Cluster

Sur cette page, tips and tricks concernant le cluster, ainsi qu'un lien vers les logiciels spécifiques

Intro et logiciels

- Le pole Calcul et Simulation Numérique dispose d'une page cluster avec une rubrique formation. Consultez là ! :)
- **La liste des logiciels** disponible est sur softwares, ainsi que comment compiler certaines choses sur votre home.

Nettoyage de jobs plantés

Parfois, des job annulés ou finis restent sur les noeuds: il faut les tuer à la main.

Si vous ne savez pas bien où vous en êtes, listez les noeuds sur lesquels vous avez un process qui tourne. Créer un fichier “show_process.sh” avec le contenu:

```
if [ "$1" != "" ]
then
    echo "finding processes of $1"
    for hostList in $(sinfo -h | awk '{print $6}' | sort -u); do
        for host in $(scontrol show hostname $hostList); do
            echo $host; ssh $host "ps aux | grep $1";
        done;
    done;
else
    echo "No username given"
fi
```

Puis rendez le executable: `chmod +x show_process.sh` et enfin lancez le avec votre username: `show_process.sh MON_LOGIN`

====

Un fois les noeuds identifiés:

On voit, par exemple, que le job a été lancé sur `compute-1-1`, donc on s'y connecte: `ssh compute-1-1 `

On liste les processus avec la commande `htop`.

Avec les flèches du clavier, déplacez vous sur le processus zombie, puis faites `F9`pour le tuer. Un menu s'ouvre à gauche, taper directement `entrée` pour le sigterm, ou déplacez vous en haut sur sigkill si il est récalcitrant. Normalement, il disparait de la liste, libérant la place.

Ensuite, pour nettoyer les fichiers, `cd /scratch`, puis `ls` pour trouver le dossier correspondant, et le supprimer, par example `rm -rf villani-xxxxx`.

Voilà !

Super squeue

Pour que la sortie donnée par la commande _squeue_ soit vraiment utile, vous pouvez configurer un alias pour votre shell. Ca colore vos propre job, étend la colonne avec le nom, etc. Si vous avez bash, dans ~/.bashrc, zsh, dans ~/.zshrc, etc:

```
alias squeue='squeue -o "%.5i %.9P %.22j %.8u %.2t %.10M %.5D %R" |
GREP_COLOR="01;31" egrep --color=always "^.*$USER PD.*$|$" |
GREP_COLOR="01;32" egrep -i --color=always "^.*$USER  R.*$|$"'
```

Jupyter lab

Avant toute chose ! Python est séquentiel, sauf si vous lui dites autrement, et sauf librairies très spécifiques. Autrement dit, dans 99% des cas, ne réservez qu'un cœur pour votre notebook (ou renseignez vous sur les librairies que vous utilisez)

On peut avoir un JupyterLab fonctionnel, qui tourne proprement sur un noeud du cluster avec une réservation.

```
module load tools/cluster-bin
cluster-create-slurm-script-01.sh -jupyter-lab
```

Çà utilise le module anaconda/python3.

Faites vos résas comme d'habitude et soumettez. Un message pop pour vous dire de regarder le fichier slurm-XXX.out. Procédez ensuite comme suit (en anglais parce voilà, comme dans le job):

You now have to connect to your notebook. Open slurm-XXX.out

1. Open a terminal from your desktop (NOT centaure) and create a tunnel to the compute where you notebook has been assigned, with the command below. It will have the correct values in the slurm-XXX.out. If you want the tunnel to stay in the background, remove use 'ssh -f ...' Otherwise, don't forget to kill the tunnel once done.
   ```
      ssh -L \${port}:localhost:\${port} cluster ssh -L
   \${port}:localhost:\${port} -N \${computenode}
   ```
2. Now look for the connection link to paste in your browser in the bottom of the file. It looks like `http://localhost:YYYY/?token=XXXXX`
3. Happy notebook use !
4. **VERY IMPORTANT**: when you are finished and havesaved your notebook, you **must**, in

jupyterlab, click on the menu: `File→Shut Down` . This way, the slurm job will finish properly, and your data will be copied back on your home folder (as usual in a subfolder 'youname-$SLURM_JOB_ID'. If you do a scancel, you will have to copy your data from the compute scratch yourself and risk data loss if not done in the next days.

Notes:

- Si vous voulez lancer avec un autre module python, modifiez le fichier job. Après `module load anaconda/python3`, ajoutez une ligne `conda activate mon_env`
- **Non recommandé, sauf si vous savez ce que vous faites.** Vous pouvez aussi lancer une résa en interactif et tout faire en manuel, par exemple
  - 'srun -p intensive.q –time=00:30:00 –ntasks-per-node 1 –pty bash'
  - ça vous mets sur, par exemple, compute-0-5
  - 'mkdir /scratch/villani_monjupyter && cd scratch/villani_monjupyter'
  - `module load anaconda/python3` (ou 2, ou autre, puis charger un de vos environnements locaux avec `conda activate mon_env`)
  - trouvez un port libre: `comm -23 <(seq 7777 8888 | sort) <(ss -Htan | awk '{print $4}' | cut -d':' -f2 | sort -u)| shuf | head -n 1` ça vous sors par exemple 8146
  - `jupyter-lab –no-browser –port=8146`
  - faites le tunnel `ssh -L 8146:localhost:8146 cluster ssh -L 8146:localhost:8146 -N compute-0-5`
  - connectez vous depuis votre navigateur `http://127.0.0.1:8146/?token=XXXX`
  - `File→Shut Down` quand vous avez finis
  - rapatriez vos données du scratch avec un scp

Créer un module pour votre code utilisable avec module load

Let's say you want to use your code, for instance, **flatori**, on the cluster. To do that, you need to fill a file (per version of you code) containing the correct informations about path, etc. Let's say you want a module for version R0:

~/privatemodules/flatori/R0

```
#%Module1.0##############
##
## Flatori modulefile
##

proc ModulesHelp { } {
        global version modroot
        puts stderr "====== Flatori $version ======\n"
        puts stderr "Set correct environment variables and libraries \n"
}

set version     R0
set FLATORI     /export/home/$USER/path/to/flatori/

prepend-path PATH $FLATORI/where/is/the/binary
```

Then, you need to inform your shell that this module configuration file exists, in our case, add the path “~/privatemodules” to $MODULEPATH in your shell rc. For bash, in your ~/.bashrc , add:

```
export MODULEPATH="$MODULEPATH:/export/home/$USER/privatemodules"
```

Et voilà, now you can see your module when typing `module avail`, and in our case, do `module load flatori/R0`

From:
https://portail.emse.fr/dokuwiki/ - **DOC**

Permanent link:
https://portail.emse.fr/dokuwiki/doku.php?id=recherche:cluster&rev=1619630441

Last update: **28/04/2021 19:20**