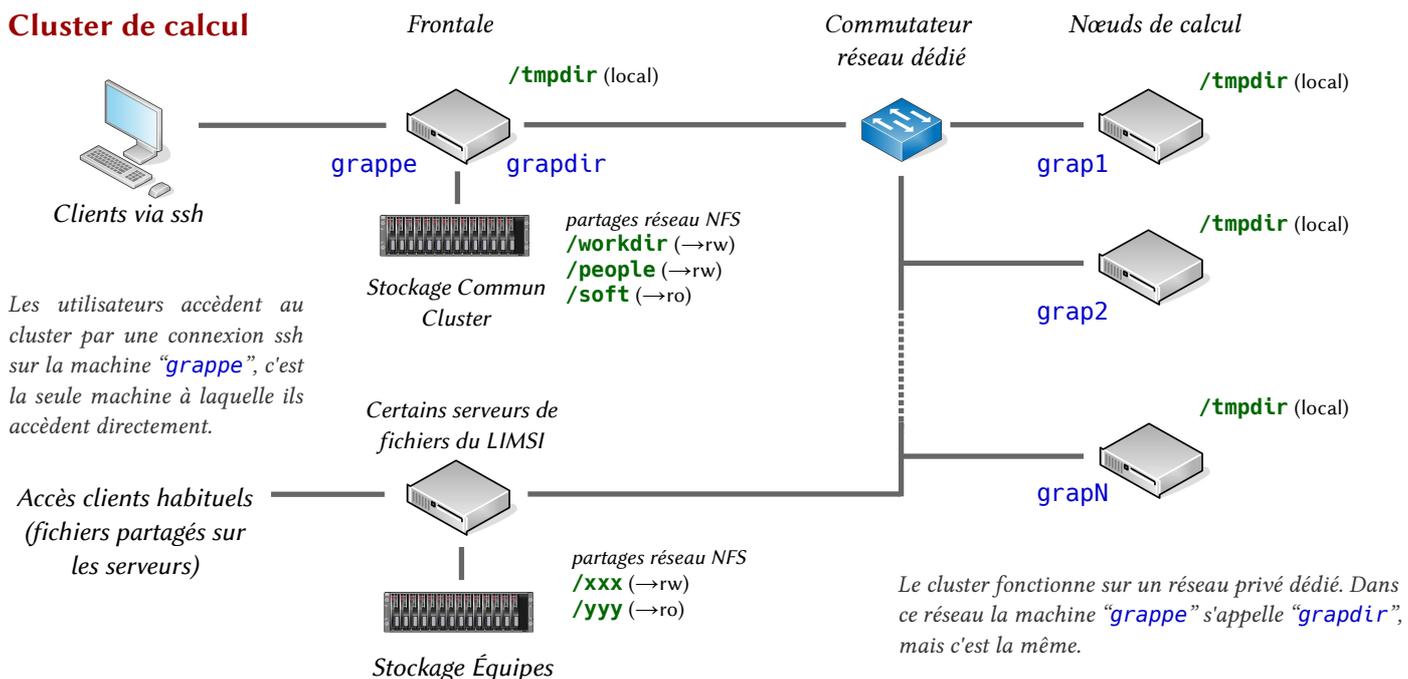


### Cluster de calcul



Pour les caractéristiques des nœuds, les volumes des espaces de stockage, le réseau, les serveurs de fichiers et les chemins de partage, les files d'attente... voir la page dédiée : <http://p2i.limsi.fr/grappe>

### Accès au Cluster

*pour commencer à l'utiliser...*

1) demande d'accès, envoi d'une demande par email à [p2i@limsi.fr](mailto:p2i@limsi.fr) en précisant son login labo (ici *me*)

...attendre l'email de réponse validant l'accès sur **grappe**

*Lors de cette procédure, vos répertoires personnel et de travail sont créés (avec des quotas limite de stockage), un fichier ~/.forward relaie les emails locaux vers votre compte labo, et un jeu de clés ssh spécifiques au cluster est mis en place.*

2) connection sur la machine **grappe** via ssh : `me@host:~$ ssh me@grappe` (mot de passe labo)

3) création et soumission des scripts de jobs sur le cluster... (doc au verso et en ligne)

### Bonnes pratiques stockage

*pour que le cluster soit bien utilisé...*

\$HOME  
/people/me

Partagé entre les nœuds, peu d'espace.  
Pour stocker vos exécutables personnels, scripts de jobs et autres fichiers de paramètres.

\$WORKDIR  
/workdir/me

Partagé entre les nœuds, utilisé pour stocker des données à traiter volumineuses, non accessibles autrement par les nœuds de calcul, et pour rapatrier les résultats volumineux.

⚠ Un **nettoyage périodique** des anciennes données est réalisé automatiquement.

☞ Une fois vos jobs terminés, pensez à récupérer vos résultats et à les stocker ailleurs que sur le cluster - celui-ci n'est pas un système de stockage pérenne..

\$TMPDIR  
/tmpdir/idjob

Local sur chaque machine. Le gestionnaire de jobs y crée un répertoire spécifique temporaire pour la durée de vie de chaque job (répertoire automatiquement purgé à la fin du job).

☞ **Utilisez de préférence ce disque local pour vos données** (copie de données à traiter au début du job, stockage pendant le job, récupération des résultats à la fin du job).

⚠ Les espaces de stockage du cluster ne sont pas sauvegardés.

⚠ Les espaces de stockage du cluster ne sont pas faits pour du partage de données.

### Définition d'un job

Un fichier texte script-shell contient des **directives** permettant de spécifier des options du job, et des **commandes** pour lancer les calculs et transférer les données.

Il est soumis à l'ordonnanceur de jobs avec la commande :

`qsub script`

Il sera exécuté sur les nœuds de calcul.

*Directives pour l'exécution du job*

*Répertoire temporaire pour l'exécution*

*Transfert des données/binaires/params*

*Traitements*

*Transfert des résultats*

```
#!/bin/bash
#PBS -N LongRun3
#PBS -l walltime=23:00:00,mem=1gb
cd $TMPDIR
cp $PBS_0_HOME/* ./
cp $WORKDIR/data1/* ./
./monproc
./postproc3
cp data.res $WORKDIR/$PBS_JOBNAME.res
cp status $PBS_0_HOME/$PBS_JOBNAME.sta
```

*voir détails au verso*

---

## Variable à l'exécution des jobs

Reprises (en mettant PBS\_0\_) lors de la soumission par `qsub` sur `grapdir` :

PBS\_0\_HOME Répertoire perso utilisateur \$HOME  
PBS\_0\_LOGNAME Login utilisateur \$LOGNAME  
...PBS\_0\_LANG, PBS\_0\_PATH, PBS\_0\_MAIL, PBS\_0\_SHELL, PBS\_0\_TZ (...)

Définies lors de la soumission par `qsub` sur `grapdir` :

PBS\_0\_HOST Nom de la machine (`grapdir`)  
PBS\_0\_WORKDIR Répertoire courant sur `grapdir` lors de la soumission  
PBS\_0\_QUEUE Queue de soumission initiale  
PBS\_0\_INITDIR Répertoire de travail au démarrage (si spécifié via l'option `-d`)

Définies lors de l'exécution du job sur le nœud :

PBS\_ENVIRONMENT PBS\_BATCH ou PBS\_INTERACTIVE  
PBS\_JOBID Identificateur associé au job par le cluster (ex. 56.grapdir ou 56-32.grapdir pour un job-array)  
PBS\_JOBNAME Nom donné au job (cf option `-N`)  
PBS\_NODEFILE Fichier contenant la liste des nœuds participants au job  
PBS\_ARRAYID ID associé pour un job d'un job-array (cf option `-t`)  
TMPDIR Répertoire de stockage **local** du job, pour la durée du job, à utiliser prioritairement

Variables du cluster, définies à la soumission et à l'exécution :

WORKDIR Répertoire utilisateur sur le stockage commun en partage réseau (spécial cluster `grappe`)

---

*Vous pouvez utiliser ces variables dans vos scripts de job pour les adapter à l'exécution sur les nœuds.*

*Note : l'existence d'un espace WORKDIR partagé entre tous les nœuds, ainsi que la possibilité d'accéder à certains volumes de stockages hors du cluster à partir des nœuds n'est pas possible sur tous les clusters de calcul.*

## Options d'exécution des jobs

Options `#PBS` pour les scripts de job (ces options peuvent aussi être fournies en ligne de commande) :

`-d rep` Répertoire de travail au démarrage (positionne PBS\_0\_INITDIR), qui est par défaut \$HOME  
`-N jobname` Nom donné au job (défaut nom du script soumis)  
`-o fich` Fichier de capture de stdout (défaut `jobname.o.jobid` dans PBS\_0\_WORKDIR)  
`-e fich` Fichier de capture de stderr (défaut `jobname.e.jobid` dans PBS\_0\_WORKDIR)  
`-M me@limsi.fr` Adresses emails de suivi de la vie du job  
`-m bea` Choix des événements du job à suivre : `b`=begin, `e`=end, `a`=aborted  
`-t arrayids` Lancement de N jobs via un job-array avec les `arrayids` indiqués (ex. 15-30 ; 1,3,7-12)  
`-V` Export de toutes les variables d'environnement vers le job  
`-T script` Indication de scripts prologue/épilogue au job (nommés prologue.`script` & épilogue.`script`)  
`-l limites` Limites pour le job

Pour les `limites`, on a entre autres (plusieurs `-l` ou séparateur virgule) :

`pmem=100mb` mémoire physique  
`walltime=03:45:00` durée maximale  
`nodes=2` nombre de nœuds sollicités  
`nodes=2:ppn=3` nombre de processeurs/nœuds (cœur) sollicités  
`file=150gb` espace de stockage à réserver

Voir la doc et les autres (nombreuses) options disponibles avec `man qsub`.

---

## Commandes de gestion des jobs & d'état du cluster

Commandes de base et options les plus courantes :

`qsub [options] script` Soumission d'un script à l'ordonnanceur du cluster  
`qstat [options][jobid]` Statut des jobs, options : `-a` all, `-r` running `-n` nodes, `-f` infos complètes, `-u user`, `-Q queue`  
`-B` statut du serveur de jobs  
`qdel jobid` Suppression d'un job  
`qhold jobid` Mise en attente d'un job  
`qrts jobid` Réactivation d'un job mis en attente  
`pbsnodes` État des nœuds de calcul du cluster