le nombre de CPU réservé par SLURM

Attention aux librairies "multithreadées" :

- Certaines utilisent par défaut autant de threads que de cœurs disponibles (Cplex par exemple)
- Il faut toujours leur imposer un nombre de threads max $\leq$ au nombre de CPU réservé par SLURM (sinon perte de performances)

Scripts pour programme multiprocessus

Mémoire distribuée (type MPI)

Pour un programme à mémoire distribuée on a :

- n tasks ($\approx n$ processus)
- Possibilité de distribuer les tasks sur plusieurs nœuds d'une même partition
- Bonne pratique : attribuer 1 task par CPU

Voir le dossier `exempleMPI` (attention modif à faire dans le `.bashrc`).

submit.sh

```
1  #!/bin/bash
2
3  # REMARQUE : SLURM distribue automatiquement les processus de MPI
4  #sur les noeuds -> inutile de préciser l'option -np
5
6  #SBATCH --ntasks=20
7  #SBATCH --ntasks-per-core=1
8  #SBATCH --job-name=testMPI
9
10 mpirun ./hello
```

Les shells interactifs

On peut utiliser un job SLURM pour ouvrir un shell interactif (i.e. une session bash) sur un noeud.

Utilité :

- Débogage
- Compilations longues
- Programmes nécessitant une interaction avec l'utilisateur
- Suivre la consommation CPU / RAM en temps réel (commande `top` ou `htop`)

Important : Pensez toujours à bien quitter la session interactive à l'aide de la commande **exit** pour éviter de laisser des ressources oisives et indisponibles pour les autres utilisateurs.

Les shells interactifs

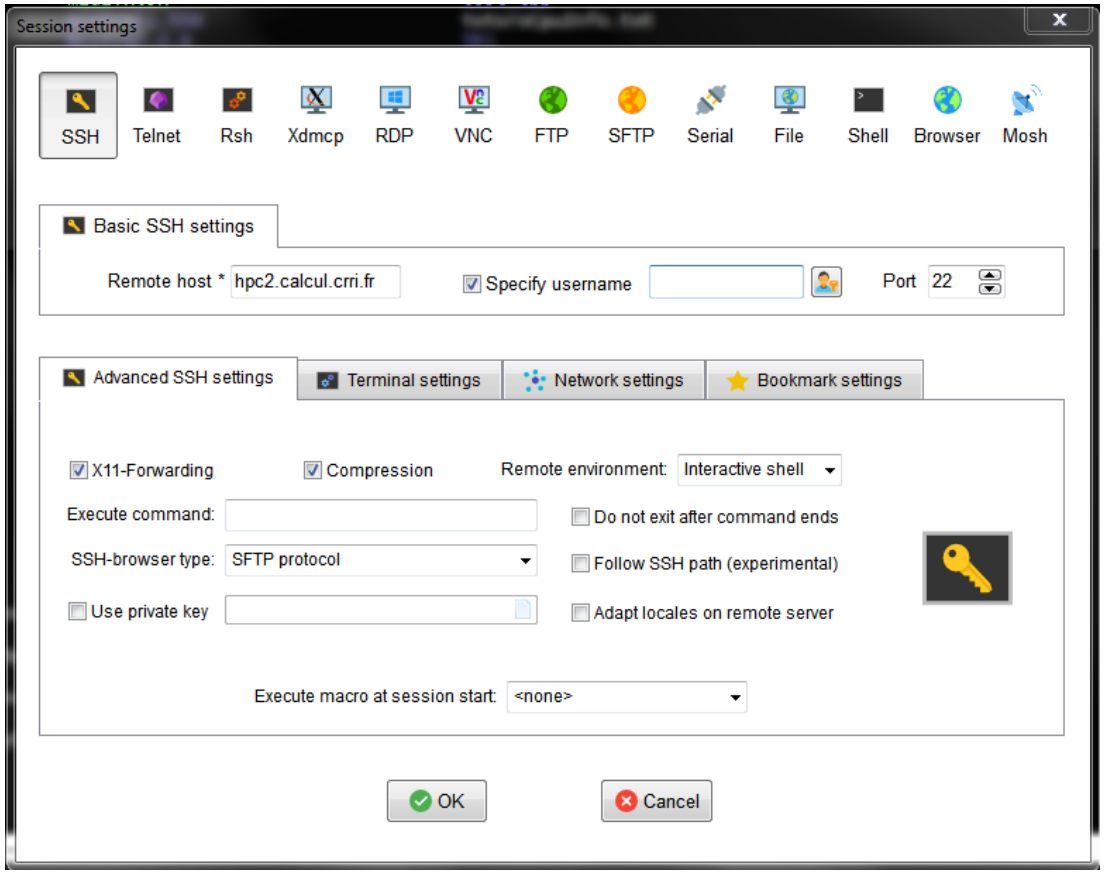
Demander un shell interactif :

- En ligne de commande
- Commande basique : `srun --pty bash`
- Possibilité d'ajouter des options (les mêmes que dans les scripts)
- Exemple : `srun --ntasks=1 --cpus-per-task=2 --partition=court --pty bash`

Important : Pensez toujours à bien quitter la session interactive à l'aide de la commande **exit** pour éviter de laisser des ressources oisives et indisponibles pour les autres utilisateurs.

Accès au cluster du mésocentre

- Accès au cluster du mésocentre (après création du compte !) :
  - connexion en ssh depuis linux
  - utilisation d'un client ssh depuis windows (putty, mobaXterm, Secure Shell, ...)



Modules (disponibles uniquement au mésocentre)

- Permet de charger un environnement de travail avec des librairies spécifiques (boost, MPI, ...) : modifie les variables d'environnement (PATH, . . .)

Quelques commandes :

- `module list` : liste les modules actifs
- `module avail` : liste les modules disponibles
- `module spider` : liste les modules disponibles (+ détaillé)
- `module load <nomDuModule>` : charge le module

Exercices

1. Créer un script qui permet de lancer la commande hostname sur les nœuds 22 à 26 et qui écrit un fichier de sortie par noeud de la forme node*i*.out où *i* est le numéro du nœud
2. Créer un script qui lance la commande hostname sur kephren
3. paramétrer le scipt MPI pour lancer le plus de processus possible
4. ouvrir un shell intercatif sur kephren permettant d'exécuter un programme nécessitant 10 Go de RAM et 4 CPU