

Formation

Utilisation du cluster

centre de calcul mutualisé LEM3/LEMTA/LCFC/GIP-InSIC

www.lem3.fr/cluster

3) Le centre de calcul

Sommaire

- 1) Présentation du cluster
- 2) Connexion au centre de calcul
- 3) Soumission d'un job
- 4) Gestion / suivi du calcul

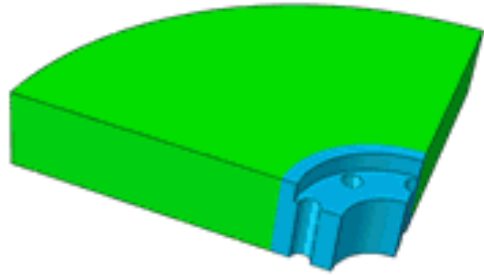
Présentation du cluster

- Localisation : salle C140 CIRAM - Technopôle
- Gestion par le LEM3
 - Réseau informatique : Julien Oury
 - Responsabilité scientifique : Boris Piotrowski (50 %)
 - Gestion technique : Sylvain Pagura
- Equipement
 - 29 nœuds R410 : 8 cœurs par nœud (ppn=8) (2XQuad-core ; 2,93 GHz ; 24 Gb RAM)
 - 9 nœuds R610 : 12 cœurs par nœud (ppn=12) (2XSix-core ; 3,33 GHz ; 32 à 48 Gb RAM)
 - Baies de stockage 25 To + Back Up / Réseau infiniband
- Logiciels principalement utilisés
 - Abaqus 6.7-1, 6.11-2, 6.12-3
 - Matlab R2012a
 - Vasp / Forge Cluster / Forge 2011
 - Compilateurs Fortran/Intel

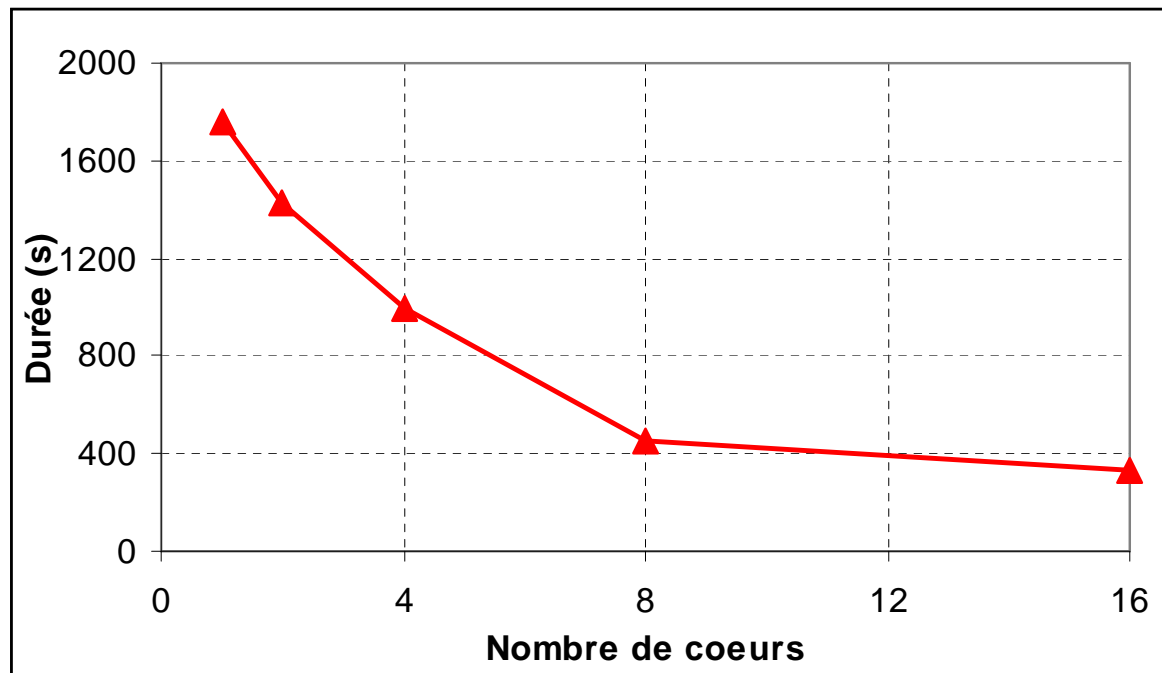
Performances : Benchmarks

- Abaqus/Standard Benchmark Problems
 - S2: Volant avec charges centrifuges
 - S5: Ouverture de stent
 - S6: Empreinte de pneu
- Abaqus/Explicit Benchmark Problems
 - E1: Car crash
 - E4: Pénétration d'un projectile
 - E5: Plaque soumise à une charge soufflée
- Comparaisons avec autres clusters

Benchmarks - S2b : Volant avec charges centrifuges

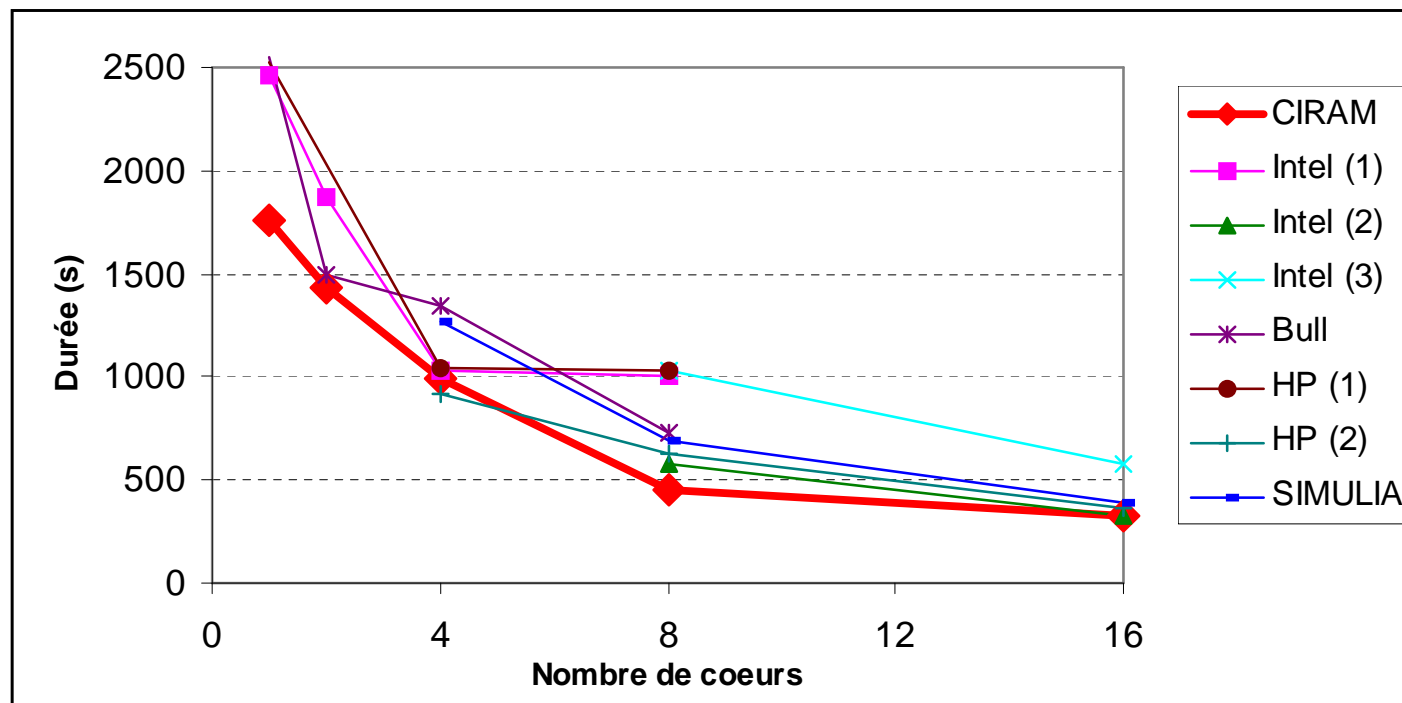


- Analyse statique non-linéaire
- Éléments C3D8R
- Comportement élastoplastique
- Ecrouissage isotrope
- Pas de contact

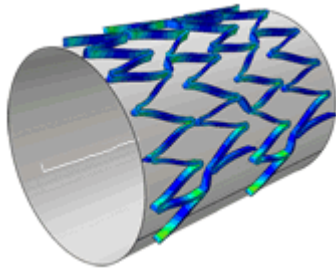


Benchmarks - S2b : Volant avec charges centrifuges

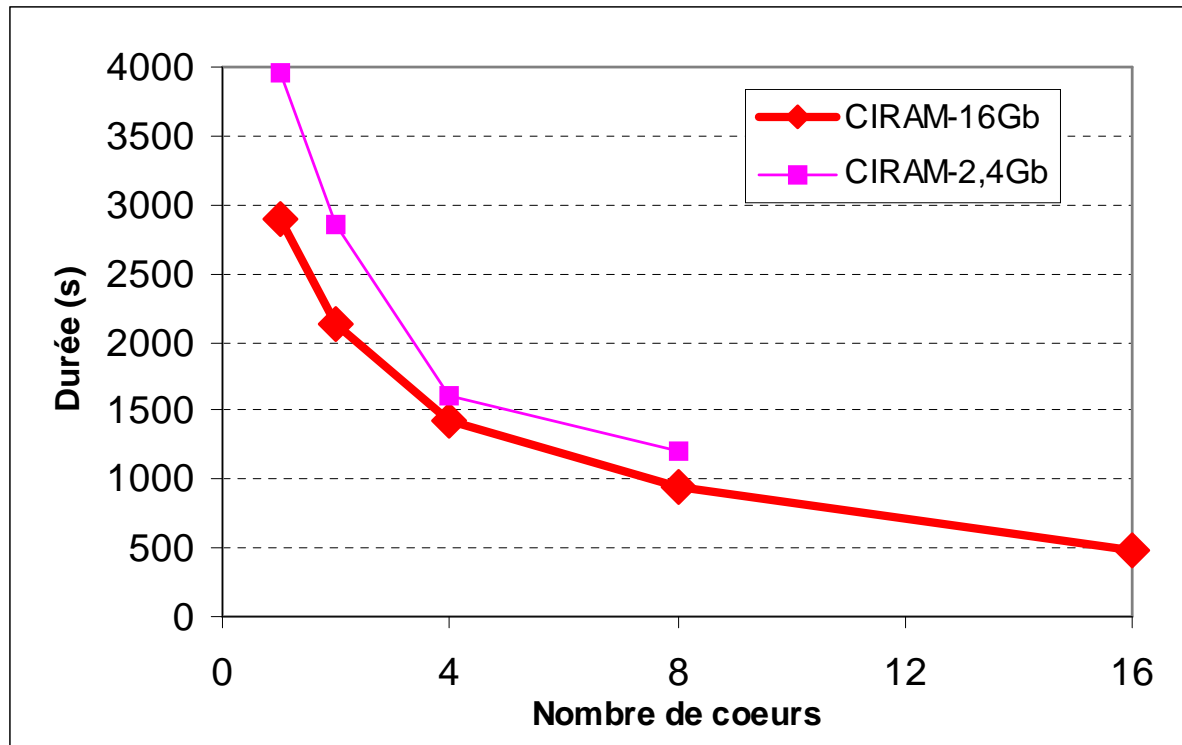
durée (s)	fréquence	mémoire/nœud	standard memory	ppn	Connexion	1	2	4	8	16
CIRAM	2,93 GHz	24 Gb DDR 1033 Hz	2048 MHz	8	infiniband	1760	1427	995	455	330
Intel (1)	3,0 GHz	16 Gb dimms	12800	8		2467	1874	1024	1010	
Intel (2)	3,2 GHz	16 Gb	15000	4 (8)	SilverStorm 9080 DDR				577	323
Intel (3)	3,2 GHz	16 Gb	15000	8 (8)	SilverStorm 9080 DDR				1032	572
Bull	3,0 GHz	16 Gb	16000		infiniband	2544	1493	1339	724	
HP (1)	3,0 GHz	32 Gb	24576	8		2526		1043	1032	
HP (2)	2,3 GHz	16 Gb	12288	8	infiniband			923	629	366
SIMULIA	3,0 GHz	8 Gb	6500	4	infiniband			1272	694	385



Benchmarks – S5 : Ouverture de stent



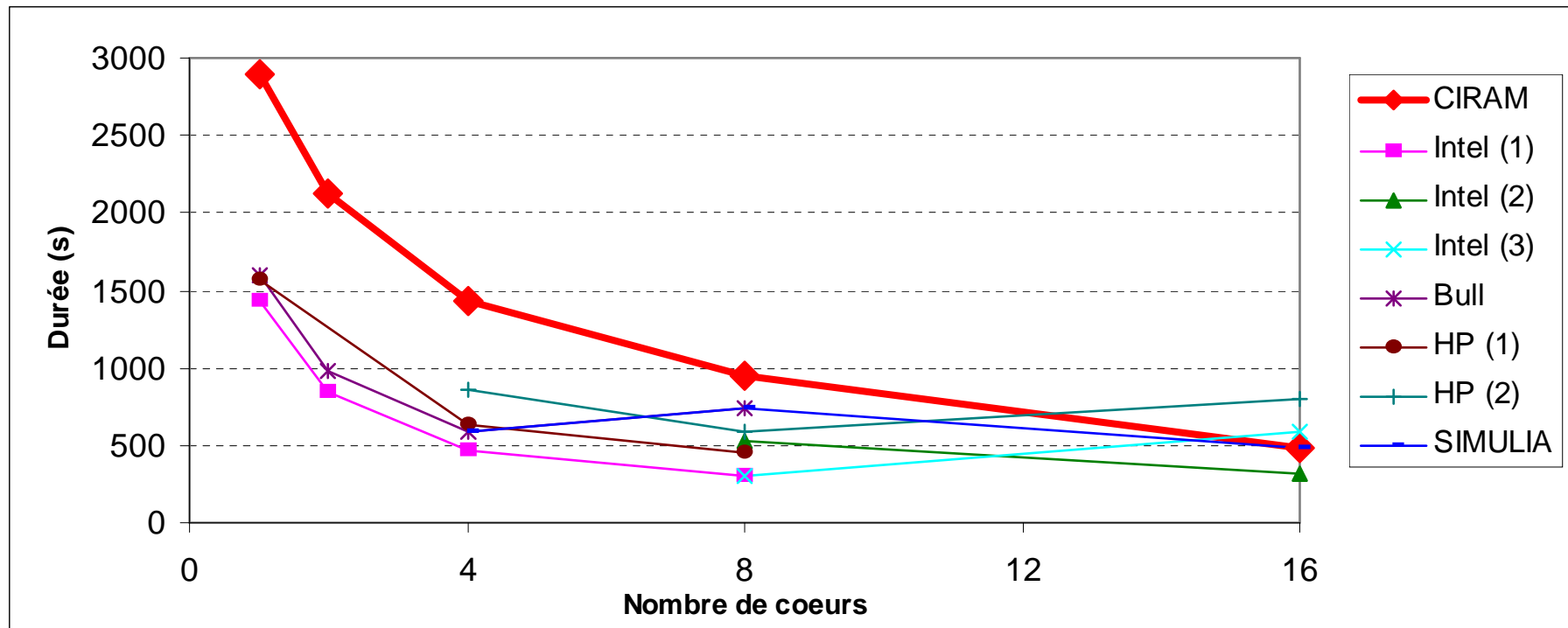
- Analyse statique fortement non-linéaire
- Éléments C3D8
- Comportement élastique linéaire
- Conditions de contact



Influence de la mémoire RAM allouée par nœud

Benchmarks – S5 : Ouverture de stent

durée (s)	fréquence	mémoire/nœud	standard memory	ppn	Connexion	1	2	4	8	16
CIRAM	2,93 GHz	24 Gb DDR 1033 Hz	16000 MHz	8	infiniband	2891	2125	1433	950	487
Intel (1)	3,0 GHz	16 Gb dimms	12800	8		1432	841	467	304	
Intel (2)	3,2 GHz	16 Gb	15000	4 (8)	SilverStorm 9080 DDR				535	322
Intel (3)	3,2 GHz	16 Gb	15000	8 (8)	SilverStorm 9080 DDR				297	593
Bull	3,0 GHz	16 Gb	16000		infiniband	1602	974	594	745	
HP (1)	3,0 GHz	32 Gb	24576	8		1572		636	457	
HP (2)	2,3 GHz	16 Gb	12288	8	infiniband			852	586	799
SIMULIA	3,0 GHz	8 Gb	6500	4	infiniband			585	735	488



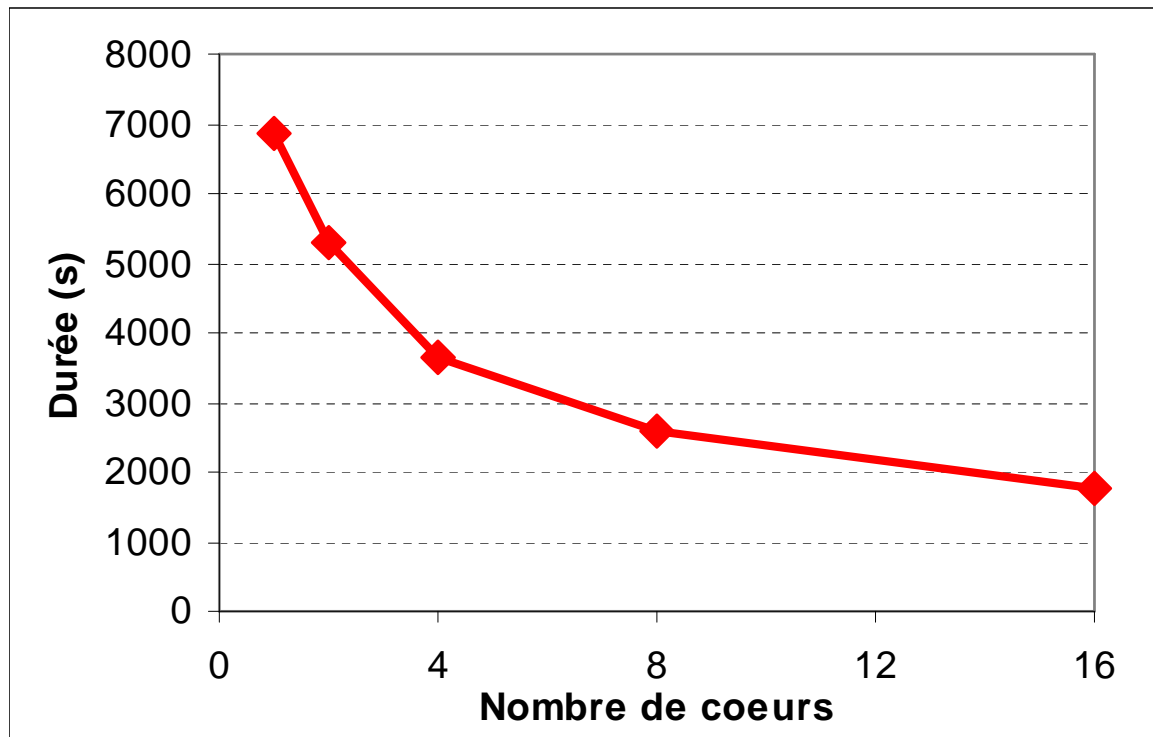
➔ Facteur très influent : mémoire RAM allouée

➔ Qualité de la mémoire, perturbation avec d'autres calculs sur 8

Benchmarks – S6 : Empreinte de pneu

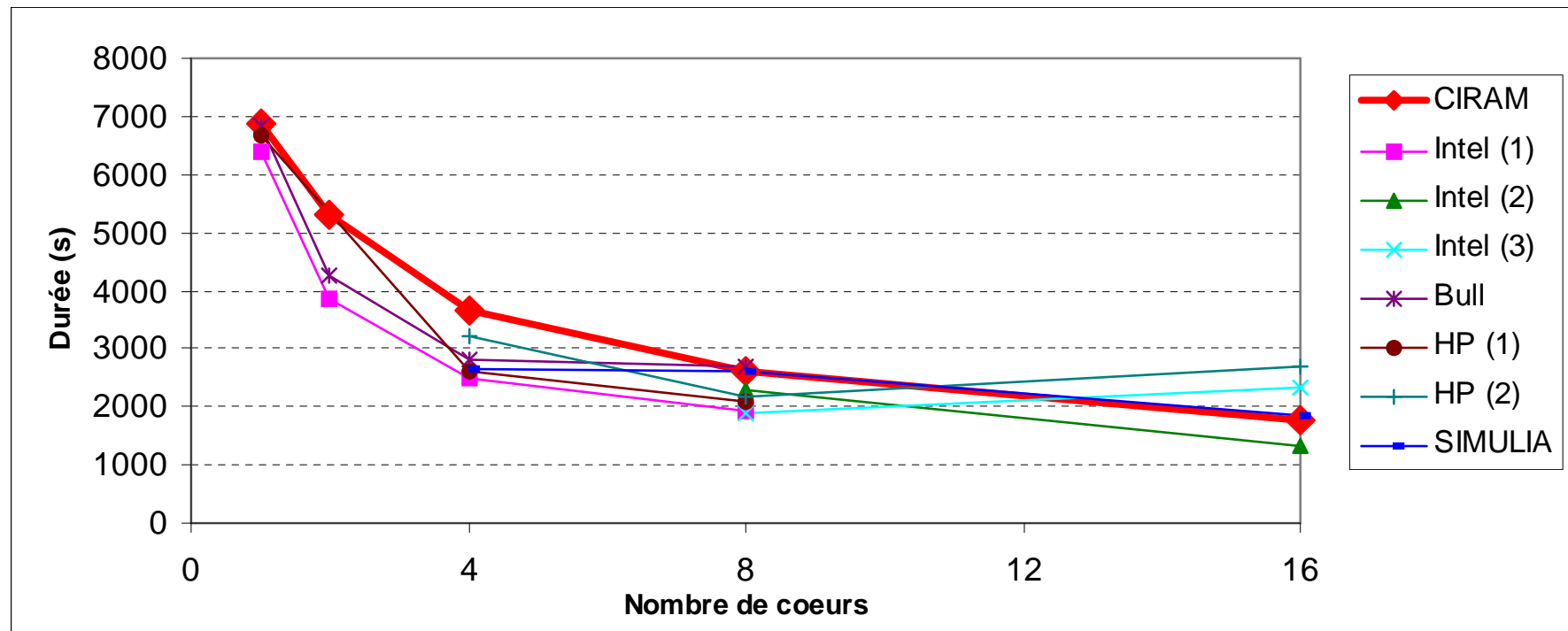


- Analyse statique fortement non-linéaire
- Éléments C3D8, C3D6H et C3D8H
- Comportements élastique linéaire et hyperélastique
- Gonflement du pneu et conditions de contact



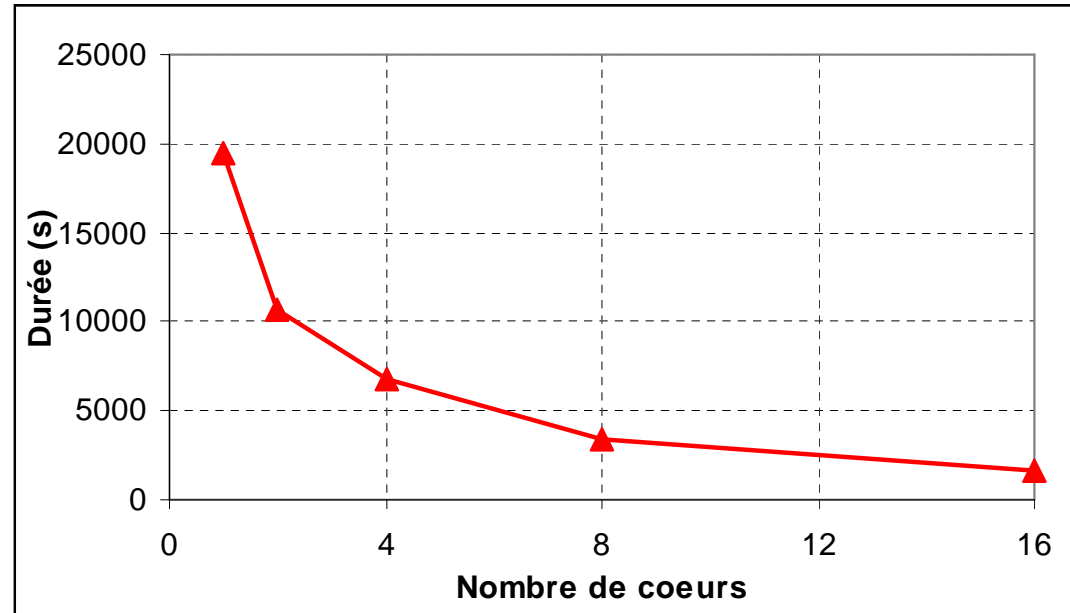
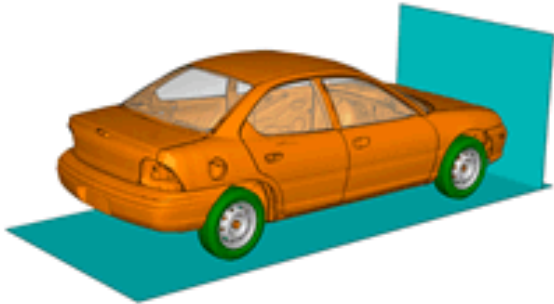
Benchmarks – S6 : Empreinte de pneu

durée (s)	fréquence	mémoire/nœud	standard memory	ppn	Connexion	1	2	4	8	16
CIRAM	2,93 GHz	24 Gb DDR 1033 Hz	16000 MHz	8	infiniband	6863	5307	3640	2598	1768
Intel (1)	3,0 GHz	16 Gb dimms	12800	8		6396	3843	2494	1917	
Intel (2)	3,2 GHz	16 Gb	15000	4 (8)	SilverStorm 9080 DDR				2300	1342
Intel (3)	3,2 GHz	16 Gb	15000	8 (8)	SilverStorm 9080 DDR				1903	2349
Bull	3,0 GHz	16 Gb	16000		infiniband	6823	4271	2814	2681	
HP (1)	3,0 GHz	32 Gb	24576	8		6677		2632	2074	
HP (2)	2,3 GHz	16 Gb	12288	8	infiniband			3222	2190	2709
SIMULIA	3,0 GHz	8 Gb	6500	4	infiniband			2652	2597	1850



➔ Calculs perturbés par les autres calculs sur la lame

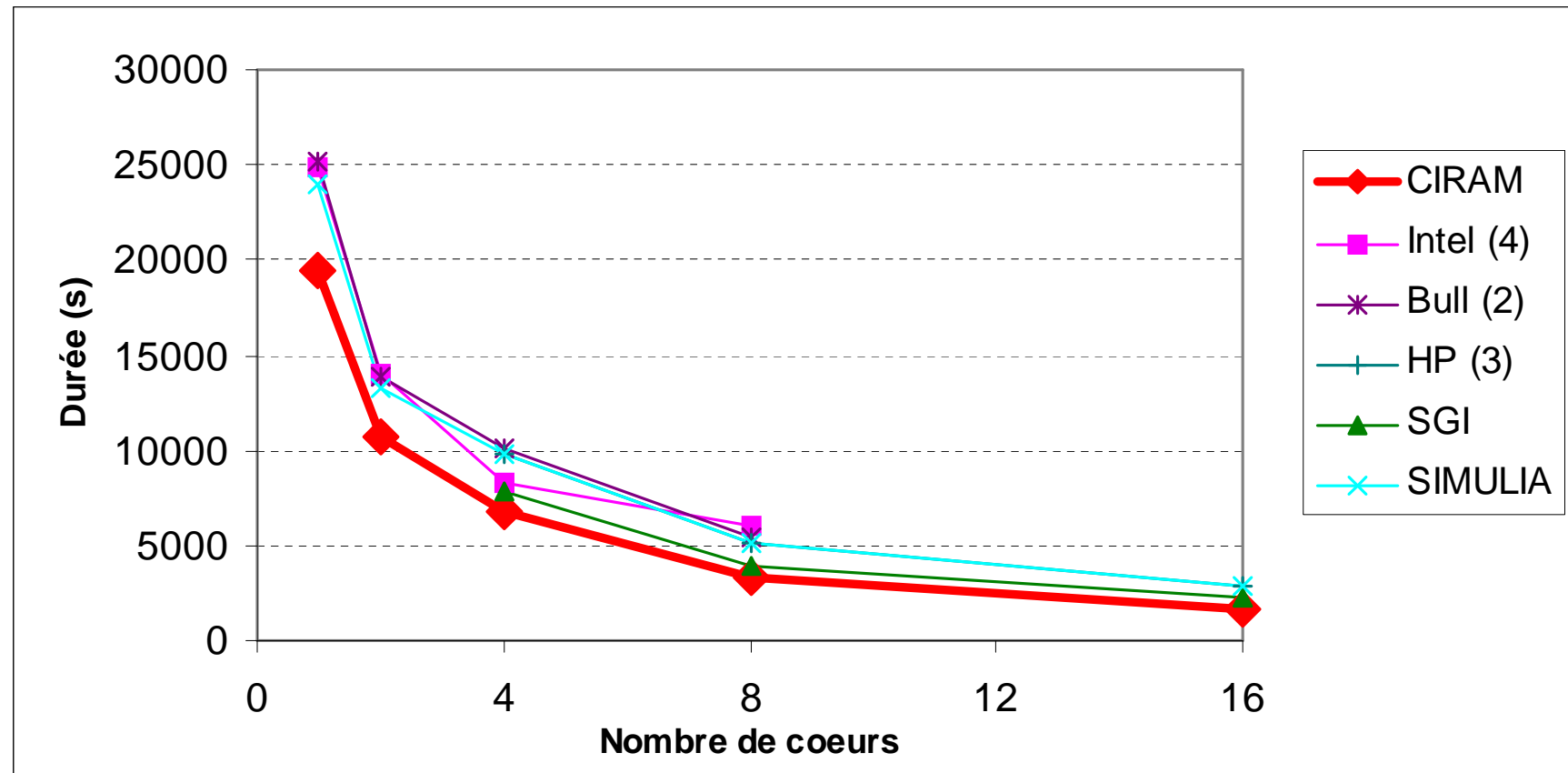
Benchmarks – E1 : Car crash



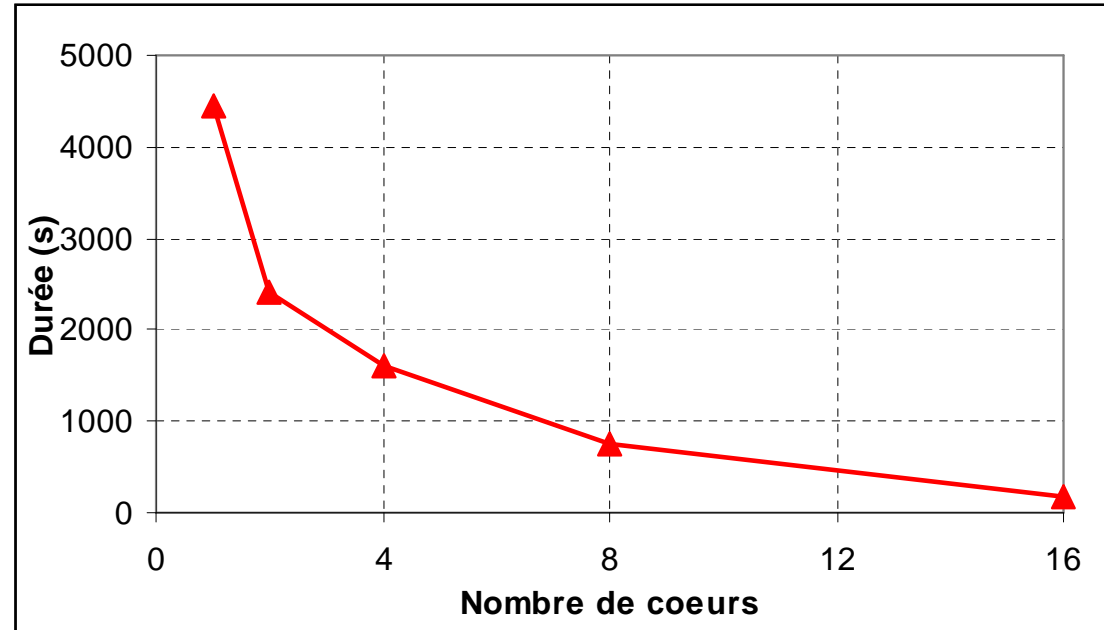
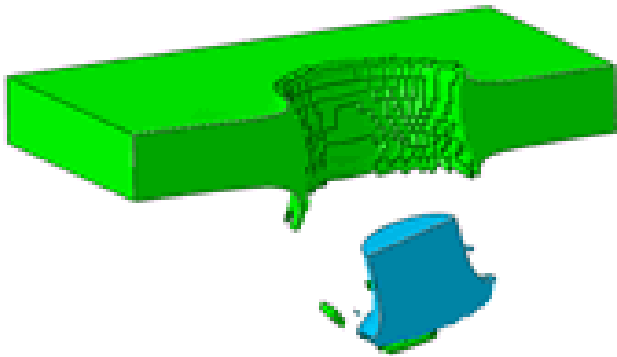
- Éléments S3RS et S4RS
- Comportement élastoplastique
- Écrouissage isotrope
- Vitesse à l'impact : 40 km/h

Benchmarks – E1 : Car crash

durée (s)	fréquence	mémoire/nœud	ppn	Connexion	1	2	4	8	16
CIRAM	2,93 GHz	24 Gb DDR 1033 Hz	8	infiniband	19493	10661	6773	3330	1597
Intel (4)	3,0 GHz	16 Gb dimms	8		24825	14060	8264	6077	
Bull (2)	3,0 GHz	16 Gb		infiniband	25132	13859	10067	5366	
HP (3)	2,3 GHz	8 Gb	4	infiniband			9811	5098	2822
SGI	3,0 GHz	16 Gb	4	infiniband			7906	3975	2233
SIMULIA	3,0 GHz	8 Gb	4	infiniband	23957	13229	9843	5140	2853



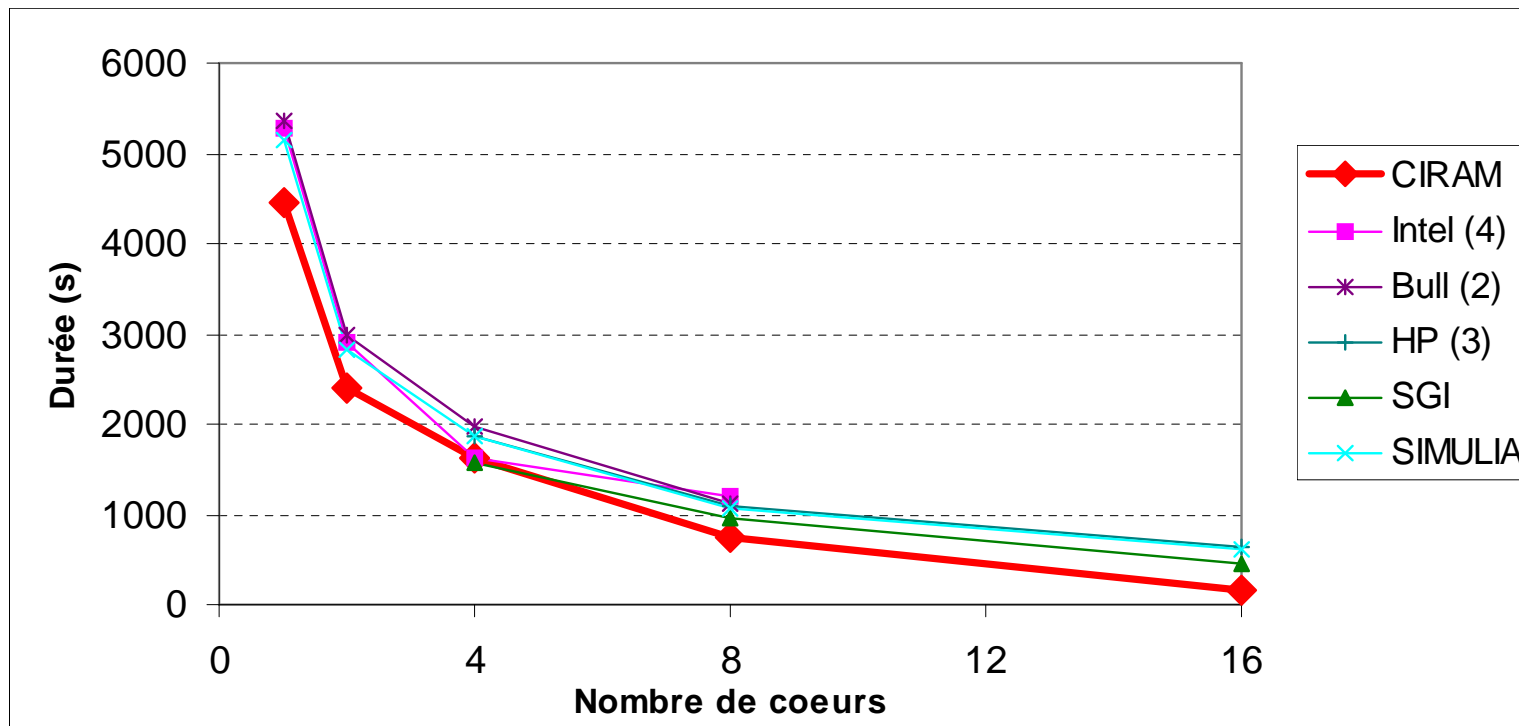
Benchmarks – E4 : Pénétration d'un projectile



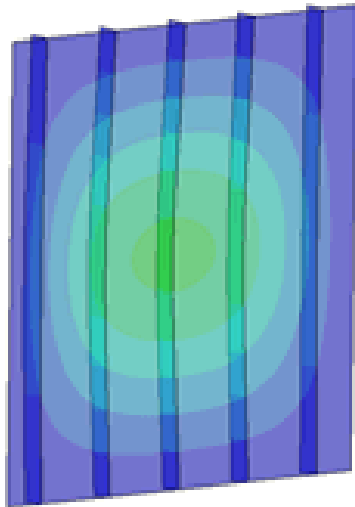
- Éléments C3D8R
- Comportement élastoplastique
- Écrouissage isotrope
- Modèle avec endommagement

Benchmarks – E4 : Pénétration d'un projectile

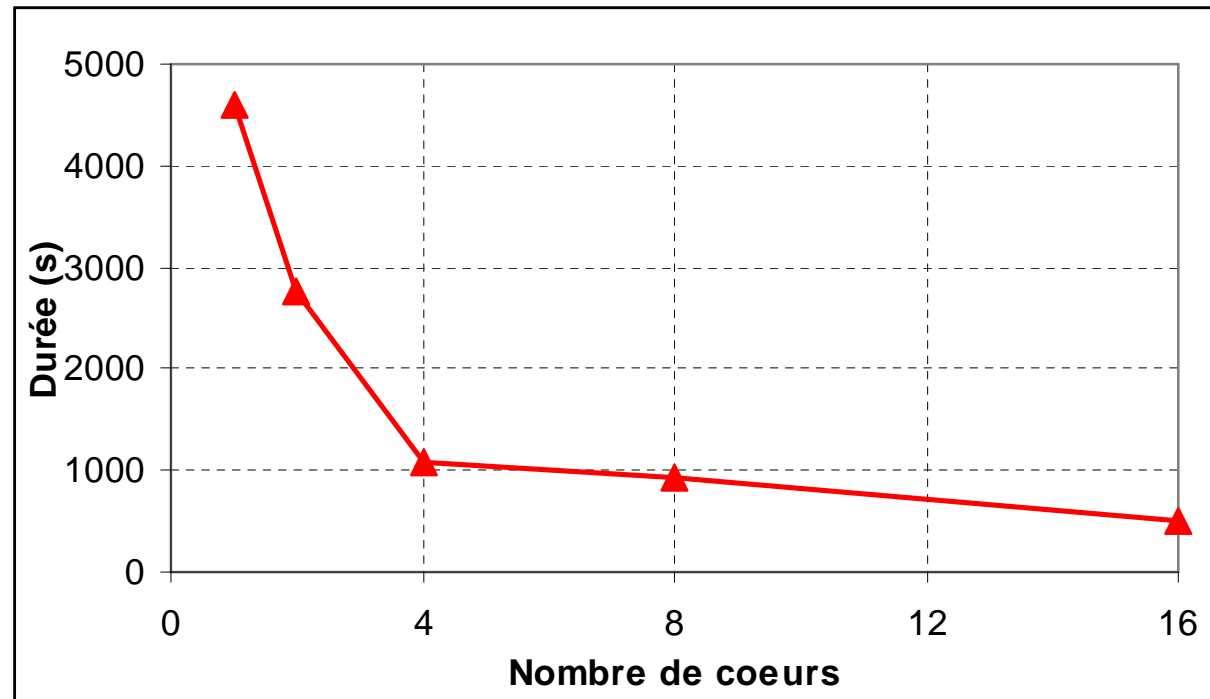
durée (s)	fréquence	mémoire/nœud	ppn	Connexion	1	2	4	8	16
CIRAM	2,93 GHz	24 Gb DDR 1033 Hz	8	infiniband	4441	2400	1616	748	171
Intel (4)	3,0 GHz	16 Gb dimms	8		5273	2900	1616	1205	
Bull (2)	3,0 GHz	16 Gb		infiniband	5352	2997	1964	1127	
HP (3)	2,3 GHz	8 Gb	4	infiniband			1866	1106	643
SGI	3,0 GHz	16 Gb	4	infiniband			1569	965	453
SIMULIA	3,0 GHz	8 Gb	4	infiniband	5157	2838	1856	1074	618



Benchmarks – E5 : Plaque soumise à une charge soufflée

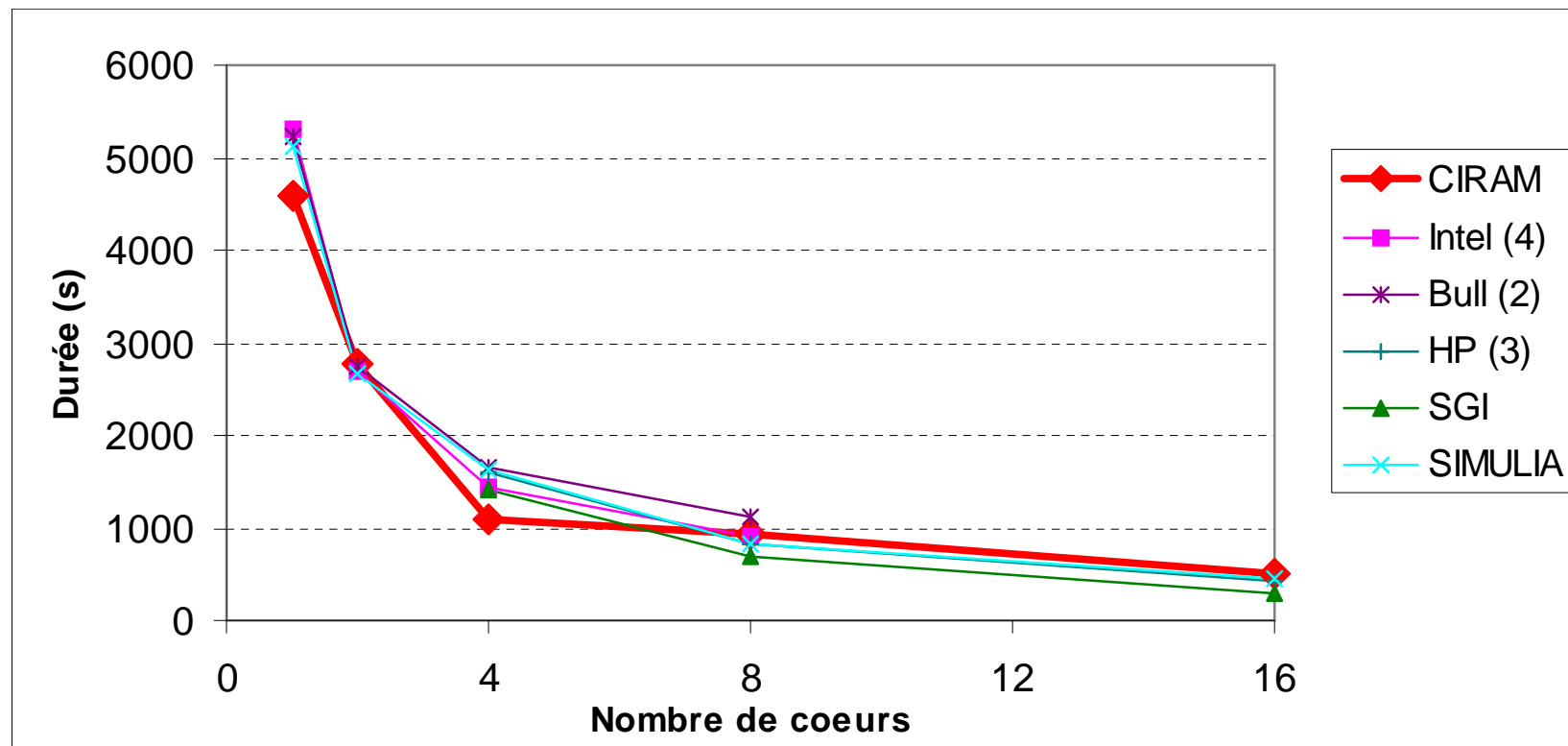


- Éléments S4R
- Comportement élastoplastique
- Écrouissage isotrope
- Sans contact



Benchmarks – E5 : Plaque soumise à une charge soufflée

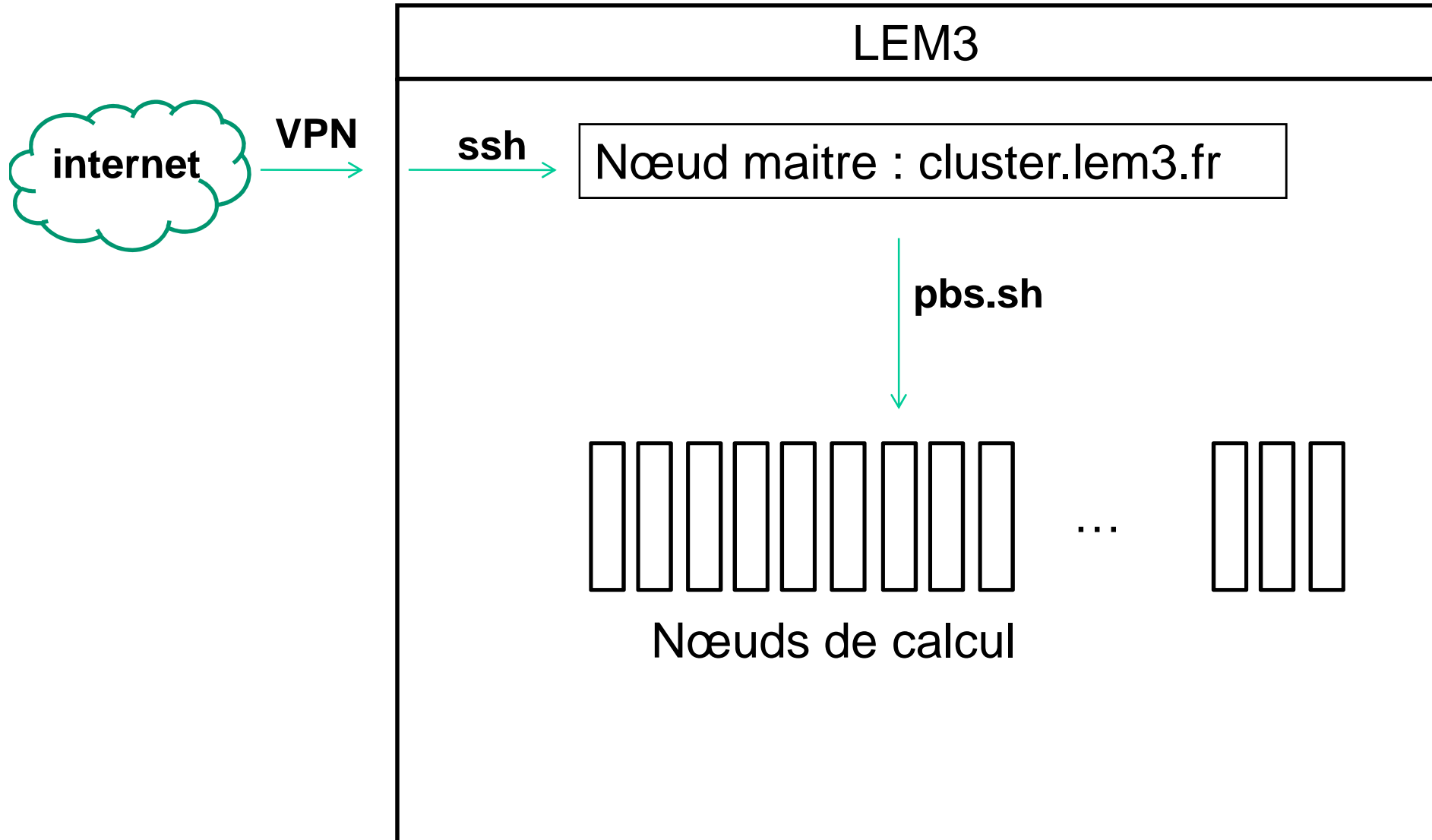
durée (s)	fréquence	mémoire/nœud	ppn	Connexion	1	2	4	8	16
CIRAM	2,93 GHz	24 Gb DDR 1033 Hz	8	infiniband	4588	2763	1089	924	511
Intel (4)	3,0 GHz	16 Gb dimms	8		5299	2693	1440	910	
Bull (2)	3,0 GHz	16 Gb		infiniband	5231	2756	1651	1127	860
HP (3)	2,3 GHz	8 Gb	4	infiniband			1605	818	430
SGI	3,0 GHz	16 Gb	4	infiniband			1402	685	293
SIMULIA	3,0 GHz	8 Gb	4	infiniband	5122	2657	1619	823	441



Sommaire

- 1) Présentation du cluster
- 2) Connexion au centre de calcul
- 3) Soumission d'un job
- 4) Gestion / suivi du calcul

Connexion au centre de calcul

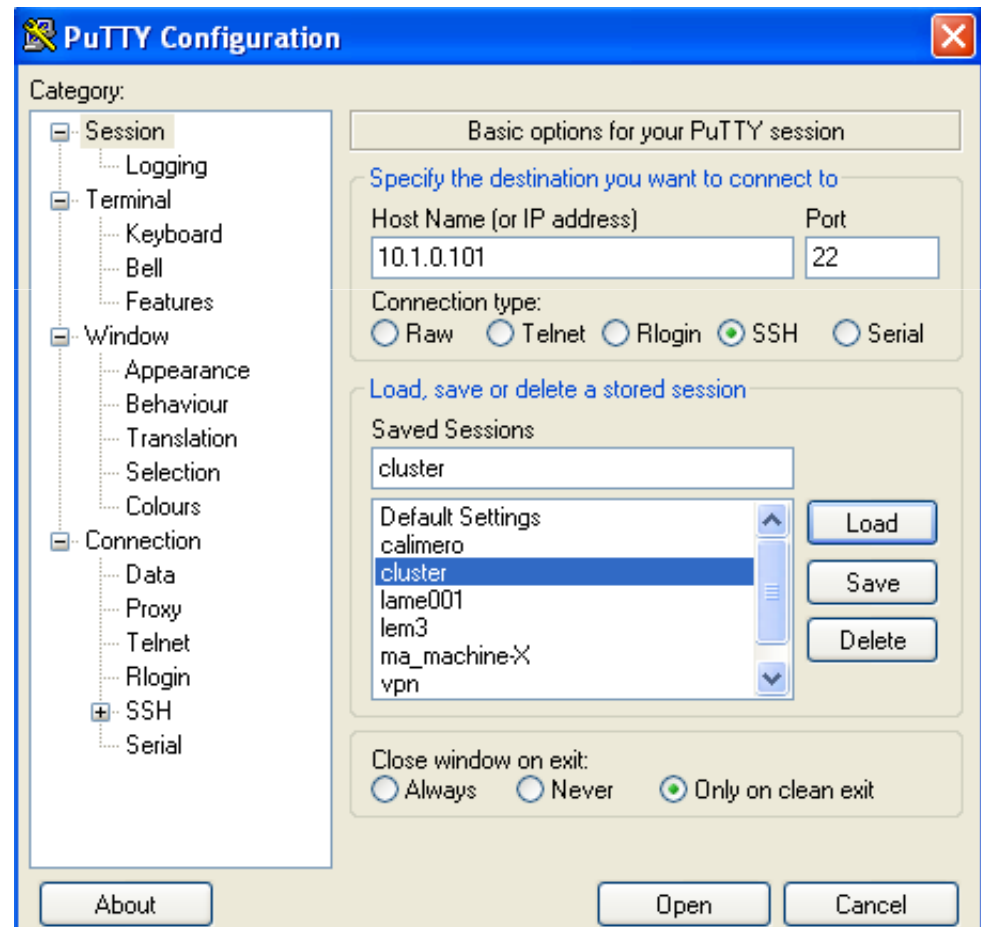


Connexion au centre de calcul

- Utilitaire pour se connecter au centre de calcul : putty.exe
- Lors de la connexion, entrer les identifiants et mots de passe du LEM3

- Configuration

- host : 10.1.0.101
- port 22



Sommaire

- 1) Présentation du cluster
- 2) Connexion au centre de calcul
- 3) Soumission d'un job (calcul)
- 4) Gestion / suivi du calcul

Soumission d'un job (calcul)

- Le répertoire de travail doit contenir :
 - Les fichiers relatifs au calcul (utilisés sans cluster)
 - Un fichier pbs.sh (pbsmatlab.sh, pbsabaqus.sh, ...)
- Le fichier pbs fait le lien entre le calcul et le cluster
- L'utilisateur n'a pas à se soucier de la distribution de son job sur les nœuds de calcul

Soumission d'un job (calcul)

Contenu du fichier pbs :

- Informations de configuration
- Seules 2 lignes à modifier par l'utilisateur
- L34 : PBS -l nodes=1:ppn=1,walltime=02:00:00,
- L73 : execution de la commande liée au logiciel
 - /opt/Abaqus/Commands/abq6112 job=calcul cpus=\$NCPU int
 - matlab -nojvm -display=null -r NOMDUFICHIER
 - ./programme_fortran.exe (préalablement compilé)

Soumission d'un job (calcul)

Ligne 34 :

- nodes=X → Le nombre de nœuds demandés
- ppn=Y → Le nombre de processeurs par noeud
- walltime=02:00:00 → durée maximale du calcul HH:MM:SS

Si le calcul excède la durée du walltime, il est automatiquement arrêté

Soumission d'un job (calcul)

Une fois le fichier pbs.sh complété le calcul peut être lancé

1. Connexion au cluster avec putty
2. Accès au répertoire de travail (ex : "cd Documents/formation/")
3. Soumission du job à la queue : qsub pbs.sh

Lors de la soumission du job, un identifiant unique (jobID) est attribué. Il permet de suivre l'évolution du calcul et de l'arrêter si besoin

Sommaire

- 1) Présentation du cluster
- 2) Connexion au centre de calcul
- 3) Soumission d'un job
- 4) Gestion / suivi du calcul

Gestion/suivi du calcul

Commande utiles :

- " qstat – a " : affiche l'état du calcul (R=Running ; Q=en queue ; E=erreur ; C=completed (=terminé) ; H=suspendu)
- " qdel " + JobID : arrête instantanément et définitivement le calcul en cours
- " ls -l " : affiche la liste des fichiers du répertoire de travail – permet de surveiller les créations de fichiers résultats

Lorsque le calcul se termine, création du fichier :

jobID.cluster.lem3.fr.log

Il contient les informations liées au calcul (erreur rencontrée, date de début et fin de calcul, nœud(s) de calcul utilisé(s), répertoire de travail, ...)