

# C2115

# Praktický úvod do superpočítání

VIII. lekce

Petr Kulhánek, Tomáš Bouchal

[kulhanek@chemi.muni.cz](mailto:kulhanek@chemi.muni.cz)

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta,  
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

# Dávkové systémy

# Dávkové zpracování

**Dávkové zpracování** je vykonávání série programů (tzv. dávek) na počítači bez účasti uživatele. Dávky jsou připraveny předem, takže mohou být zpracovány předány bez účasti uživatele. Všechna vstupní data jsou předem připravena v souborech (skriptech) nebo zadána pomocí parametrů na příkazovém řádku. Dávkové zpracování je opakem interaktivního zpracování, kdy uživatel až teprve za běhu programu poskytuje požadované vstupy.

## Výhody dávkového zpracování

- sdílení zdrojů počítače mezi mnoha uživateli a programy
- odložení zpracování dávek do doby, kdy je počítač méně vytížen
- odstranění prodlev způsobeným čekáním na vstup od uživatele
- maximalizace využití počítače zlepšuje využití investic (zejména u dražších počítačů)

zdroj: [www.wikipedia.cz](http://www.wikipedia.cz), upraveno

# Nástroje pro dávkové spouštění

➤ **OpenPBS**

<http://www.mcs.anl.gov/research/projects/openpbs/>

➤ **PBSPro**

<http://www.pbsworks.com>

➤ **Oracle Grid Engine**

<http://www.oracle.com/us/products/tools/oracle-grid-engine-075549.html>

➤ **Open Grid Scheduler**

<http://gridscheduler.sourceforge.net/>

➤ **Torque**

<http://www.adaptivecomputing.com/products/open-source/torque/>

# Nástroje pro dávkové spouštění

➤ **OpenPBS**

<http://www.mcs.anl.gov/research/projects/openpbs/>

➤ **PBSPro**

<http://www.pbsworks.com>

➤ **Oracle Grid Engine**

<http://www.oracle.com/us/products/tools/oracle-grid-engine-075549.html>

➤ **Open Grid Scheduler**

<http://gridscheduler.sourceforge.net/>

**open source**

➤ **Torque**

<http://www.adaptivecomputing.com/products/open-source/torque/>

# Nástroje pro dávkové spouštění

➤ **OpenPBS**

<http://www.mcs.anl.gov/research/projects/openpbs/>

➤ **PBSPro**

<http://www.pbsworks.com>

➤ **Oracle Grid Engine**

<http://www.oracle.com/us/products/tools/oracle-grid-engine-075549.html>

➤ **Open Grid Scheduler**

<http://gridscheduler.sourceforge.net/>

**open source**

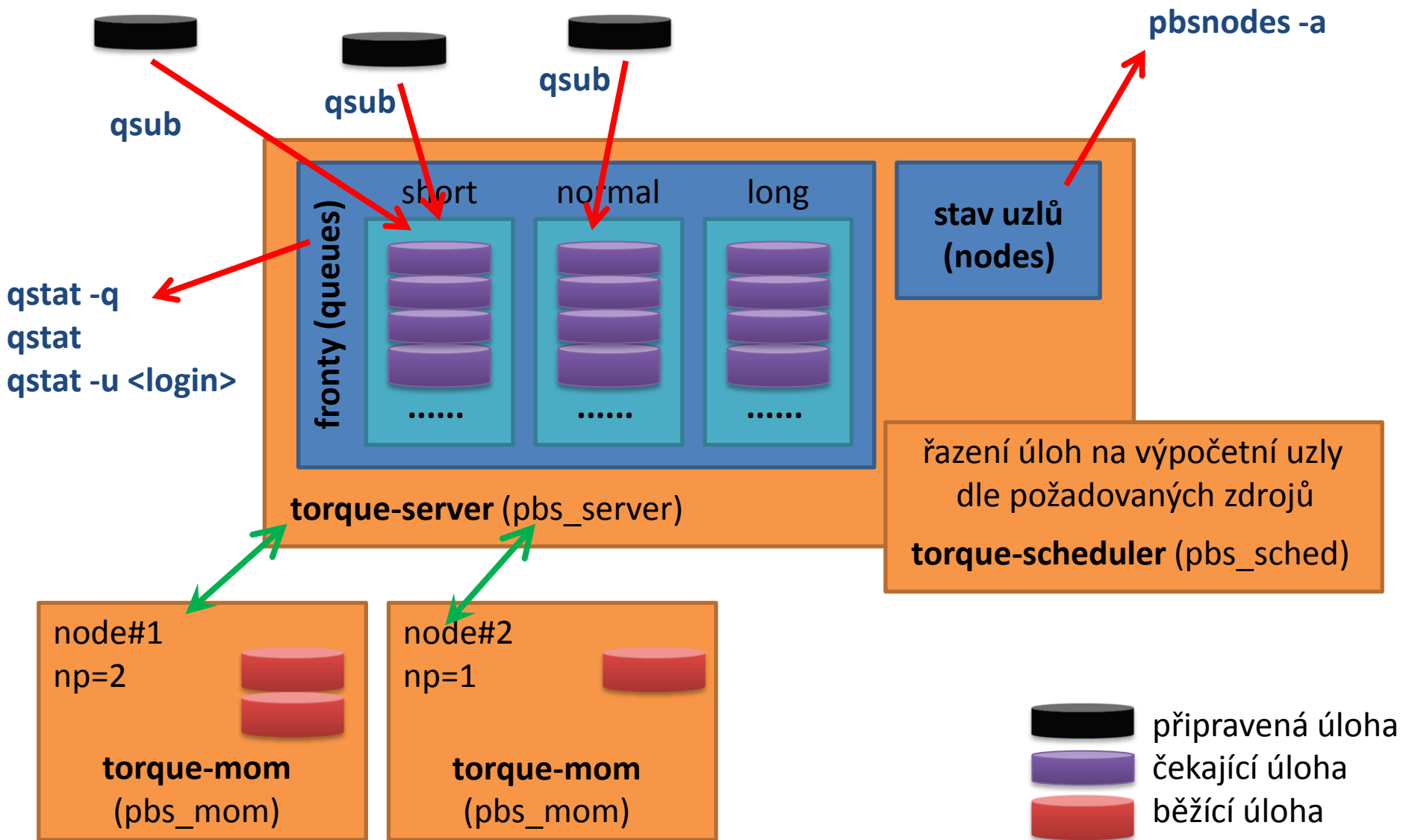
➤ **Torque**

<http://www.adaptivecomputing.com/products/open-source/torque/>

je použit jako dávkový systém v MetaCentrum VO, na klastrech SOKAR a WOLF

# Torque

# Architektura





# Přihlašování bez hesla

Mezi výpočetními uzly a serverem (a naopak) je nutné nastavit přihlašování pomocí ssh bez explicitního zadávání hesla.

- pouze na klastrech NCBR

# Zadáváme úlohy

K zadávání úloh do dávkového systému se používá příkaz **qsub**.

```
$ qsub -q normal uloha.sh  
1.ubuntu
```

jméno fronty, do které  
chceme úlohu zařadit

skript úlohy, např.

```
#!/bin/bash  
echo "Hello world from `hostname`!"
```

příkaz vypíše ID úlohy, pokud  
zařazení proběhne v pořádku

```
$ ls  
uloha.sh uloha.sh.o1 uloha.sh.e1
```

soubory jsou  
dostupné až po  
skončení úlohy

standardní výstup  
úlohy

standardní chybový  
výstup úlohy

# Požadavky na zdroje

Volba -l

Procesory:

nodes=N[:ppn=M[:properties]]

nodes=name[:ppn=M]

Paměť:

mem=value

Doba běhu:

walltime=value

# Cvičení LVIII.1

1. Jaké systémové proměnné začínající písmeny PBS jsou dostupné pro běžící úlohu na klastru WOLF?
2. Jaké systémové proměnné začínající písmeny TORQUE jsou dostupné pro běžící úlohu na klastru WOLF?
3. Napište skript, který vypíše seznam přidělených uzlů a počet CPU. Úlohu spusťte na
  1. jednom CPU
  2. na dvou CPU na jednom uzlu
  3. na osmi CPU na jednom uzlu
  4. na dvou uzlech na každém používající 1 CPU
  5. na dvou uzlech na každém používající 2 CPU
  6. na uzlu wolf04.wolf.inet a používajícím 1 CPU
  7. na uzlu wolf04.wolf.inet a používajícím 2 CPU
  8. na uzlu wolf04.wolf.inet a používajícím 2 CPU
  9. na uzlech s vlastností stereo a používající 2 CPU

1. Napište skript, který spustí OpenMP verzi programu integral. Úlohu postupně zařadíte do dávkového systému klastru WOLF s požadavkem na 1, 2, 3 a 4 CPU.
2. Napište skript, který spustí MPI verzi programu integral. Úlohu postupně zařadíte do dávkového systému klastru WOLF s požadavkem na 1, 2, 3 a 4 CPU a poté na 1, 2, 3 a 4 uzly, kde na každém bude použit 1 CPU.
3. Monitorujte vytížení vaší pracovní stanice (příkaz top v samostatném terminálu).
4. Monitorujte zadané úlohy na klastru WOLF (příkaz qstat) a obsazenost jednotlivých uzlů (pbsnodes -a, pnodes).

# Cvičení LVIII.2

1. Jaké systémové proměnné začínající písmeny PBS jsou dostupné pro běžící úlohu v Metacentru (Torque: arien)?
2. Jaké systémové proměnné začínající písmeny TORQUE jsou dostupné pro běžící úlohu v Metacentru (Torque: arien)?
3. Jaké systémové proměnné začínající písmeny PBS jsou dostupné pro běžící úlohu v CERIT-SC (Torque: wagap)?
4. Jaké systémové proměnné začínající písmeny TORQUE jsou dostupné pro běžící úlohu v CERIT-SC (Torque: wagap)?
5. Dle dokumentace na stránkách MetaCentra připravte skript pro úlohu v gaussianu, vstupní soubor naleznete v adresáři Lesson08/gaussian.
6. Skript konzultujte s vyučujícím.
7. Úlohu spusťte na 1 CPU.
8. Úlohu spusťte na 4 CPU na stejném klastru.
9. K jakému urychlení výpočtu dojde při použití 4 CPU?