HPC

<mark>Atvērtā Nedēļa 2025</mark> Rīga,Latvija 13. jūnijs

IKVIENAM, KURAM INTERESĒ HPC UN IR VĒLME SĀKT DARBOTIES SUPERDATORĀ

Kirils Surovovs, PhD, LU Skaitliskās modelēšanas institūta pētnieks





Darbsemināra mērķis

- Iepazīties ar augstās veiktspējas (angl. HPC high performance computing) klastera iespējām
- Izmēģināt pieslēgšanos pie OOD platformas
- Iziet cauri konkrētam HPC pielietošanas piemēram





Darbsemināra saturs

- levaddaļa (<20 min)
 - Skaitliskās Modelēšanas Institūts
 - o SMI klasteris
 - o Skaitliskā modelēšana un tās piemēri
 - o Linux komandrinda
- Praktiskais darbs ar HPC klasteri, jautājumi (≈60 min)





SMI klasteris

Vispārīgā informācija

Pieejamie resursi:

- 13 fiziski serveri, kas ir izvietoti IZM datu centrā Ķīpsalā
- >360 kodoli aprēķiniem
- 3 Tb operatīvas atmiņas
- lespēja rēķināt uz NVIDIA RTX A6000 GPU kartēm
- Šos resursus lieto SMI, FMOF, ĢZZF pētnieki.





SMI klasteris Salīdzinājums ar pasaules TOP-3 superdatoriem

Frontier (ASV) – 606 000 CPU kodoli

Fugaku (Japāna) – 1 700 000 CPU kodoli

LUMI (Somija) – 362 000 CPU kodoli





RTU (Latvija) – 1300 CPU kodoli

LU SMI (Latvija) – 360 CPU kodoli









HPC pielietošanas veidi

- Lielie dati (*big data*): patērētāju ieradumu noteikšana, medicīnisko datu analīze, ceļa novērojumu kameras, satelītfotografijas, citas datubāzes...
- Reālā laika datu apstrāde: maksājuma īpašību salīdzināšana ar iepriekš saglabātajiem, loģistikas uzlabošana, gaisa kvalitātes monitorings, laikapstākļi...
- Matemātiskā modelēšana: dažādu inženiertehnisko un dabas procesu matemātiskais apraksts — šķidrumu un gāzu plūsma, molekulu kustība, materiālu īpašības, mehāniskie spriegumi...





Matemātiskā modelēšana (MM)

- Modelēšana ir modeļa izveide reāla fenomena aprakstam
 - Modelēšana aizvieto reālu mērījumu vai eksperimentu
 - Vienkāršs modelis bieži vien palīdz labāk saprast sarežģīto realitāti
 - Parasti modelēšana ir izdevīgāka nekā eksperimentālas studijas
- Modelēšanu izmanto dažādās jomās
 - Dabaszinātnēs (fizika, bioloģija, ķīmija, ...)
 - Sociālās zinātnēs (ekonomika, psiholoģija, politika, ...)
 - Starpdisciplināras, piem. transporta plūsma (fizika + psiholoģija)

model

- Pablo Picasso: art is a lie that helps us understand the truth
- Metodes
 - Analītiskas precīzas, sarežģīti vienādojumi
 - Skaitliskas aptuvenas, vienkāršāki vienādojumi un operācijas, piemērotas datoriem: $S = v \cdot t$, $F = m \cdot a$

https://gitlab.com/eurocc-latvia/room-model



MM piemērs: gaisa plūsma telpās





MM piemēri: Si kristālu audzēšana





https://gitlab.com/eurocc-latvia/ metal-casting-hpc-model



MM piemērs: metāla lentes liešana



Gāzu plūsmas, temperatūras, koncentrācijas kā arī cieto daļiņu kustības skaitliskā modelēšana



MM piemērs: gazifikators, SIA EnertecGreen







MM piemērs: AS Latvenergo

545000

\$40000

Rīgas HES apkārtnes hidroģeoloģiskā modeļa izveide



6312000

6310000 6308000







Digitālais reljefa modelis



Rīgas lietus kanalizācijas plūsmas m³/s x5 gados

MM piemērs: Plūdu modelēšana, RD









MM piemērs: automašīnu aerodinamika







Datu apstrādes piemērs: laika prognozes

Sesonālo laika prognožu sagatavošana ar HPC: var uzlabot ilgtermiņa (vairāki mēneši) laika prognožu precizitāte, izmantojot vēsturisko klimatisko datu reanalīzi ar HPC.

Fimar for Web – Baltijas jūrai





Uzlabotā prognoze



Komandrinda

- Uz klastera ir Linux operētājsistēma, un tur ir standarta (bash) komandrinda
- Lai tai pieslēgties, var izmantot kādu termināli, piemēram PuTTY (Windows), vai ssh komandu (Linux)
- Mēs izmantosim OOD (*open on demand*) platformu ar pārlūkorgrammu, bez citu programmu instalēšanas



Komandrinda

Svarīgākās komandas

- mkdir izveidot mapi (vai vairākas, vai neeksistējošas ar -p, -v)
- cd pāriet uz mapi (speciālie simboli ~ / ..)
- pwd izdrukāt mapes nosaukumu
- ls parādīt mapes saturu

Dažas noderīgas atziņas: *Tab* taustiņa lietošana, tukšuma zīmes mapju nosaukumā ar '', asteriska lietošana, bultiņu taustiņi, burtu kapitalizācija, ——help opcija...

- > novirzīt izvadu uz kādu failu (>> lai papildinātu)
- cat, head, tail-izdrukāt failu vai tā daļu
- mv pārvietot failu
- rm izdzēst failu (jālieto uzmanīgi, jo nav groza; mapes ar r)

Failu pārnese un aplūkošana

 Lai kopētu failus uz/no klastera (un nav pieejas OOD vai līdzīgam rīkam), var izmantot SCP failu pārvaldnieku, piemēram WinSCP (Windows), FileZilla (Linux)

a_1p6_200mmRefl - RTU: kirilsu@ui-1.hpc.rtu.lv - WinSCP		- 0	×
Local Mark Files Commands Session Options Remote Help			
🖶 🔁 📚 Synchronize 🗾 🧬 💽 🏟 😭 Queue 🗸 🛛 Transfer Settings Defaul	t 🔹 🥵 🔹		
📮 RTU: kirilsu@ui-1.hpc.rtu.lv 🗙 🚅 New Session			
📃 Desktop 🔹 🚰 🔹 🕥 🔹 🦛 🖘 🔹 💼 🔂 🏠 🔁	📙 a_1p6_20C 🔻 🚰 👻 🕎 👻 🖛 🖛 🔸	🗈 🗇 🏠 💋 🔝 Find Files 🗜	2
📲 🛃 Upload 👻 📝 Edit 👻 🔀 🔂 Properties 📑 New 🕶 🗐 🛨 🖃 💟	🗄 📄 Download 👻 📝 Edit 👻 📈 🕞 P	roperties 🎽 New - 🗄 🕂 🖃 💟	
C:\\Kirils\Desktop\Actual\2023-02-07_8inch_SAG-parameter-studies\h_scaling_of_HFEM\	/mnt/beegfs2/home/kirilsu/calc/8inch/w_202	3/a_1p6_200mmRefl/	
Name L a_HFEM_10procb_HFEM_20proc	Name Name Name Name Name Constant Constant Constant Constant Constant Constant Cons	Go To Refresh Ctrl+ Filter Ctrl+Alt+ Add Path to Bookmarks Ctrl+ Copy Path to Clipboard Ctrl+ New	R F B ·[File Shift+F4
	probes	Paste Ctrl+	V 🚰 Directory F7
< >> >> >> >> >> >> >> >> >> >> >> >> >>	0.0 of 2.22 KB in 0 of 41	n:_ n _£ n	-
	U B OT 2.22 KB IN U OT 41	G SFTP-3 🗐 6:0)4:19 _{.::}

Darbības princips un jēga

- Uz klastera ir daudz lietotāju
- Kā noteikt, vai ir palikusi brīva vieta?

Darbības princips un jēga

- Uz klastera ir daudz lietotāju
- Kā noteikt, vai ir palikusi brīva vieta?
- Atbilde: nekā! Par to rūpējas rindas pārvaldnieks *slurm* (vai uz RTU klastera *MOAB*).
 - o Ja ir brīvi resursi, uzdevums izpildās
 - o Ja brīvu resursu nav, uzdevums gaida
- Resursi ir gan CPU skaits, gan RAM atmiņa
- Kad lietotājs pieslēdzas klasterim, tas nonāk uz login mezgla, skaitļošanas mezgli nav pieejami tiešā veidā (caur vienkāršo ssh)

Izmantošana uz LU HPC klastera

Rindas izmantošana sastāv no šādiem soļiem

1. pieslēdzas klasterim

- 2. sagatavo aprēķinu: uztaisa mapi/failu
- 3. iesniedz uzdevumu rindā
- 4. ik pa laikam pārbauda uzdevuma statusu un progresu
- 5. saņem rezultātus: nokopē pie sevis mapi/failus

Izmantošana uz LU HPC klastera

- Lai ievietotu savu uzdevumu rindā, ir jāizpilda komanda: sbatch <skripta nosaukums>
- Skripta piemērs:

```
#!/bin/bash
#SBATCH --job-name=python_job # Brīvi izvēlēts nosaukums
#SBATCH --mem=2G # Kopējais RAM apjoms
#SBATCH --ntasks=8 # CPU kodolu skaits
#SBATCH --time=00:15:00 # Laika ierobežojums hh:mm:ss
#SBATCH --partition=regular # Rindas nosaukums (regular/weakold)
```

module load <uzdevumā lietoto moduļu nosaukumi>

```
mkdir results
  cd results
  cp ../my-calculations.py .
23 python my-calculations.py
```

Izmantošana uz LU HPC klastera

- Pēc uzdevuma ievietošanas rindā, parādīsies fails ar paplašinājumu .out
- Uzdevumam neļaus izmantot vairāk atmiņas vai procesoru, nekā rezervēts. Tādos gadījumos programma beigsies ar kļūdas paziņojumu.
- Informācija par mezglu noslodzi un rindas stāvokli:
 o sinfo
 - o squeue
- Lai savu uzdevumu apturētu: scancel <uzdevuma ID numurs>
- Var arī palaist interaktīvo uzdevumu (atvērsies parastā komandrinda): srun --partition=regular --mem=12G --pty bash

Programmu ielādēšana caur moduļiem Apraksts un piemēri

• Daudzas programmas ir jau instalētas iepriekš, lietotājam nav jāiegulda pūles

		/opt	/ohpc/pub/mod	uledep	s/anu9		
R/4.1.2 hdf5/1.10.8	mpich/	3.4.2-ofi	openblas/0.3	.7	pdtoolkit/3.25.1		
gs1/2.7 likwid/5.0.	1 mvapic	h2/2.3.6	openmpi4/4.1	.1 (L)	1 · ·		
	-						
		/o	pt/ohpc/pub/m	odulef	iles		
EasyBuild/4.5.0	gnu9/9.4.0	(L)	ohpc	(L)	pmix/3.1.4	ucx/1.11.2	(L)
autotools (L)	hwloc/2.5.	0 (L)	05		prun/2.2 (L)	<pre>valgrind/3.18</pre>	3.1
cmake/3.21.3	libfabric/	1.13.0 (L)	papi/5.7.0		singularity/3.7.1 (L)		
			/software/mod	lulefil	es		
anaconda3/anaconda-202	0.11	getdp/getdp	-3.4.0		openfoam/openfoam-v2	206	
cargo/cargo-1.59.0		gettext/get	text-0.21		openfoam/openfoam-v2	212	
copasi/copasi-4.21		gmsh/gmsh-4	.8.4		openfoam/openfoam-2.	3.0	
copasi/copasi-4.33	(D)	gnuplot/gnu	plot-5.4.2		openfoam/openfoam-3.	0.0	
cubegui/cubegui-4.7		julia/julia	-1.0.5		openfoam/openfoam-6		
cubelib/cubelib-4.7		julia/julia	-1.6.3		openfoam/openfoam-8		
cubew/cubew-4.7		julia/julia	-1.7.0-rc2	(D)	openfoam/openfoam-9		(D)
cuda/cuda-10.2		lazarus/laz	arus-2.0.12		paraview/paraview-5.	9.1	(L)
cuda/cuda-11.6	(D)	lazarus/laz	arus-2.2.0-rc	:2 (D)	paraview/paraview-5.	10.0-rcl	
dealii/dealii-9.3.2		micro/micro	-2.0.10		paraview/paraview-5.	10.1	(D)
eigen/eigen-3.4.0		mpi/openmpi	-1.6.5		petsc/petsc-3.16.0		
elmer/elmer-9.0		mpi/openmpi	-2.1.6		salome/salome-9.6.0		
eof/eof-6		nano/nano-6	.2		scorep/scorep-7.1		(D)
fds/fds-6.7.7		ncurses/ncu	rses-6.3		slepc/slepc-3.16.0		
ff-petsc/ff-petsc-3.16		nlopt/nlopt	-2.6.2		sqlite/sqlite-3.38.1		
flex/flex-2.6.4		nvtop/nvtop	-1.2.2		texinfo/texinfo-6.8		
freefem/freefem-4.10		openfoam-in	tel/openfoam-	.9	whitebox_tools/white	box_tools-2.1.0	
gcc/gcc-10.3.0		openfoam/op	enfoam-v1806				
gcc/gcc-11.2.0	(D)	openfoam/op	enfoam-v2006				

Programmu ielādēšana caur moduļiem

Izmantošana uz LU HPC klastera

- Lai iegūtu visu iespējamo moduļu (programmu un rīku) sarakstu, jāaizpilda komanda: module avail
- Moduli ielādē / aktivizē ar komandu: module load <moduļa nosaukums>
- Komanda uzstāda ceļu (PATH) uz attiecīgās programmatūras izpildāmiem failiem, bibliotēkām utt. . Noskaidrot ielādētos moduļus iespējams, izpildot komandu: module list
- Lai atiestatītu moduli, jāizpilda: module unload <moduļa nosaukums>
- Lai izslēgtu visus ielādētos moduļus module purge

Anaconda modulis

Apraksts un motivācija

• Uz klastera, kā gandrīz uz katras Linux sistēmas, ir pieejams python:

~/test \$ which python3 /usr/bin/python3 ~/test \$ python3 --version Python 3.6.8

 Tomēr pēc noklusējuma pieejamo pakotņu skaits nav liels. Lai lietotājs varētu instalēt sev nepieciešamas pakotnes (netraucējot citiem lietotājiem), ir jāizveido sava python vide. Šo procesu atvieglo anaconda modulis, kas pārvalda dažādas python bibliotēkas.

Praktiskais darbs ar HPC klasteri

RTU, 13.06.2025







Pieslēgšanās RTU vai LU HPC klasterim

- Ja lietotājs jau izveidots, pieslēgties pie klastera var šādi:
 - atvērt https://ood.hpc.rtu.lv
- Ja nesanāk, tad es pievienoju Jūsu e-pastu adreses testēšanas projektam. Jums atnāca e-pasts ar saiti, tur jānoklikšķina un jāizvēlas:
 - Sign in with RTU HPC
 - MyAccessID
 - Var izvēlēties vienu no opcijām:
 - 1. Login with eIDAS
 - Latvia (varbūt būs rakstīts Lettland)
 - eParaksts
 - (pievienoties ar savu e-parakstu, kā parasti)

2. levadīt savas universitātes nosaukumu, un pieslēgties ar lietotājvārdu un paroli

• atvērt https://ood.hpc.lu.lv





Pieslēgšanās RTU vai LU HPC klasterim

• vai atvērās šāds logs?

← → C ° ood.hpc.rtu.lv/pun/sys/dashboard						
Open OnDemand	Files 🝷	Jobs 🝷	Clusters -	Interactive Apps 🝷	7	
			>_RUDENS Shell Access			
			>_RUDENS backup Shell Access			
			>_tier2_sl	urm Shell Access		

- ja sanāca, tad lūdzu izvēlēties *Clusters RUDENS Shell Access*
 - Atvērsies komandrinda melnais logs, kurā būs jāraksta visas komandas
- failus var redzēt, atverot Files Home Directory file_upload



Testa piemērs

- aplūkosim vienu testa piemēru (*demo-case*), kas sagatavots *EuroCC* projektā: <u>ej.uz/HPCdemo</u>
- tas nebūs liels daudzkodolu aprēķins, bet sērija ar standarta aprēķiniem, katrs uz viena procesora — tā arī ir viena no HPC priekšrocībām
- jāizpilda šādas komandas (sākot ar Obtaining the case):

git clone https://gitlab.com/eurocc-latvia/example-repository.git cd example-repository

qsub hotRadiationRoom_MoabJob

- pārbauda aprēķina gaitu (Q = queued, R = running, C = cancelled):
 qstat
- pēc aprēķinu beigām (parasti jāuzgaida ap 10 min):

module load anaconda3

python hotRadiationRoom_Post_1.py

• pie failiem parādīsies .png bildes un .gif







Praktiskais uzdevums

- atkārtojiet šo piemēru no jauna, bet nomainiet
 - maksimālo krāsns temperatūru no 600 uz 1000,
 - temperatūras soli no 20 uz 40
- papilduzdevumi izciliem studentiem
 - lejupielādējiet ParaView programmu
 - atveriet kādu no rezultātu failiem, piemēram hotRadiationRoom_T=480K/VTK/ un aplūkojiet to
 - izpētīt un palaist citu piemēru no ej.uz/HPCdemo3
 - Pirms ./1-prepare-all.sh komandas ir jāsamazina režģa elementu skaits 2x katrā virzienā, parameters.py failā

Testa piemērs Nr. 3: ūdens plūsma caurtekā

- Sekosim instrukcijām no https://gitlab.com/eurocc-latvia/culvert-model (tas pats, kas https://ej.uz/HPCdemo3)
- Pirms ./1-prepare-all.sh komandas ir jāsamazina režģa elementu skaits 2x katrā virzienā, parameters.py
- Tad aprēķiniem jābūt gataviem apmēram 2-3 minūšu laikā
- Var izmēģināt kāda fizikāla parametra nomaiņu, labāk sākt ar jaunu mapi ar git clone

Testa piemērs Nr. 2: LLM izmantošana ar HuggingFace rīkiem

- https://github.com/huggingface/notebooks/blob/main/examples/language_modeling.ipynb
 - Not clear how to use it after training
- module load anaconda
- conda create -n mana_py35_vide python=3.10 transformers datasets
- conda activate env_for_vards_uzvards
- conda install pytorch ipython



- ipython
- sekot instrukcijai no HuggingFace lapas: <u>https://ej.uz/HPCdemo2</u>

Testa piemērs Nr. 2: LLM izmantošana ar HuggingFace rīkiem

- Pēc trenēšanas:
- prompt = "The best thing in life is"
- from transformers import pipeline
- generator = pipeline("text-generation", model=model, tokenizer=tokenizer)
- generator(prompt)

 Ko darīt, ja trenēšana notiek pārāk ilgi? Jāizmanto vairāk procesoru, piem. uz LU klastera: srun -c 32 --time=10:00:00 --nodelist=node11 --partition=regular --pty bash conda activate jauna_vide python mysession.py