

HPCvLAB - Primeiros Resultados no Centro de Competências de Lisboa

Thales Silva

GoLP / Instituto de Plasmas e Fusão Nuclear
Instituto Superior Técnico, Universidade de Lisboa,
Lisbon, Portugal

epp.tecnico.ulisboa.pt || golph.tecnico.ulisboa.pt



LABORATÓRIO VIRTUAL
DE HIGH PERFORMANCE COMPUTING

HPCvLAB



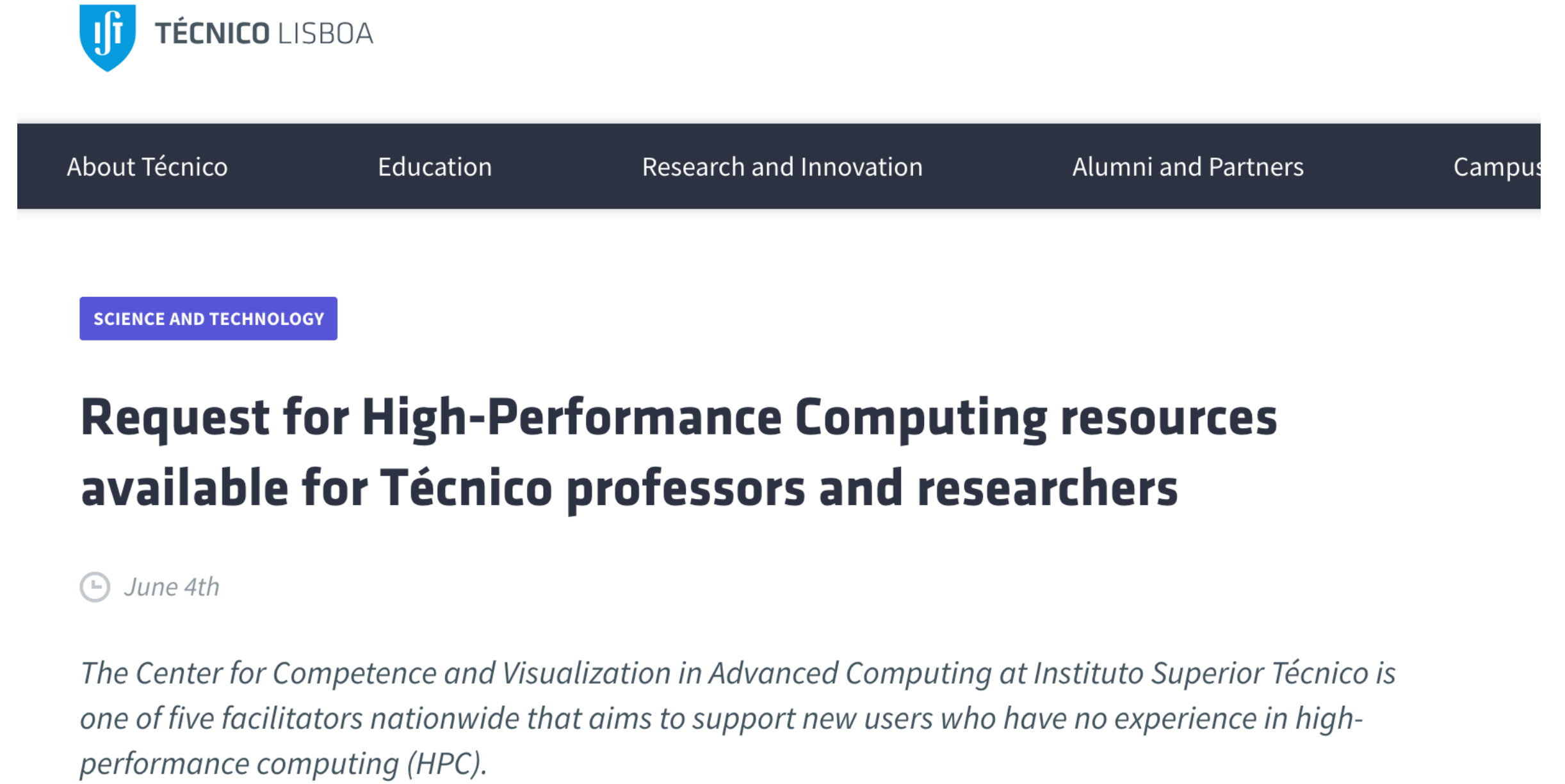
- Escrever uma proposta para HPC não é trivial (especialmente a primeira)
 - Informações técnicas (quantos cores vais precisar por simulação? Qual a memória necessária? Quais softwares são necessários? I/O.)
 - Descrever o software. Testes de escalabilidade. Benchmarks.
- Uso do HPC também não é trivial
 - Maior parte dos desktops e laptops usam Windows (~75%)
 - Muitos conceitos novos: modules, slurm (ou outros schedulers)
 - Documentação muito técnica
- **HPCvLAB: programa da RNCA que visa**
 - Facilitar o acesso a centros de HPC
 - Ajudar novos usuários no seu primeiro acesso.

Facilitar o acesso a centros de HPC

- No nosso caso: preencher um form com informações básicas.
- Divulgação no site do Técnico
- Tratamos de pedir a nova conta ao centro de HPC (Cirrus@INCD).
- Conta criada em alguns dias — acesso quase imediato.

Ajudar novos usuários no seu primeiro acesso.

- Disponibilidade para contacto direto conosco.
- Uma aula de introdução à HPC (2h de duração, ~10 utilizadores). Foram cobertos desde conceitos básicos até exemplos de códigos simples para serem compilados e correr durante a aula.



Ideia principal: explicar os conceitos básicos, mas também ajudar os participantes a correr seus primeiros códigos em paralelo no supercomputador

I have logged-in in the supercomputer. Now what?



```
#####  
#  
# NCG INGRID Public Login Service  
# ingrid.helpdesk@lip.pt  
#  
# Auto logout after 12 hours with no activity  
#  
# https://wiki.incd.pt/books/manage-jobs/chapter/manage-slurm-jobs  
#  
# Max  
# PARTIT. NODES CORES NODETYPE  
# hpc* 13 1728 AMD EPYC 7643 (default )  
# fct 13 1728 AMD EPYC 7643 (reserved)  
# short 18 36 AMD EPYC 7643 (30 min. max.)  
# gpu 2 192 AMD EPYC 7643 + NVidia A100  
# gpu 2 192 AMD EPYC 7552 + NVidia Tesla V100s + Tesla T4  
# gpu 2 192 AMD EPYC 7552 + NVidia Tesla T4 + Tesla T4  
#  
# 01-04-2024: AlmaLinux 8 is now the official cluster  
# old cluster user interface based on CentOS 7 available on:  
# cirrus7.a.incd.pt  
#####  
[tsilva@cirrus09 ~]$
```

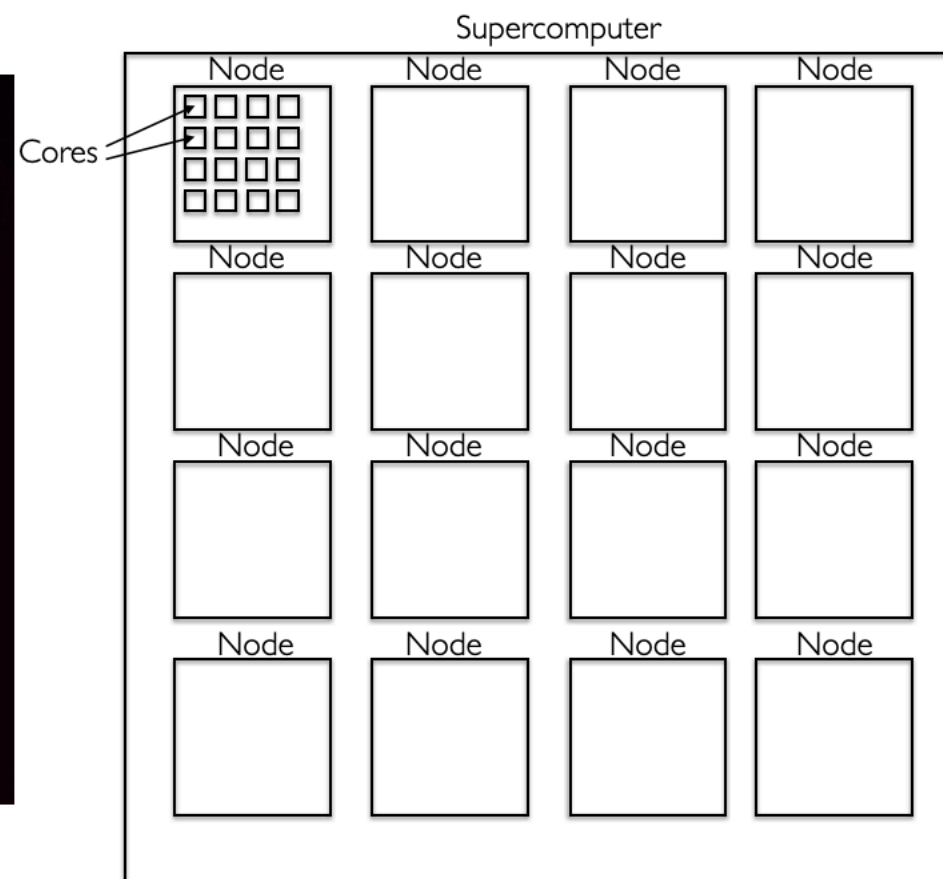
- You may find some basic compilers or softwares readily available (e.g., gcc, gfortran, and python).
- Usually these are older versions of these compilers or softwares.
- How can I access newer version to these and other software not available immediately?

Modules!

Simplified explanation of nodes and cores



```
#!/bin/bash  
#SBATCH --job-name=MyFirstSlurmJob  
#SBATCH --time=0:10:00  
#SBATCH --partition=hpc  
#SBATCH --error=err.job.%j  
#SBATCH --output=out.job.%j  
#SBATCH -D .  
#SBATCH --nodes=1  
#SBATCH --ntasks-per-node=2  
#SBATCH --cpus-per-task=2  
  
export OMP_NUM_THREADS=$SLURM_CPUS_PER_TASK  
  
module purge  
module load gcc-13.2  
module load gcc13/openmpi/4.1.6  
  
srun ./hybrid  
  
exit
```



Cirrus is a supercomputer

Cirrus has 50 nodes

Each node in cirrus has 96 cores

Total number of cores: 4800

Now I know how to load compilers and softwares. But how do I run the code?



Overview

Slurm is an open source, fault-tolerant, and highly scalable cluster management and job scheduling system for large and small Linux clusters. Slurm requires no kernel modifications for its operation and is relatively self-contained. As a cluster workload manager, Slurm has three key functions. First, it allocates exclusive and/or non-exclusive access to resources (compute nodes) to users for some duration of time so they can perform work. Second, it provides a framework for starting, executing, and monitoring work (normally a parallel job) on the set of allocated nodes. Finally, it arbitrates contention for resources by managing a queue of pending work. Optional plugins can be used for [accounting](#), [advanced reservation](#), [gang scheduling](#) (time sharing for parallel jobs), backfill scheduling, [topology optimized resource selection](#), [resource limits](#) by user or bank account, and sophisticated [multifactor job prioritization](#) algorithms.

In practice: you need to construct a file that will tell the supercomputer how much resources you need and what is the code you are running!

Exercise: C code that sum all components of an array



- Serial code
 - MPI parallelisation
 - openMP parallelisation
 - Hybrid (MPI+openMP)
- Upload, copy paste, or ... the file code_mpi.c and job.sh to a new folder in your main folder at cirrus
 - Load the modules: gcc-13.2 and gcc13/openmpi/4.1.6
 - Compile the code with: `$ mpicc -o code_mpi code_mpi.c`
 - Modify the job.sh file such that you request 2 (or more) "tasks" and one "cpu"
 - Remember that if you ask for more than 2 tasks, you need to run in the "hpc" partition, as the "short" has a limit of two cores.
 - Load the correct modules in the job.sh file and run the appropriate code you compiled (in the example, it was named "code_mpi")
 - Run the code by using `$ sbatch job.sh`

“Aprende-se quando se faz”

- Cerca de 29 usuários/requests (em 5 meses): 27 aceites
- ~55% nunca haviam usado HPC anteriormente
- Diferente categorias de participantes (aqui vem minha impressão pessoal)
 - Curiosos
 - Interessados, mas que o impacto de HPC na investigação não é tão grande a ponto de gastarem tempo significativo a aprender ou bastante ocupados
 - Interessados e que HPC pode ter um impacto grande na investigação
- Principal questão recebida: “Minha simulação não começou e já faz X horas/dias, será que há algum problema?”
- Um caso de grande sucesso

- Pedidos
 - Permitir acesso ao Deucalion através do HPCvLAB.
 - Permitir acesso temporário para aprendizagem de HPC.
- Planos
 - Melhor planeamento do calendário para incluir mais aulas de HPC.
 - Expandir as aulas para alunos e outros que queiram aprender a usar sistemas de HPC.
 - Desenvolver módulo de aprendizagem online/assíncrono para acelerar aprendizagem/diminuir esforço com aulas/tutoriais (caso exista financiamento para tal)
 - Expandir a divulgação para outras universidades da região de Lisboa.
 - Focar a divulgação de forma atrair usuários cujo impacto de HPC na investigação pode ser substancial

Obrigado pela atenção!