

12. Metacentrum

E3101 Úvod do matematického modelování



Návod na výpočet v Metacentru

Metacentrum



- Virtuální organizace MetaCentrum (Metavo) je tzv. „catch-all“ virtuální organizace sdružující všechny uživatele registrované v MetaCentru.
- MetaVO je otevřená všem akademickým pracovníkům, zaměstnancům a studentům vědeckovýzkumných institucí v České republice.
- Uživatelé registrovaní v MetaVO mají možnost bezplatného využití výpočetní a úložné kapacity a řady aplikačních programů jako jsou Matlab, Maple, R, Gaussian...
- Všichni studenti Masarykovy univerzity mají registraci zdarma.
- <https://metavo.metacentrum.cz/>

Metacentrum



- V současné době jsou hlavními středisky MetaCentra: MU, UOCHB, ZČU, JČU, AVČR, ČVUT a CESNET.



Návod na spuštění úloh v Metacentru (klasika)



- Nejprve je třeba umístit soubory dat a skriptů na server Metacentra (např. přes WinSCP):
 - Hostname: *skirit.ics.muni.cz*
 - User name: *xUČO* (nebo jiné zvolené při registraci)
 - Password: vaše zvolené heslo
- Na serveru již máte vlastní složku (na více serverech, třeba na */auto/brno2/home/-* i jinde, ale tady by nemělo dojít k žádným problémům, pak lze psát napevno adresu *brno2/home/*).
- Nahrávat je třeba: soubor s daty, skript (R nebo Maple) a shell skript pro spuštění úlohy.

Návod na spuštění úloh v Metacentru (klasika)



- Pro spuštění skriptu (Maple, R) je potřeba mít napsaný jednoduchý skript v shellu bash. Skript lze napsat ve vhodném textovém editoru a poté přepsat příponu na .sh. Např. pro úlohu v R:

- `#!/bin/bash`
- *#inicializace modulu R*
- *module add R*
- *#nastaveni adresare, kde mam skript a data*
- *cd /auto/brno2/home/x150824/Bi3101/*
- *#predani vstupnich dat programu R*
- *R --save < pi.R*

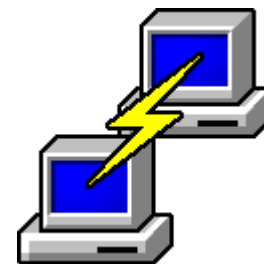
Tzv. shebang informující shell, že má následující text interpretovat v programu bash.

Nastavení módu, ve kterém běží R, pokud není interaktivní.
--save, --no-save, --vanilla

Návod na spuštění úloh v Metacentru (klasika)



- Pro samotné spuštění skriptu je třeba se připojit k serveru. Přihlašovací údaje jsou stejné jako v předchozím kroku:
 - Hostname: *skirit.ics.muni.cz*
 - Login as: *xUČO (nebo jiné zvolené při registraci)*
 - Password: primární IS
- Pro připojení k serveru z prostředí Windows je třeba mít vhodný program – ideálně putty.exe.



Návod na spouštění úloh v Metacentru (klasika)



- V dalším kroku je vhodné otevřít screen, pro přístup k výpočtům i po zavření okna:
 - *screen* (zapne se po zadání příkazu do putty)
 - výpis seznamu existujících screenů: *screen -ls*
- výběr okna screenu: screen s popiskem *Attached* je aktivní, a v něm poběží následně spuštěný výpočet.
- Lze otevřít i jiné okno screenu, přenastavit pomocí *screen -r číslo_screenu*

Návod na spuštění úloh v Metacentru (klasika)



- Ověření dostupných zdrojů na webu metacentra <http://metavo.metacentrum.cz/>
 - záložka Stav zdrojů -> Osobní pohled - v Sestavovači příkazu `qsub` na této stránce je třeba navolit svoje požadavky na výpočet a vygenerovat sekvenci příkazu `qsub`, např.:
- *`qsub -l walltime=1d -l mem=60gb -l scratch=2gb -l nodes=1:ppn=1:x86_64:linux:brno`*
- *(úloha poběží maximálně 1 den s alokovanou pamětí 60gb, na jednom uzlu, 1 procesoru)*

Návod na spouštění úloh v Metacentru (klasika)



- Pod vygenerovaným příkazem qsub je napsáno, jestli aspoň jeden stroj odpovídá mým požadavkům.
- Pokud ano, pokračuji dál.
- Pokud ne, můžu zkusit pokračovat dál, pokud jsou jen stroje aktuálně zabrané někým jiným – můj požadavek se vloží do fronty a po uvolnění zdrojů se sám spustí. Jinak můžu přehodnotit požadavky nebo požádat administrátory o přidělení vyšší priority.

Návod na spuštění úloh v Metacentru (klasika)



- Spuštění úlohy se provede příkazem `qsub` nakopírovaným ze sestavovače.
- Na konec je třeba připsat název shell skriptu s příponou `.sh`, který spustí Maple a Maplový skript s výpočtem.
 - `qsub -l walltime=1d -l mem=60gb -l scratch=2gb -l nodes=1:ppn=1:x86_64:linux:brno ulohaR.sh`
- Putty vypíše název spuštěné úlohy a jméno serveru, na kterém běží. Lze sledovat online na webu Metacentra.
- Po kliknutí na název stroje jsou dostupné podrobnosti o běhu úlohy, např. dokdy se nejpozději ukončí.

Návod na spuštění úloh v Metacentru (klasika)



úloha ↓	CPU vyhrazen.	paměť	použitá paměť	jméno	CPU čas	čas běhu	stav	stroj/cpu	fronta	čas vytvoření
7757201.arien.ics.muni.cz	1	60gb	89mb	ulohamaplempi.sh	00:00:02	00:31:33	R - běží	mandos2/63	q_1d	20.1.15 16:08

- Spuštěné úlohy jsou pro každého uživatele dostupné na adrese:

http://metavo.metacentrum.cz/pbsmon2/user/moje_slozka

Návod na spouštění úloh v Metacentru (nově)



- Nově lze spustit na Metacentru GUI (Graphical User Interface). Nejprve je nutné použít qsub a poté spustit samotný GUI za použití příkazů např.:

```
qsub -l -l select=1:ncpus=2:mem=30gb:scratch_local=40gb -l  
walltime=1:00:00  
module add gui  
gui start
```
- Příkaz poskytne URL adresu, kterou stačí zkopírovat do okna prohlížeče a rovnou v něm interaktivně pracovat.

Návod na spuštění úloh v Metacentru (nově)



- Pro spuštění Rstudia a interaktivní práci v něm je k dispozici specifický příkaz:
qsub
/cvmfs/singularity.metacentrum.cz/RStudio/RStudio4.1.2_Job.sh
- Tento příkaz spuštěný z příkazové řádky (např. pomocí Putty.exe) otevře Rstudio přímo ve webovém prohlížeči.
- Po skončení práce je třeba uzavřít pomocí příkazu *qdel*, nestačí jen zavřít okno. Např.:
qdel 19184310.meta-pbs.metacentrum.cz