

## USER MANUAL

### High Performance Computing Cluster (HPC)

---



Chi tiết hệ HPC: <http://hcmip.ac.vn/hpc/>

#### 1. Đăng nhập – SSH login

```
nthoang@Dell-T3500:~$ ssh nthoang@hcmip.ac.vn
HPC cluster
Infor:
  compute nodes = 6
  Total number core = 200
  3 GPU: Tesla Quadro K2000
  CUDA core 384*3= 1152 core
  Workload manager: PBSpro
Detail summary: http://hcmip.ac.vn/hpc/
Support: nthoang@hcmip.vast.vn
```

**Domain:** hcmip.ac.vn

**Static IP:** 222.253.53.64

Sử dụng command: **ssh username@domain** hoặc **ssh username@IP** để truy cập vào hệ HPC

**Username = họ & tên viết tắt**

Ví dụ: nthoang = Nguyễn Thanh Hoàng

## Password mặc định cho tất cả user: hcmip

- Sau khi đăng nhập vào hệ HPC, username sẽ được yêu cầu đổi password.

\*Lưu ý: + **Đầu tiên nhập password mặc định**

+Sau đó mới nhập password mới và lặp lại password mới để xác thực

- Tạo passwordless cho giao thức ssh: sử dụng command “**ssh-copy-id username@hcmip.ac.vn**” , sau đó nhập password vừa đổi ở trên và đợi thông báo public-ssh-key của máy client đã được add vào Master node. Thực hiện lại kết nối ssh, từ bây giờ Master node sẽ không hỏi lại password.

- Data quota cấp cho mỗi user là 30 Gb cho thư mục /home/\$USER để lưu kết quả và code tính toán, khuyến nghị thường xuyên backup data về máy client hoặc Data server.

## 2. Tạo file scripts để submit Job (Các file mẫu đã được gửi sẵn vào thư mục /home/\$USER)

```
#!/bin/bash
```

```
#PBS -N Job_name          # đặt tên cho job
```

```
#PBS -M Your_email        # thay bằng email của bạn
```

```
#PBS -m abe              # đặt cho hệ thống tự động gửi email thông báo (b:begin, e:error,a:abort)
```

```
#PBS -j oe               #output & error được ghi vào cùng một log file
```

```
#PBS -l nodes=1:ppn=4:normal # nodes= số node, ppn = số logical CPU (thread)
```

```
#PBS -q normal          # chọn queue thực thi (mặc định là normal)
```

```
Your_command            # Lệnh để chạy code bình thường
```

```
Mpirun -np number_core ./command          # Lệnh để chạy code sử dụng môi trường Parallel  
với thư viện MPI
```

\* Note: số core (number\_core) phải thống nhất trong toàn bộ file script

\* Scripts **normal-serial.sh** sẽ sử dụng **1 CPU/1 node** để tính toán

**normal-parallel.sh** sẽ sử dụng **4 CPU/1 node** để tính toán

**fast.sh** sẽ sử dụng **16 CPU/2 node** để tính toán

\*Các \$USER đã được tạo passwordless để tính toán song song giữa các compute-nodes

## 3. Submit, theo dõi và xóa Job:

- Để submit Job sử dụng lệnh: **qsub Job\_name**
- Để theo dõi Job sử dụng lệnh: **qstat** (cho thông tin cơ bản)

**qstat -f ID\_job** (cho thông tin cụ thể về Job, các lỗi đang gặp...)

Một số trạng thái (state) của Job như: Q (queue waiting- job đang đưa vào hàng đợi để chạy), R (running- Job đang được thực thi), E (báo lỗi và đưa vào hàng đợi, Job không được thực thi)...

**Lưu ý:** Khi sử dụng lệnh qstat để kiểm tra trạng thái Job, sau 1 thời gian nếu Job không chuyển từ trạng thái Q sang R hoặc báo lỗi **E** thì user nên chạy lệnh **qstat -j Job\_ID** để xem lỗi cụ thể của Job nhằm sửa lỗi.

Một số lỗi cơ bản:

JOB_EXEC_OK	0	Job execution successful
JOB_EXEC_FAIL1	-1	Job execution failed, before files, no retry
JOB_EXEC_FAIL2	-2	Job execution failed, after files, no retry
JOB_EXEC_RETRY	-3	Job execution failed, do retry
JOB_EXEC_INITABT	-4	Job aborted on MOM initialization
JOB_EXEC_INITRST	-5	Job aborted on MOM init, chkpt, no migrate
JOB_EXEC_INITRMG	-6	Job aborted on MOM init, chkpt, ok migrate
JOB_EXEC_BADRESRT	-7	Job restart failed
JOB_EXEC_CMDFAIL	-8	Exec() of user command failed

```
File Edit View Search Terminal Help
[nthoang@hcmip-master ~]$ qsub vp.sh
33.hcmip-master
[nthoang@hcmip-master ~]$ qstat
Job ID          Name          User          Time Use S Queue
-----
33.hcmip-master nanorod       nthoang       0 R fast

[nthoang@hcmip-master ~]$ qstat -f
Job Id: 33.hcmip-master
Job Name = nanorod
Job_Owner = nthoang@hcmip-master
resources_used.cput = 00:01:24
resources_used.vmem = 6608008kb
resources_used.walltime = 00:00:06
resources_used.mem = 216448kb
resources_used.energy_used = 0
job_state = C
queue = fast
server = hcmip-master
```

- Để xóa Job sử dụng lệnh: **qdel Job\_ID**
- Để giữ/dừng tạm thời một Job: **qhold Job\_ID**

- Hiện tại do tài nguyên tính toán chưa được nâng cấp nên mỗi \$USER chỉ được thực hiện cùng lúc tối đa 3 Job (đối với queue normal), 2 job (đối với queue fast). Sắp tới khi mở rộng tài nguyên tính toán sẽ nâng lên 10 Job/user.

#### 4. Set environment:

-Sử dụng file scripts exportPATH.sh được viết sẵn, đặt tại /home/\$USER/ để khai báo biến môi trường nhằm sử dụng được thư viện openMPI, gcc compile, python3, pyscf ...trên các compute nodes.

Chạy command duy nhất “**sh ./exportPATH.sh**”

#### 5. Package/software/library

Các Package/Software được cài đặt trên hệ HPC:

- + gcc 9.3.0
- + Python3.6
- + Pyscf
- +Matlab 2018b
- + openmpi 4.1.4
- + MPICH 4.0.1
- + git 1.8.3.1
- + curl 7.29.0
- + Wget 1.14
- ...

- \$USER khi muốn cài đặt thêm packages (compile từ source code) thì đường dẫn để cài đặt chung cho tất cả \$USER trên toàn hệ thống HPC là **/share/installs/your\_package/** hoặc cài trên thư mục \$HOME-DIRECTORY tại đường dẫn **/home/\$USER/your\_packages/**, sau đó exportPATH để sử dụng. Lưu ý phải cài đặt vào **một trong 2 đường dẫn trên** thì các **compute-node mới có thể share data với Master-node**, nếu cài đặt vào đường dẫn khác (để mặc định) thì chỉ Master-node có thể sử dụng các package/thư viện mà \$USER vừa cài đặt dẫn đến tình trạng khi chạy thử code trên Master-node thì hoạt động nhưng khi submit\_job thì các compute-node không thể thực hiện các tính toán cần thiết.

- \$USER cài đặt các thư viện và package sử dụng PIP trong python thì sử dụng command “**pip3 install your\_package/library**” để cài đặt trên master node, sau đó sử dụng command “**pdsh pip3 install your\_package/library**” để cài đặt trên các compute node.
- Nhằm hướng đến sự ổn định cho hệ HPC nên các package/library cài đặt từ các **mirror source** chỉ có user root/admin mới có quyền cài đặt, các \$USER muốn cài đặt thêm các library/package đặc biệt mà không thể compile từ source code vui lòng liên hệ quản trị viên để được hỗ trợ.