

<http://bit.ly/r-parallele-jour-1>

Utilisation zoom

- Mettez votre nom complet, suivi de votre pronom de choix
- Si vous éprouvez des problèmes techniques, mentionnez-les dans le chat.
- Si vous avez des questions générales (par exemple: Quel est le mot de passe?), posez-les dans le chat.
- Si vous avez des questions reliées au contenu du cours, posez-les dans la section Q&A
- Utilisez la main pour mentionner que vous avez terminé un exercice. Enlevez la main lorsque l'exercice est terminé pour tous.
- Lorsque je répons à votre question, vous pouvez interagir avec la voix!



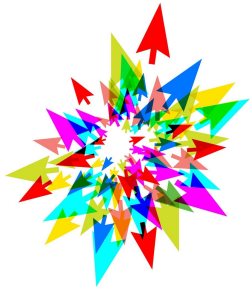
Partenaires connectivité

Partenaires financiers



Calcul Québec

Premiers pas sur les serveurs de calcul

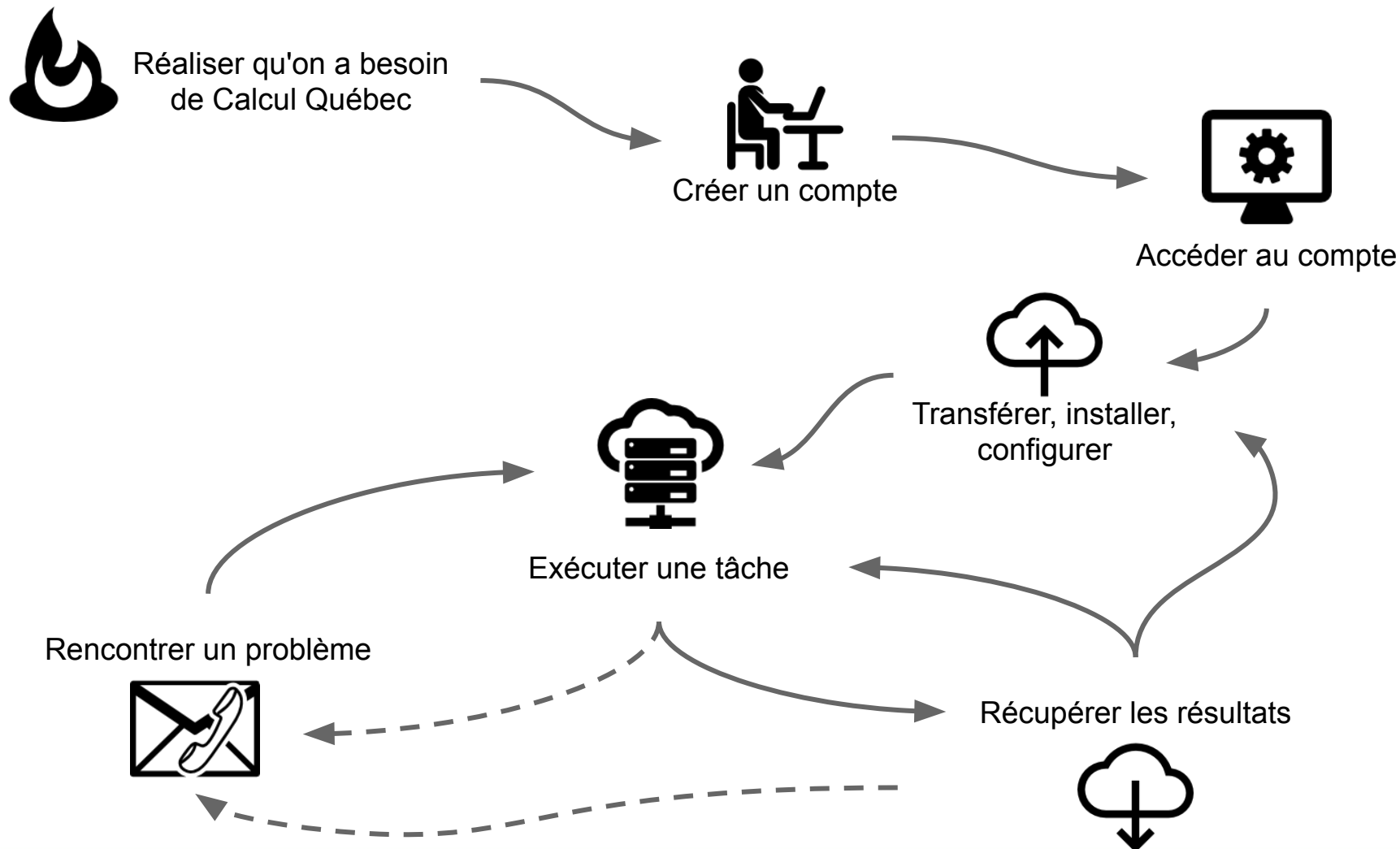


compute | **calcul**
canada | canada

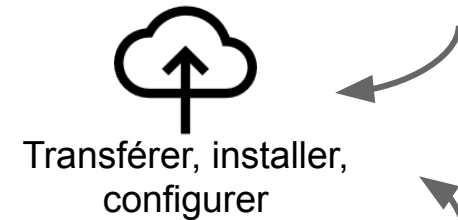
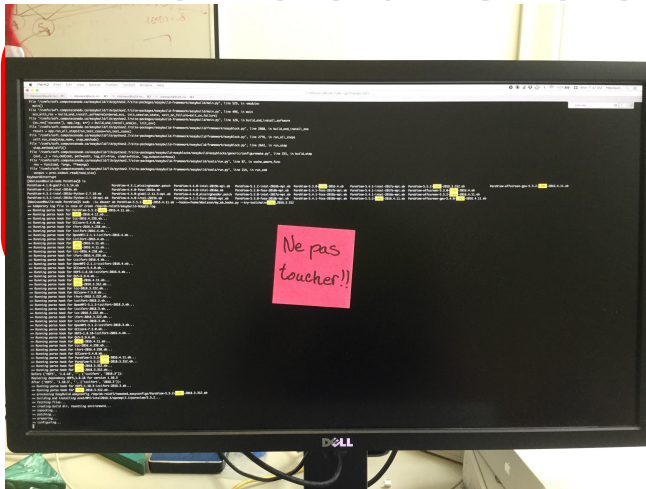


Calcul Québec

Parcours de l'utilisateur type



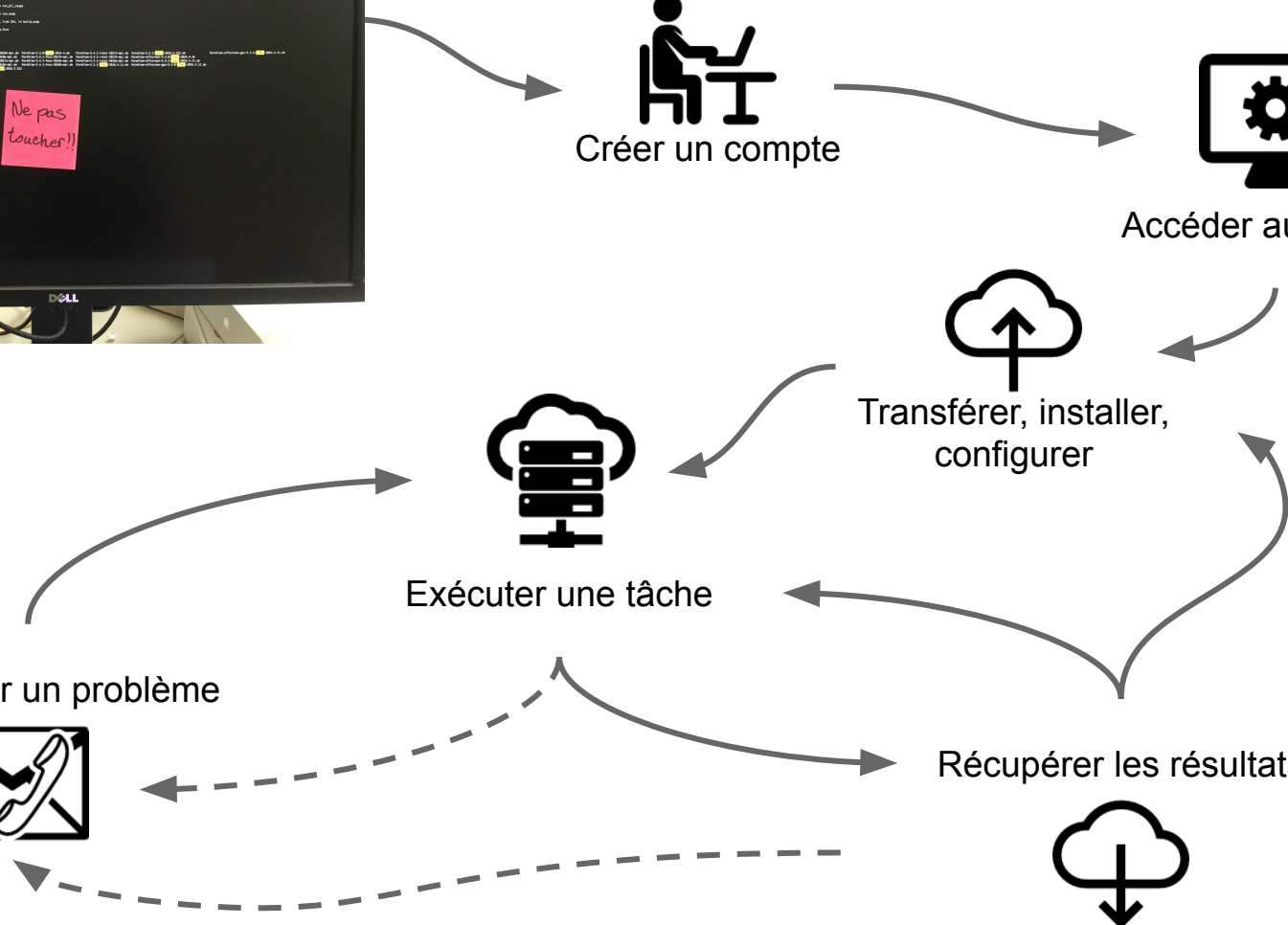
Parcours de l'utilisateur type



Rencontrer un problème

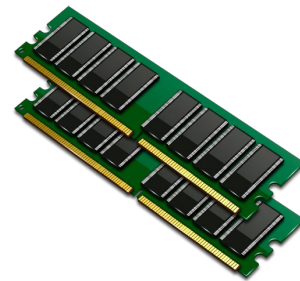
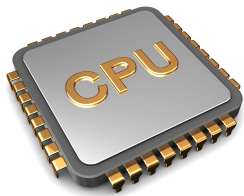


Récupérer les résultats



Calcul Informatique de Pointe (CIP)

Tout calcul qui fait une **utilisation intensive** de ressources informatiques, ou qui est **limité par les ressources disponibles**.



Des problèmes qui touchent tous les domaines



1. Modèles complexe
 - a. Dynamique moléculaire
 - b. Dynamique des fluides
 - c. Simulations climatiques



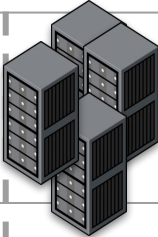
2. Beaucoup de données
 - a. Apprentissage machine
 - b. Analyses de données
 - c. Traitement d'images

Le CIP pour des simulations

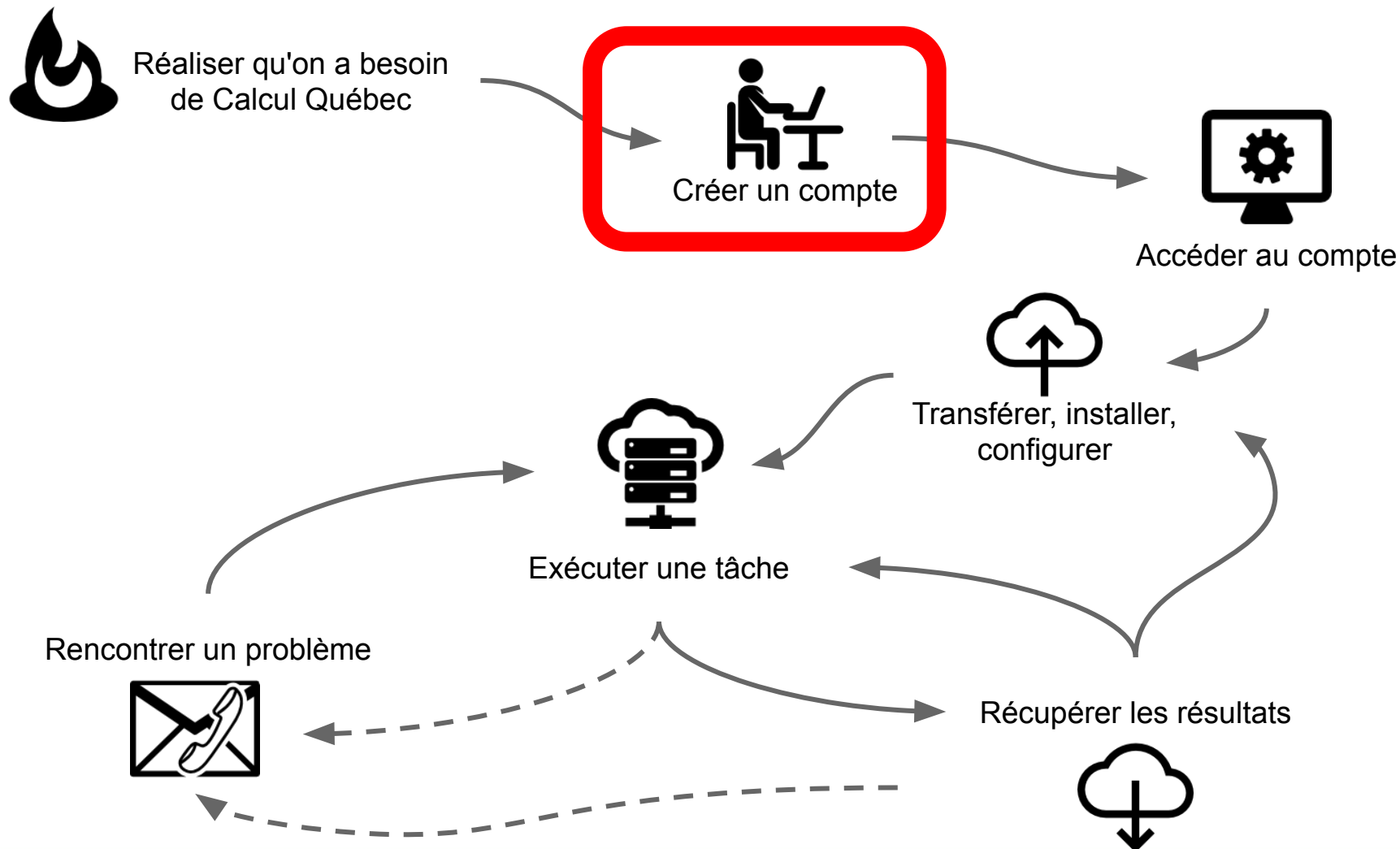
Le faire “en vrai” serait trop long, complexe, coûteux.



Votre ordinateur en comparaison

| |  vosre ordinateur |  noeud de calcul |  grappe de calcul |
|----------------------------|--|--|--|
| coeurs | 2 à 12 | 24 à 48 | 35,000 |
| mémoire | 4 à 32 Go | 128 Go à 3 To | 142 To |
| réseautique | 1 Gb/s | 56-100 Gb/s | - |
| stockage | 1 To HDD | 960GB SSD | 10 Po Lustre |
| carte graphique | 2560 coeurs 8Go | 3584 coeurs 16 Go | 584 GPU |
| accessibilité | accès direct | ordonnanceur | - |

Parcours de l'utilisateur type





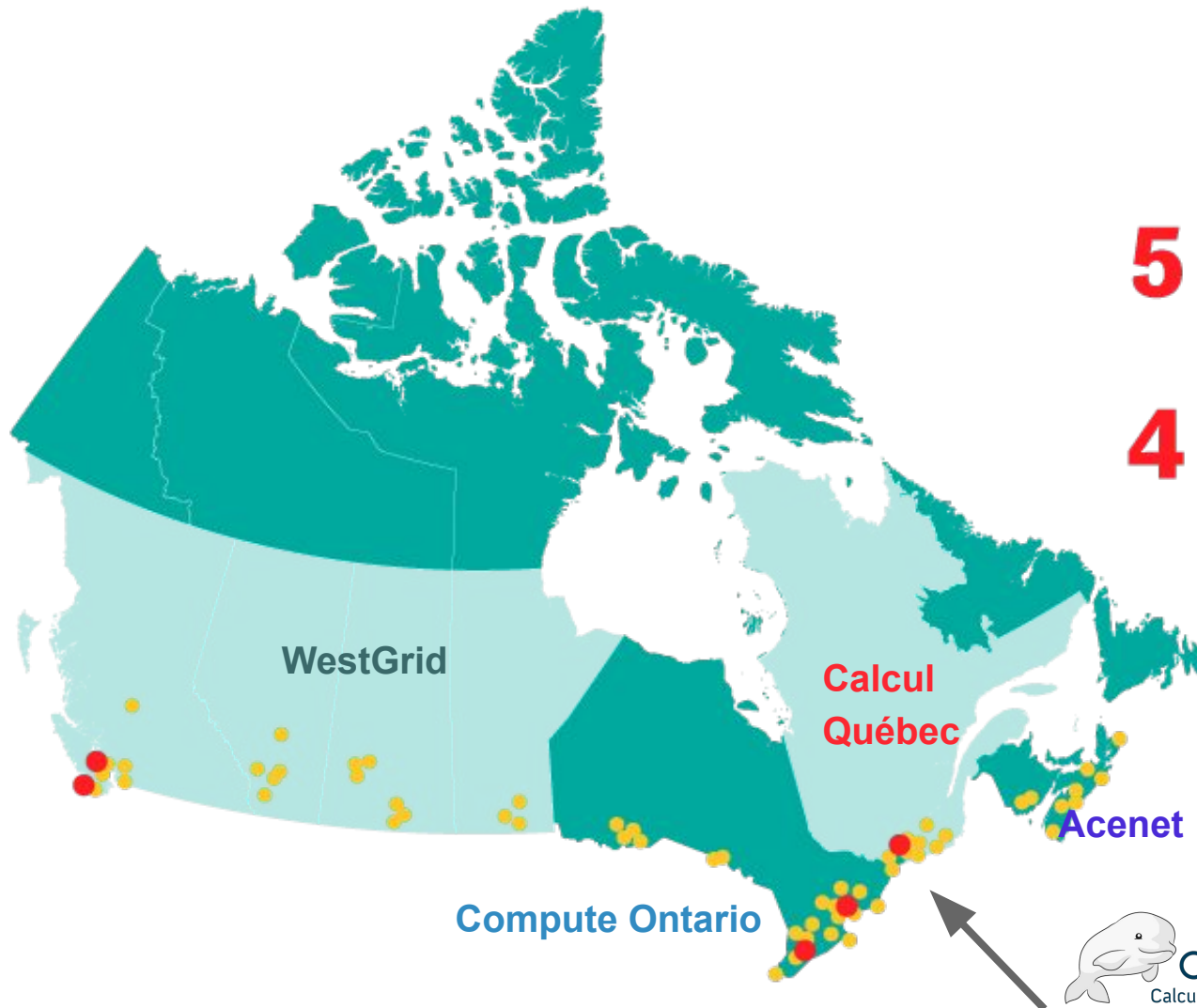
compute
canada

| **calcul**
canada



Calcul Québec

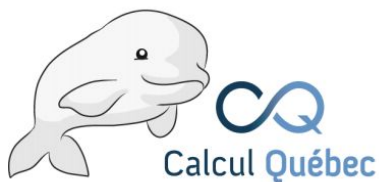
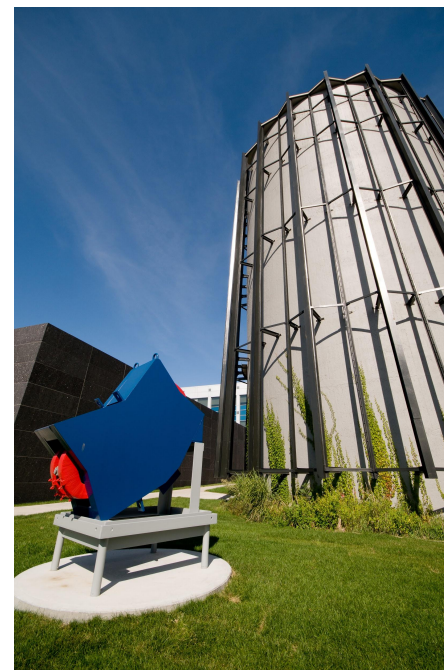
Vous avez accès au Canada



In **2018**,
5 new NATIONAL
systems and
4 legacy systems
remain
available to
researchers
across Canada



Nos centres de données



UNIVERSITÉ
LAVAL

- **Infrastructures**
 - superordinateurs
 - accélérateurs graphiques
 - infonuagique
 - stockage
- **Expertise (40+ employés)**
 - 5 universités
 - Analystes
 - Administrateurs systèmes
 - Gestionnaires
- **Services**
 - Services-conseils
 - Services d'infrastructure
 - Formations



Vous inscrire

<https://ccdb.computecanada.ca/>



compute | **calcul**
canada | canada

English || Français
Se connecter

Mon compte ▾ | FAQ

Bienvenue sur le site de la base de données de Calcul Canada (CCDB), la porte d'entrée vers vos comptes, statistiques d'utilisation et allocations pour la plateforme de calcul informatique de pointe de Calcul Canada.

Pour avoir accès aux ressources de Calcul Canada, hébergées à travers le pays par nos partenaires régionaux ACEnet, Calcul Québec, Compute Ontario et WestGrid, veuillez vous inscrire à la CCDB.

Tout membre du corps professoral dans une université canadienne est admissible à l'utilisation des ressources de Calcul Canada. Une fois inscrit, il pourra également parrainer ses étudiants, son personnel de recherche ainsi que ses collaborateurs travaillant sur ses projets de recherche.

Les chercheurs gouvernementaux, d'entreprises à but non-lucratif ainsi que les industries peuvent également avoir accès aux ressources de Calcul Canada. Veuillez adresser vos demandes d'information à info@computecanada.ca.

Calcul Canada est financé par la fondation canadienne pour l'innovation (FCI) ainsi que par les gouvernements provinciaux par le biais de différentes initiatives visant la recherche et l'innovation.

Veillez vous connecter

Se connecter:

Pour vous connecter, vous pouvez utiliser votre adresse de courriel, votre identifiant Calcul Canada (CCI), votre rôle à Calcul Canada (CCRI), ou votre nom d'utilisateur Calcul Canada.

Mot de passe:

[Se connecter](#) || [Vous avez oublié votre mot de passe](#) || [S'inscrire](#)

© 2008-2018 Calcul Canada || [Envoyer un courriel au webmestre.](#)

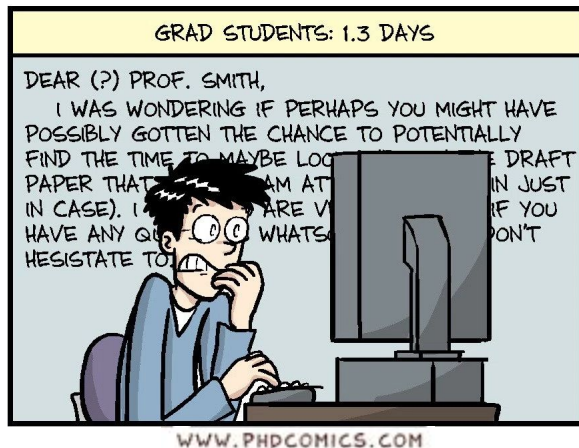


Créer un compte - chercheur



1. Créer un compte à Calcul Canada <https://ccdb.computecanada.ca/>
2. Cocher un rôle de chercheur principal / principal investigator
3. Confirmation manuelle par un membre du personnel de Calcul Canada
4. Parrainer les étudiants

Créer un compte - étudiant



1. Trouver un parrain
2. Demander à son parrain de se créer un compte + fournir son CCRI (i.e.: abc-123-01)
3. Créer un compte à Calcul Canada <https://ccdb.computecanada.ca/>
4. Cocher un rôle d'utilisateur parrainé
5. Le parrain confirme l'inscription
6. Calcul Canada confirme le compte

Soyez zen, soyez à l'affût

3 courriels

le compte du chercheur
le compte de l'étudiant
le chercheur connaît l'étudiant

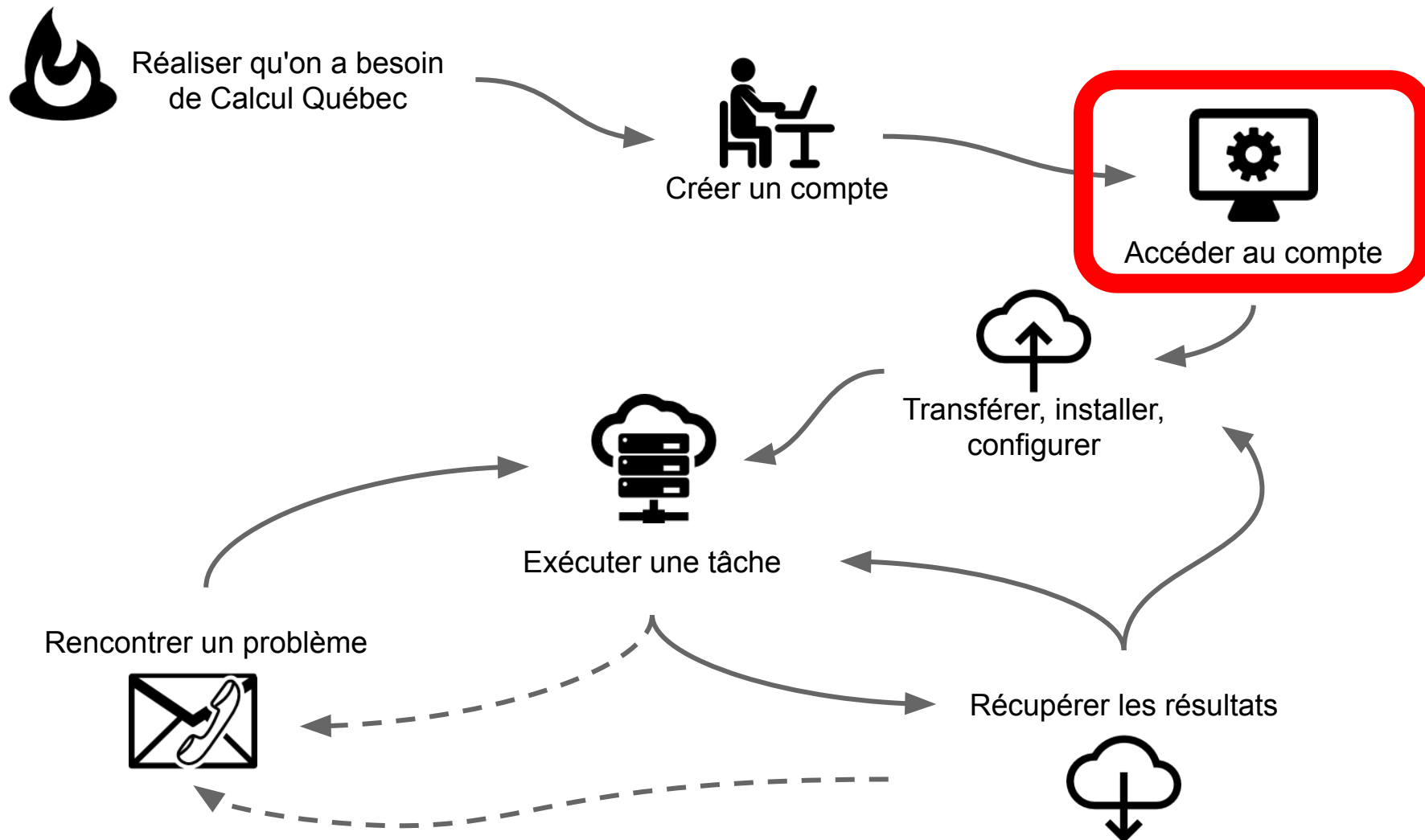


**La validation manuelle,
ça prend du temps!**

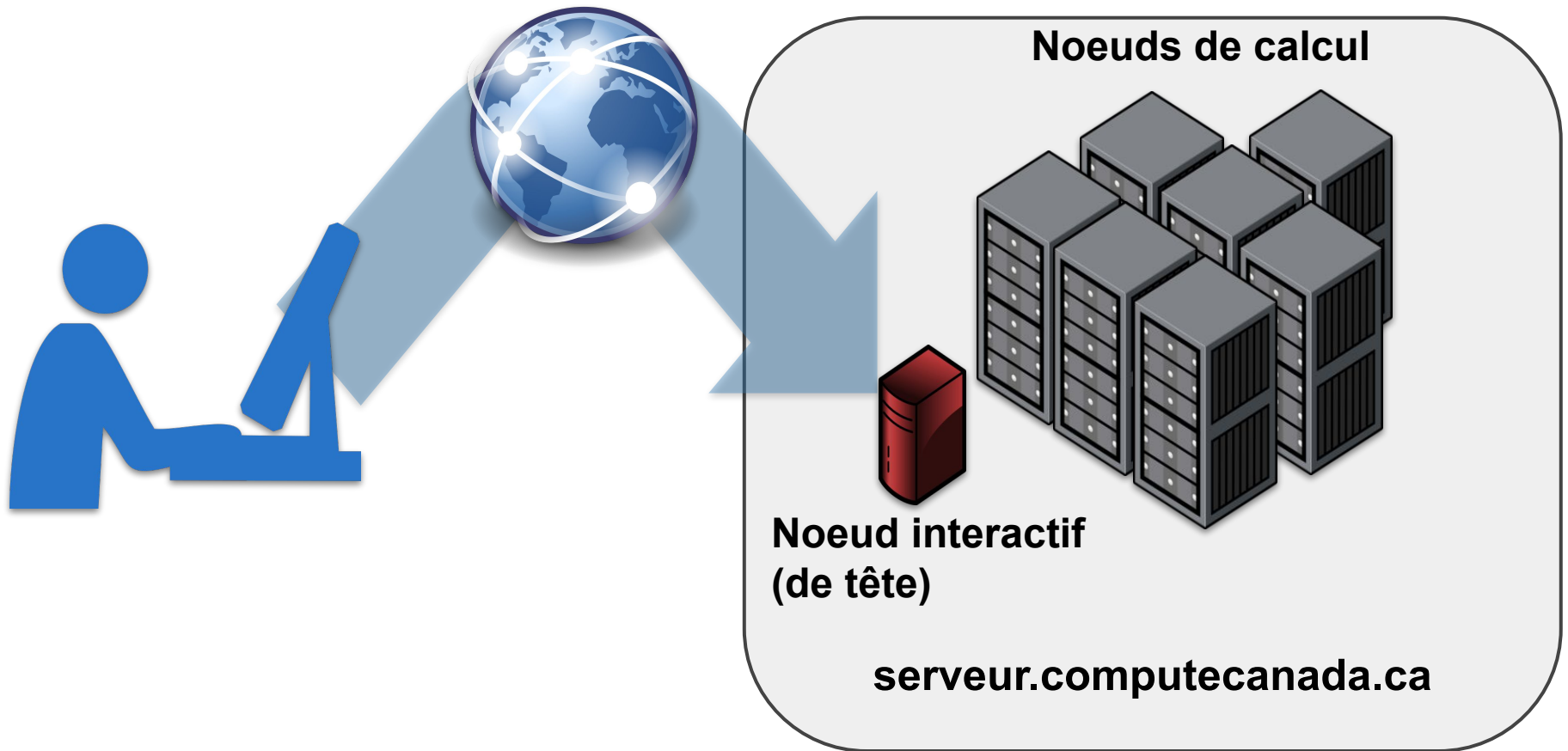


**Vérifiez votre filtre spam
pendant 48h!**

Parcours de l'utilisateur type



Se connecter au serveur



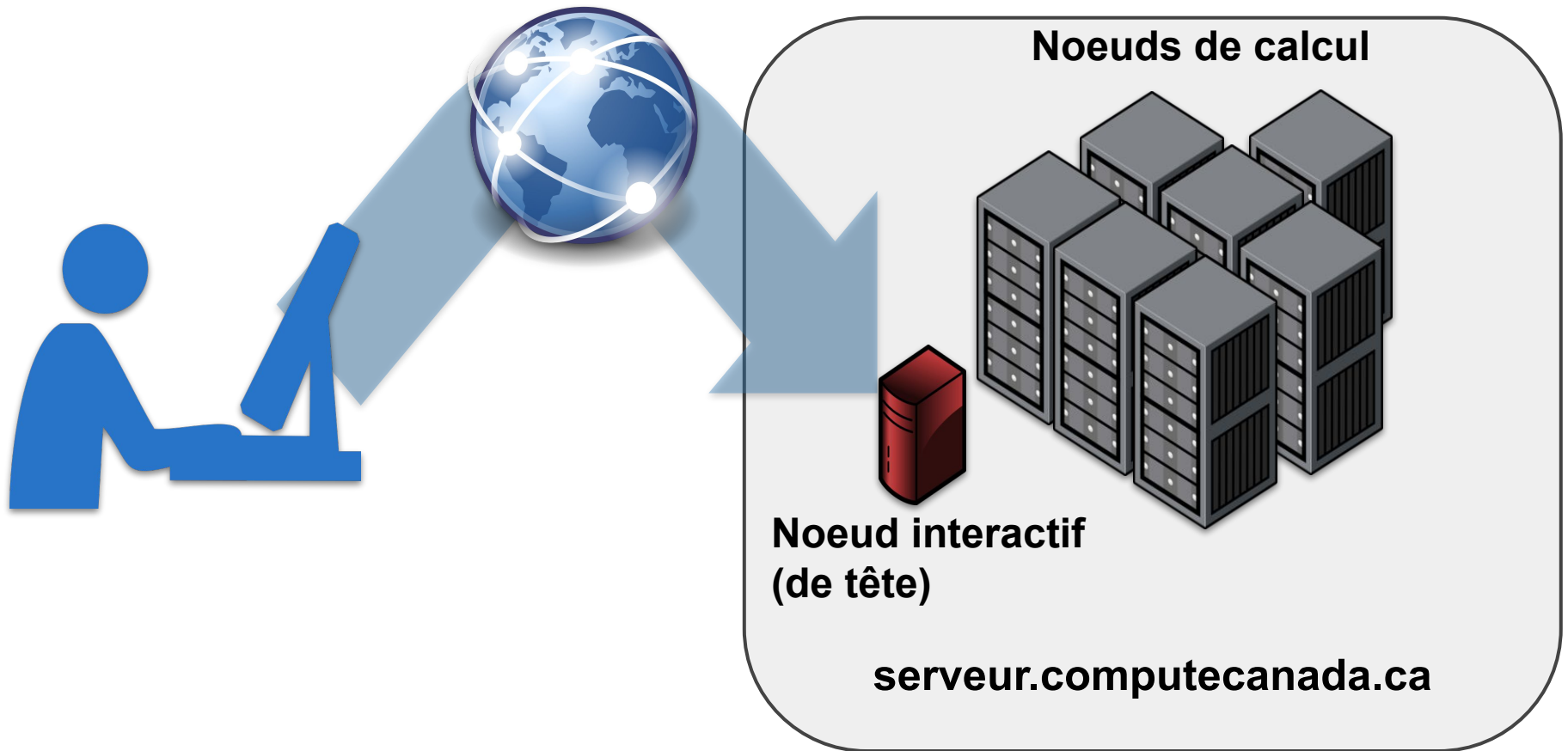
Choisir un serveur

Quel serveur choisir ?

1. Choisissez [Cedar](#), [Graham](#), [Niagara](#), [Béluga](#)
2. Choisissez celui qu'utilise votre groupe
3. Toujours pas certain, écrivez-nous :

support@calculcanada.ca

Se connecter au serveur



Se connecter au serveur

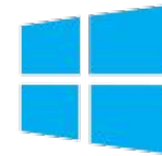
```
ssh username@server.compute canada .ca
```



Mac



Linux



Windows



Terminal

```
yolande@DESKTOP-J07RV17:~$ ssh username@server.compute canada .ca
```



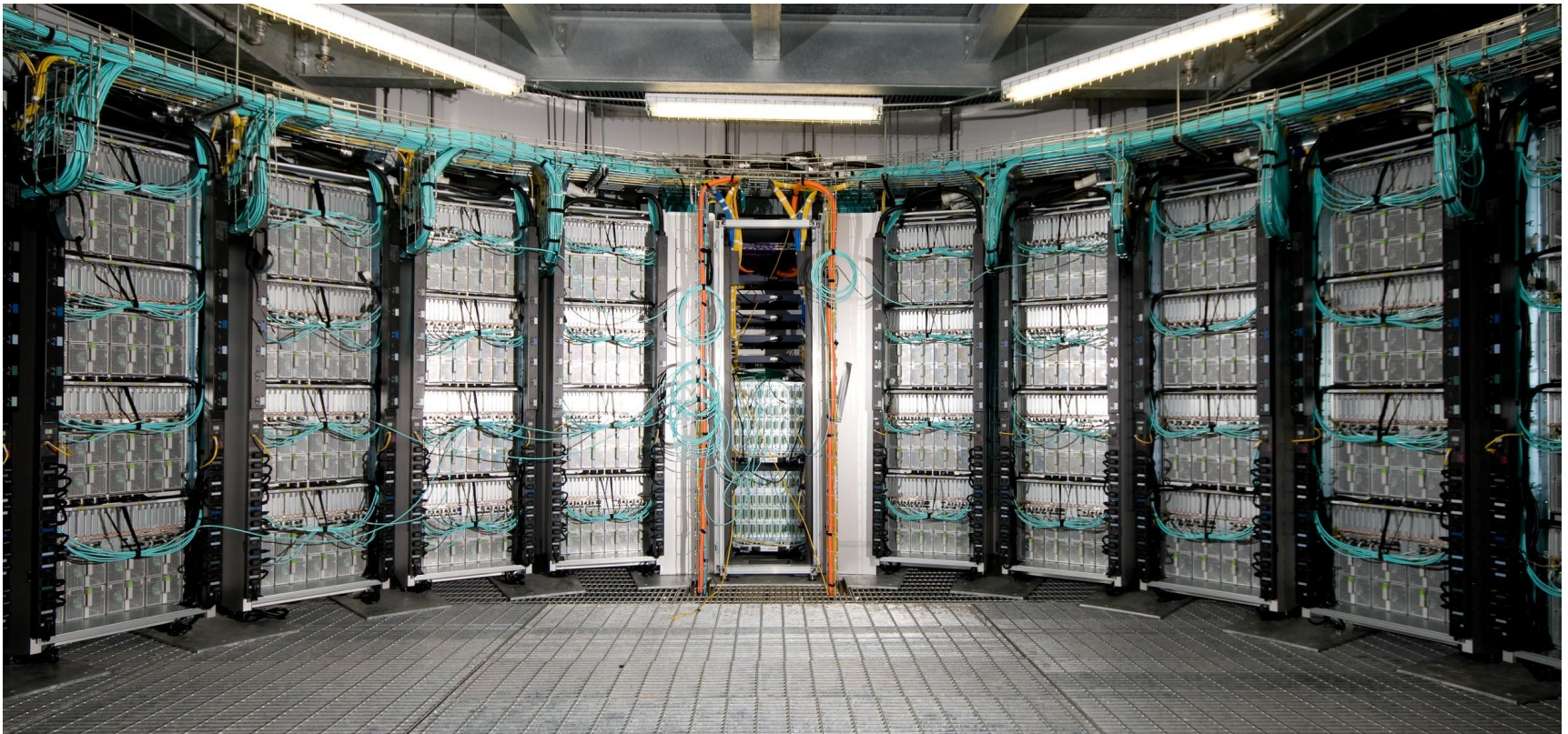
MobaXterm

+ Start local terminal

↻ Recover previous sessions

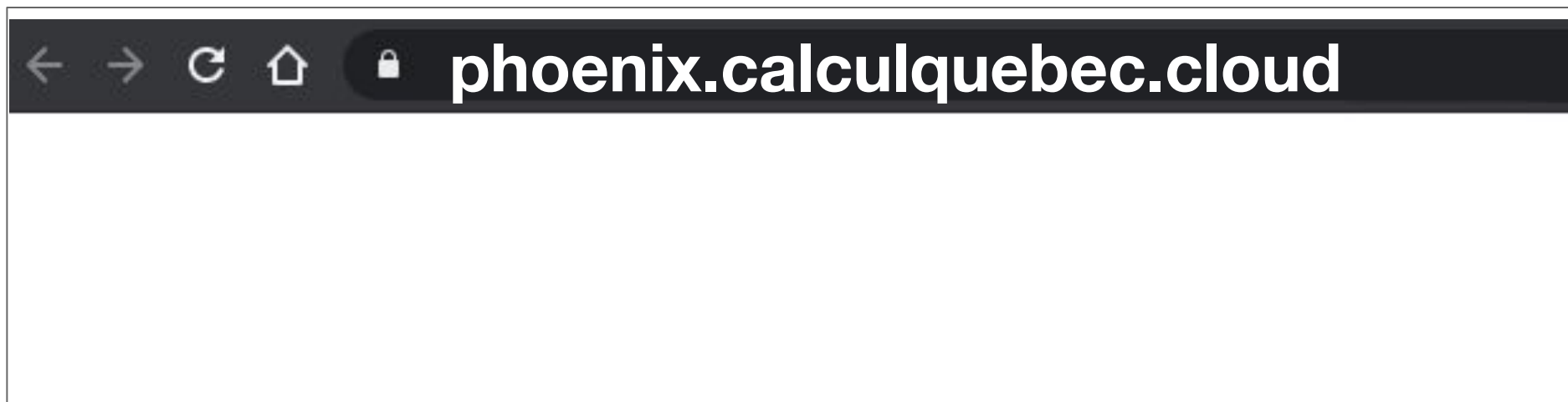
```
[2019-10-28 15:23.03] ~  
[Julie.DESKTOP-J07RV17] > ssh username@server.compute canada .ca
```


Grappe de calcul



Exercice 1

Connectez-vous au serveur de calcul virtuel de la manière la plus facile: votre explorateur web!



phoenix.calculquebec.cloud

Sign in

Username:

Password:

OTP:



mot de passe:

phoenix.calculquebec.cloud

Server Options

Reservation

None ▾

Account

None ▾

Time (hours)

1.0

Number of cores

1

Memory (MB)

1503

Enable core oversubscription? Recommended for interactive usage

GPU configuration

None ▾

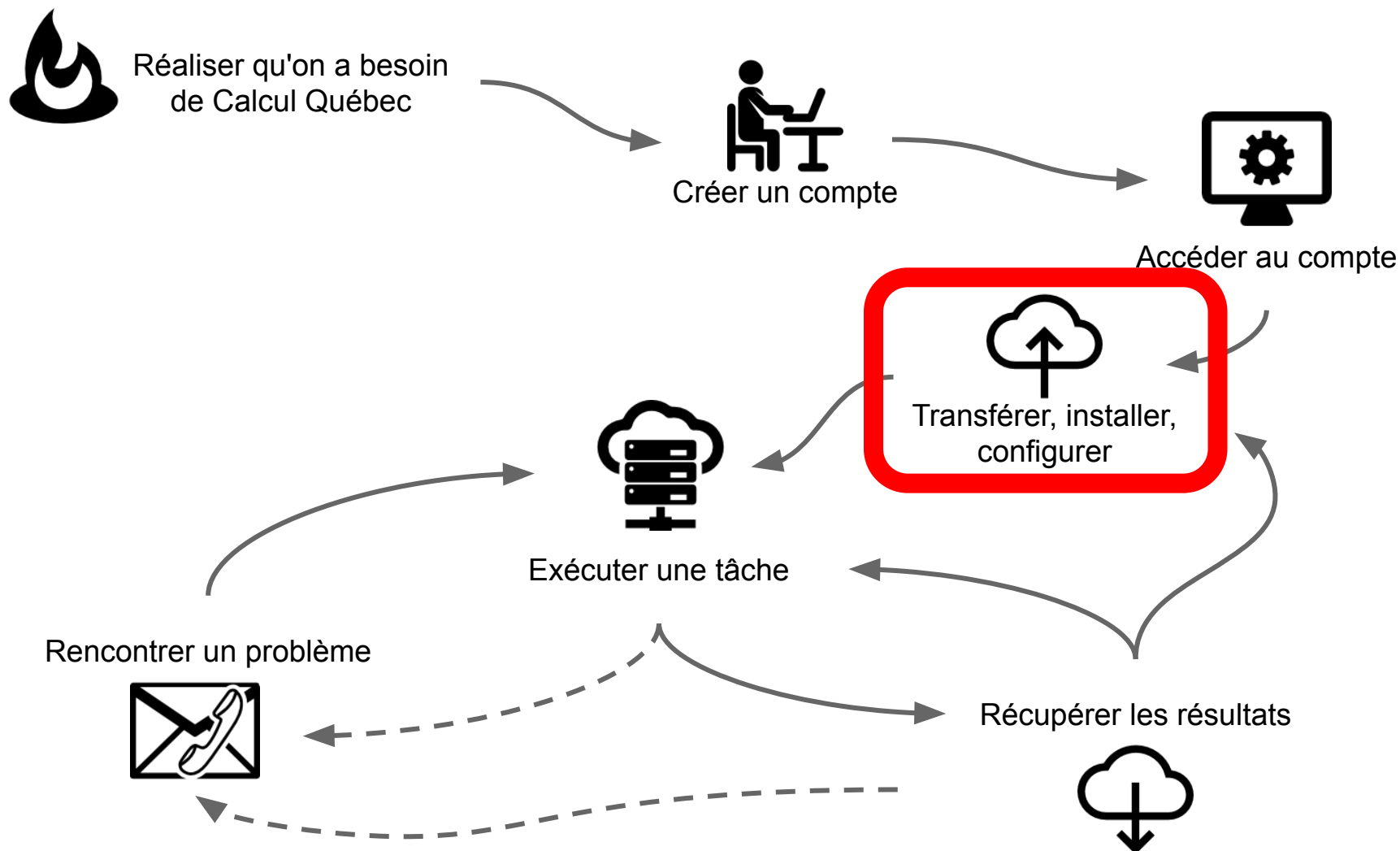
User interface

JupyterLab ▾

- Jupyter Notebook
- JupyterLab
- Terminal
- VS Code
- RStudio
- Desktop



Parcours de l'utilisateur type



Transférer des fichiers

- scp (secure copy)

```
scp fichier.txt user@server.computecanada.ca:
```

- outils graphiques (MobaXterm)
- Globus

Exercice 2

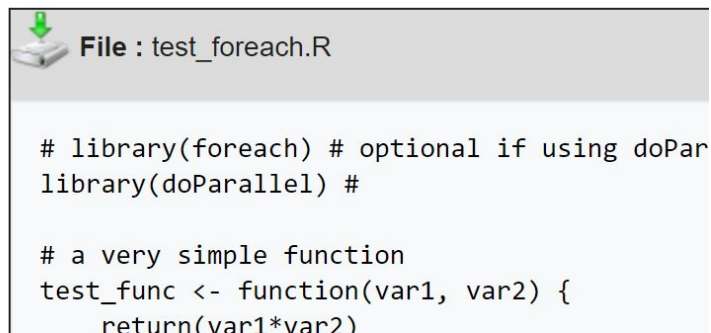
1. Cherchez “R” sur le wiki de Calcul Canada

docs.calculcanada.ca

2. Téléchargez les fichiers pour la formation

- 4.1.1 Installing
- 4.1.2 Running
- 4.2 doParallel and foreach
 - 4.2.1 Usage
 - 4.2.2 Running
- 4.3 doParallel and makeCluster

1. Place your R code in a script file, in this case the file is



```
File : test_foreach.R

# library(foreach) # optional if using doPar
library(doParallel) #

# a very simple function
test_func <- function(var1, var2) {
  return(var1*var2)
}
```

Transférer vos fichiers



Logout

Control Panel

Files

Running

Clusters

Softwares

Select items to perform actions on them.



Upload

New ▾



0



📁 /

Name ↓

Last Modified

File size

📁 projects

an hour ago

📁 scratch

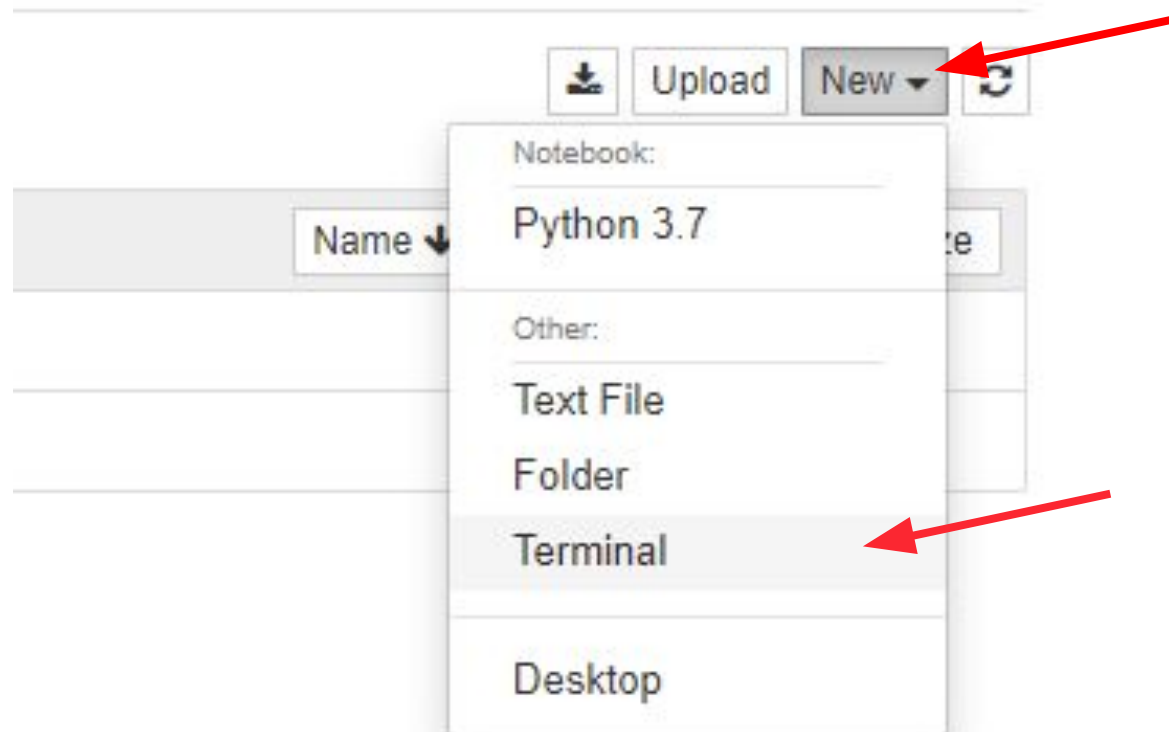
an hour ago

Configuration

Une fois connecté au serveur, vous avez accès à des commandes

- `pwd` (present working directory)
- `ls` (list files)
- `cd <dir>`(change directory)
- `mkdir <dir>` (make directory)
- `cp <file1> <file2>` (copy file)
- `rm <file>` (remove file)

Ouvrir un terminal



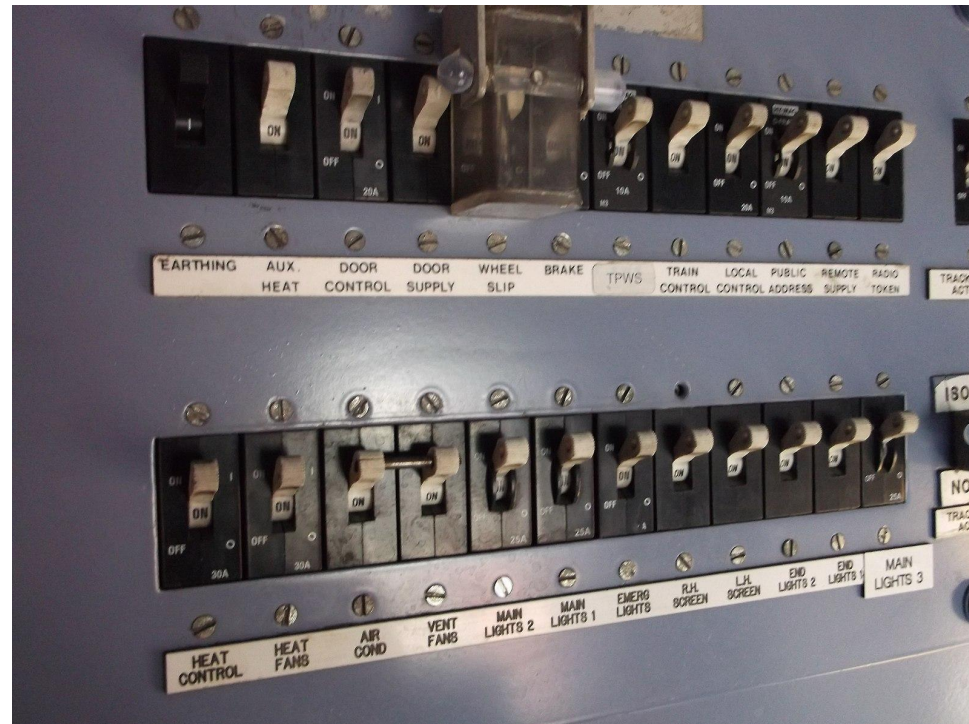
Charger des logiciels

La plupart des logiciels dont vous aurez besoin sont déjà installés sur le serveur. Ces logiciels sont disponibles sous la forme de modules.

Les modules permettent d'avoir plusieurs versions d'un même logiciel qui cohabitent, et de gérer les conflits.

Modules

Les modules sont comme un panneau d'interrupteurs

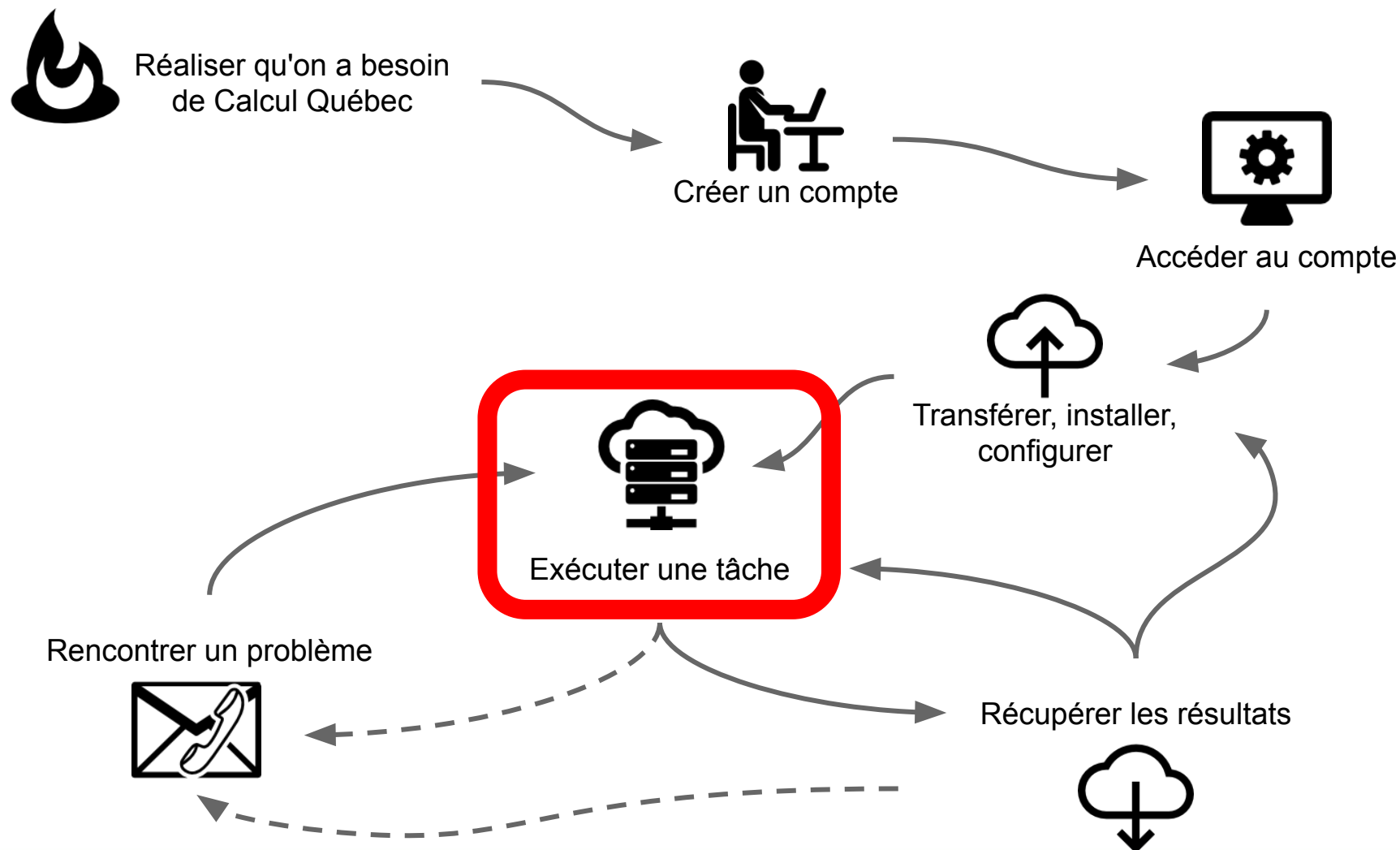


Commande module

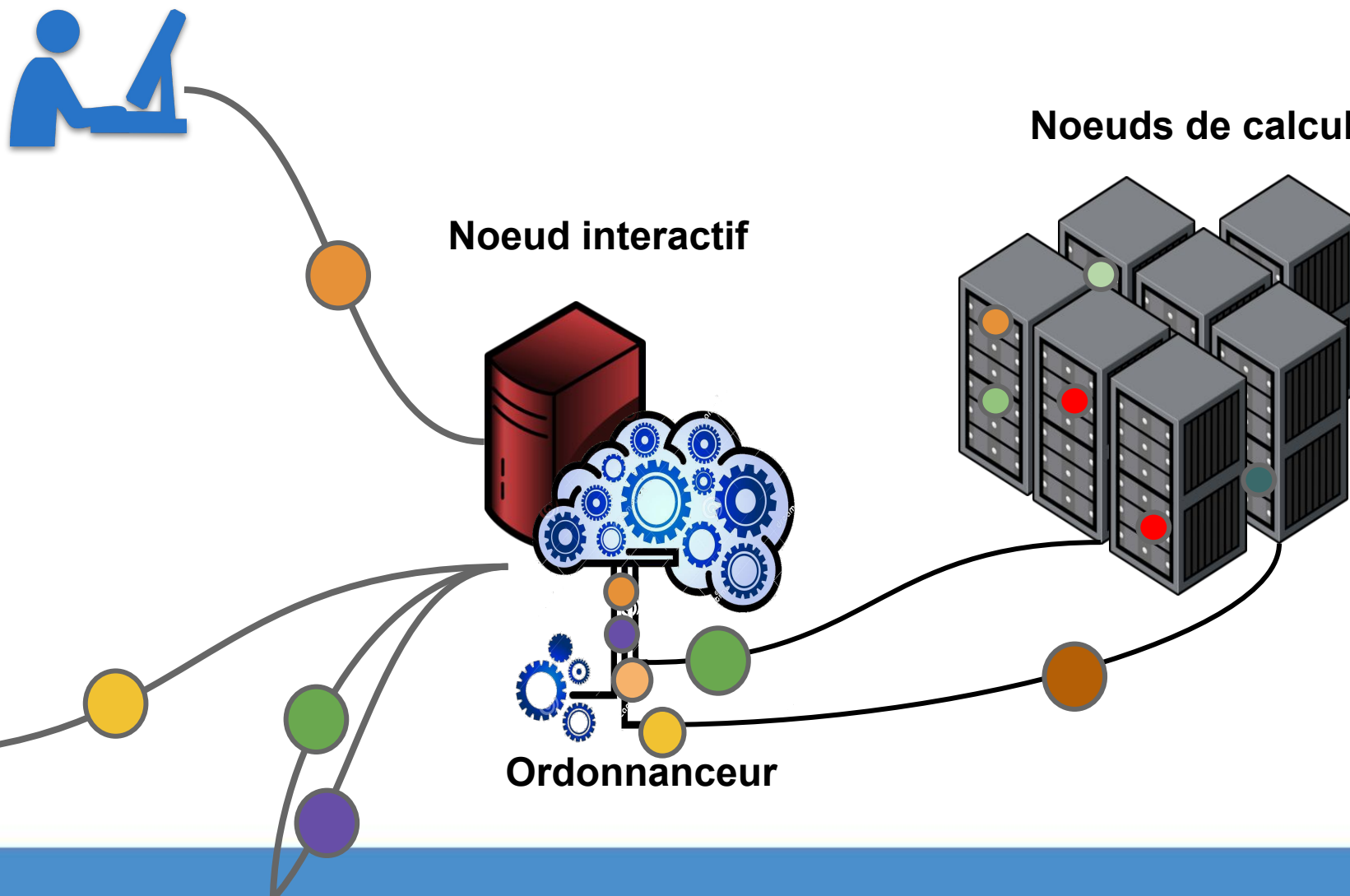
`module` est la commande à utiliser pour interagir avec les applications sur les grappes de calcul.

- `module spider <module>` (recherche)
- `module avail` (disponible)
- `module list` (liste)
- `module load <module>` (charge)
- `module unload <module>` (décharge)

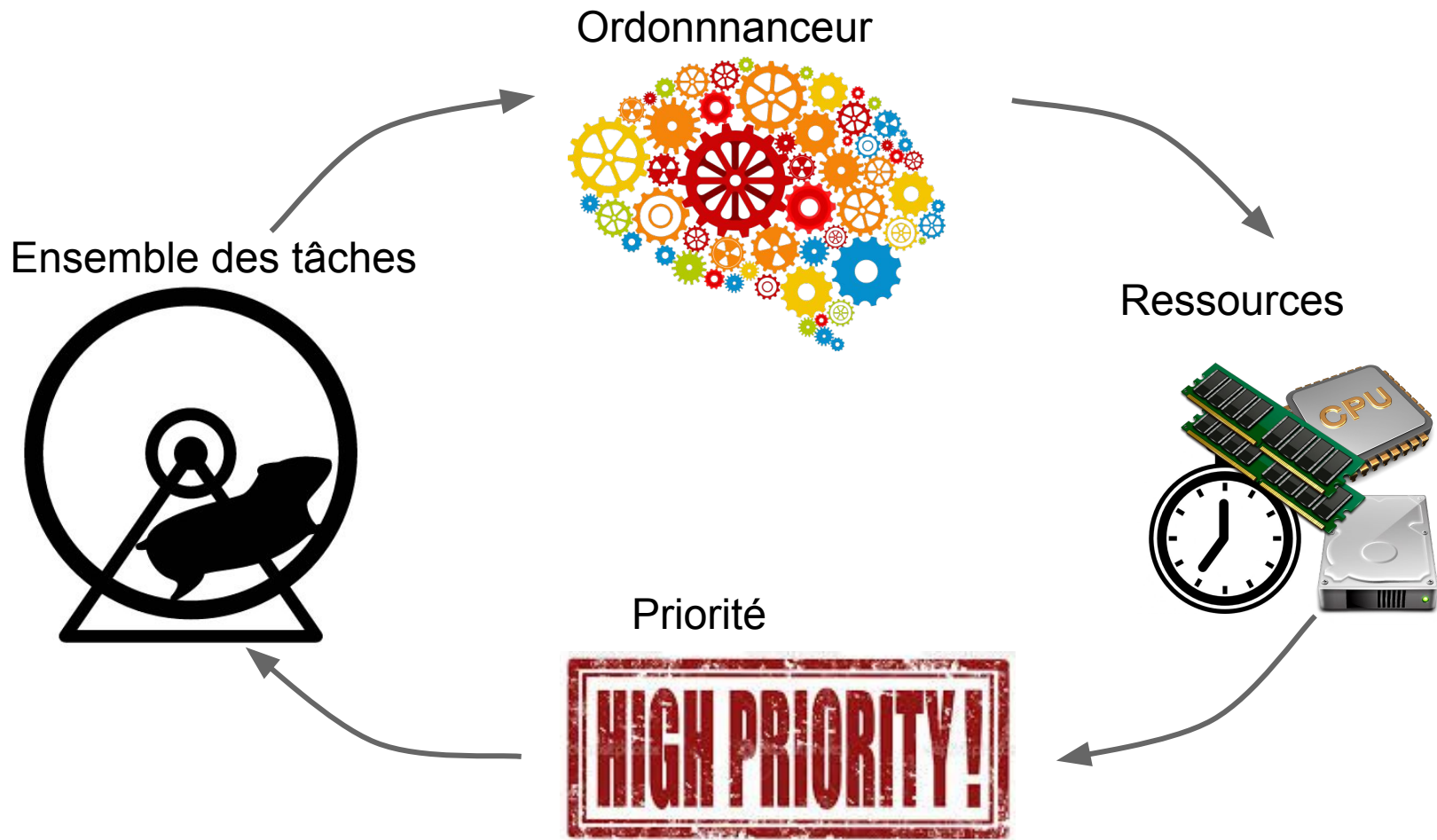
Parcours de l'utilisateur type



Exécuter une tâche



Qu'est-ce qu'un ordonnanceur ?





Qu'est-ce qu'un ordonnanceur ?



Gère

L'horaire des tâches

La priorité des tâches

L'accès aux ressources



Horaire des tâches



Les tâches sont exécutées de manière
différée, en fonction de la disponibilité des
ressources

=

Doivent être autonomes (mode “batch”)

Politique d'ordonnancement

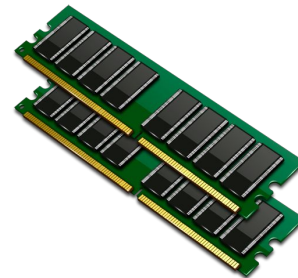
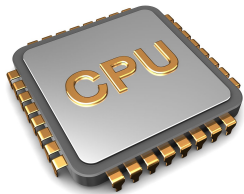
Privilégier les accès selon les
modalités définies par le
Comité d'allocation des ressources



Plus vous calculez, plus votre
priorité diminue, moins vous
calculez, plus elle augmente

Les ressources

- Nombre de coeurs
- Nombre de noeuds
- Nombre de GPUs
- Temps requis
- Mémoire requise



Type de tâches

Tâches séquentielles

Utilisent un seul coeur, un seul noeud

Ne bénéficient **PAS** de demander davantage de ressources

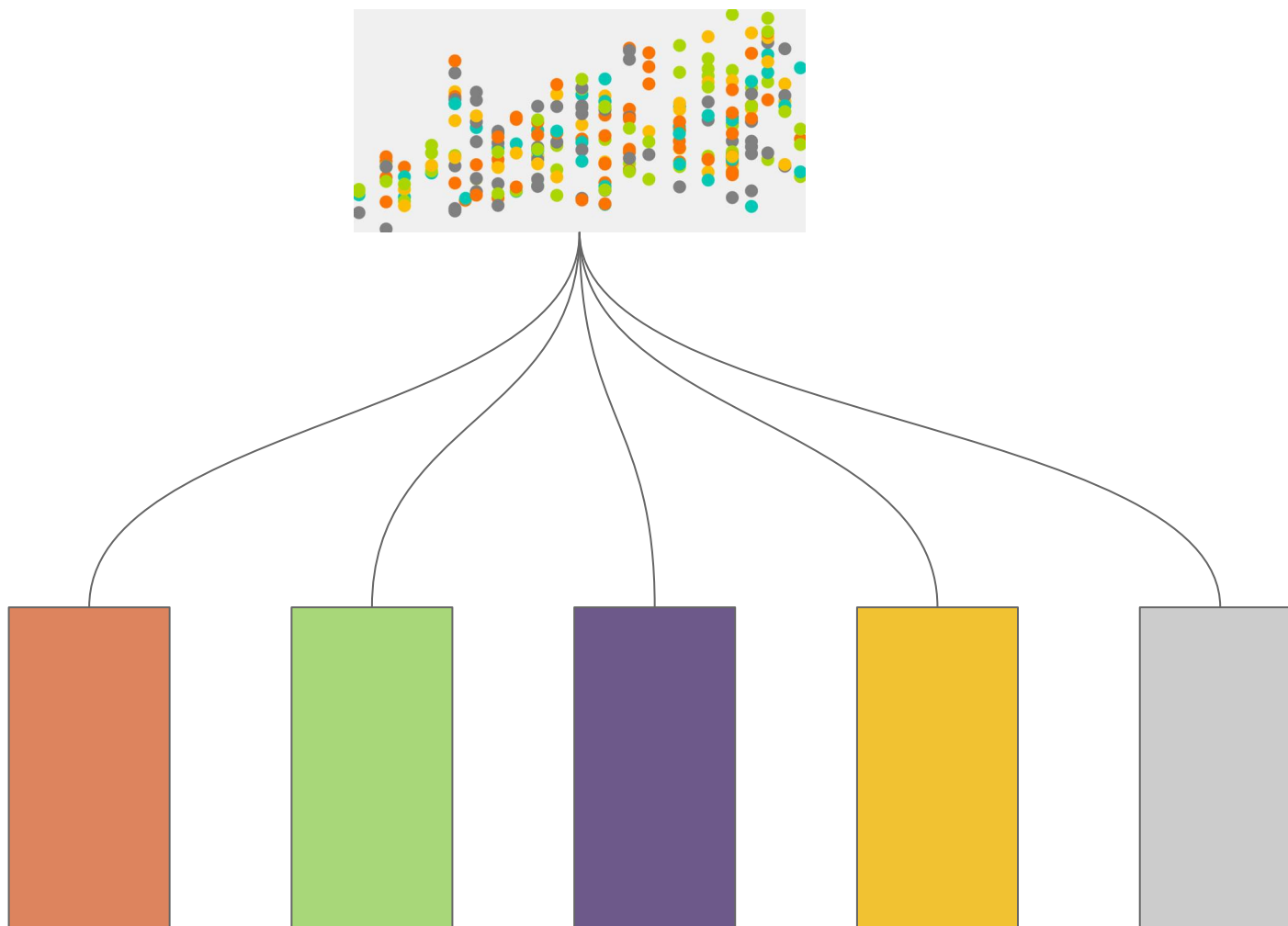


Tâches parallèles

Utilisent plusieurs coeurs, noeuds à la fois



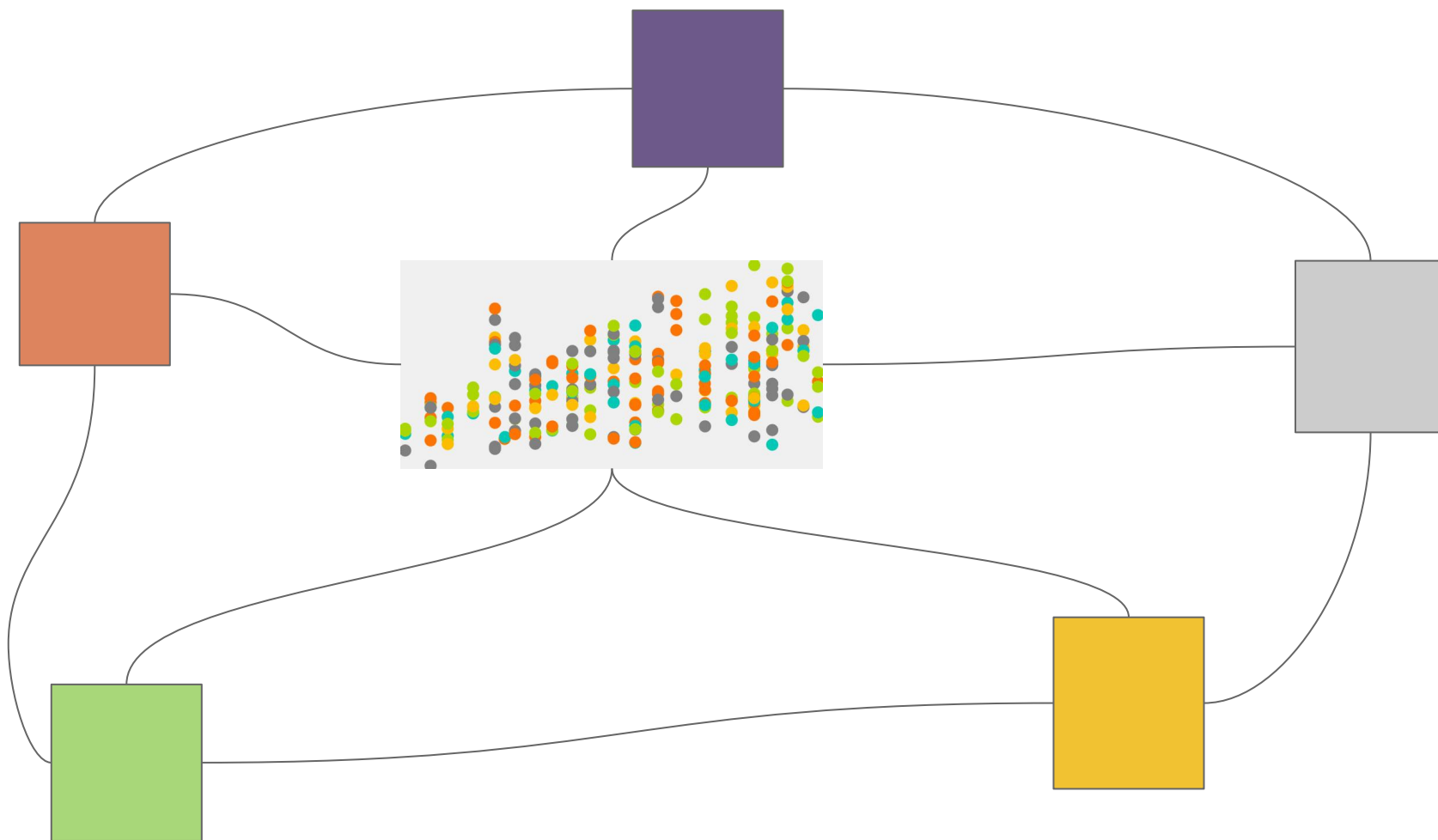
Parallélisme des données



Parallélisme des données

- Même tâche, sur plusieurs jeux de données
- Ex. :
 - Filtre sur chaque pixel d'une image
 - Traitement indépendant de 100 échantillons de patients différents
 - Compter les occurrences d'un mot dans des milliers de documents
 - Mouvement d'atomes sans interaction dans un champ magnétique

Parallélisme des tâches



Parallélisme des tâches

- Un seul traitement, exécuté par plusieurs coeurs/noeuds
- Algorithme découpé en plusieurs tâches
 - Sous-tâches peuvent travailler sur les mêmes données (ou pas) et communiquent entre elles pour se synchroniser et échanger des données
- Implique une quantité significative de communications entre les différentes tâches à réaliser

Fichier de soumission

Fichier de soumission

Un fichier de soumission contient

1. une entête, destinée à l'ordonnanceur
2. le code à exécuter (script bash)

Jetons un coup d'oeil

Bash! Important à garder!

#SBATCH <--Laisser dans cette forme précise

```
#!/bin/bash
#SBATCH --account=def-jfaure      # remplacez par le compte de votre superviseur
#SBATCH --gres=gpu:1             # nombre de processus
#SBATCH --mem=10000M            # memoire, megaoctets par default
#SBATCH --time=0-02:00          # temps d'execution (DD-HH:MM)
#SBATCH --mail-user=julie.faure-lacroix@calculquebec.ca # Liste des usagers à qui envoyer un courriel
#SBATCH --mail-type=ALL         # Quand un courriel sera-t-il envoyé?

module load nixpkgs/16.09 gcc/5.4.0 cuda/8.0.44 colmap/3.5 cgal/4.9

# The project folder must contain a folder "images" with all the images.
DATASET_PATH=/home/jfaure/projects/def-jfaure/ROM_data_2019/trash_bone

#colmap feature_extractor --database_path $DATASET_PATH/database.db --image_path $DATASET_PATH/images
```

Ne jamais oublier d'ajouter les modules nécessaires

Et finalement, mettre votre code (parallèle!)

Exercice

Jouons avec un script de soumission

Entête de fichier de soumission

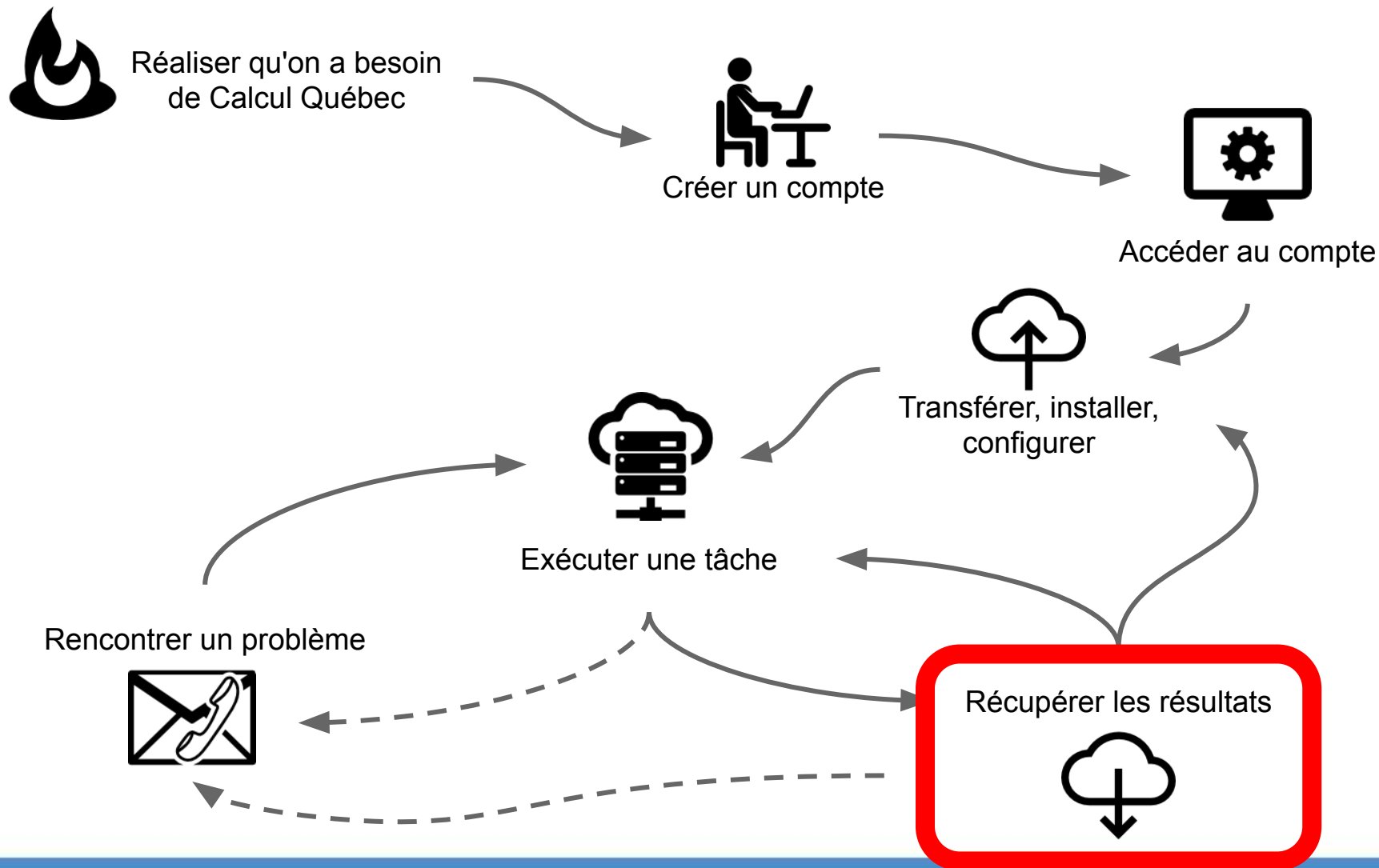
| | |
|--------------------------------------|--|
| Interpréteur | <code>#!/bin/bash</code> |
| Ressources à utiliser | <code>#SBATCH --time=0:03:00</code> <code>#SBATCH --nodes=1</code> <code>#SBATCH --ntasks-per-node=1</code> <code>#SBATCH --cpus-per-task=1</code> <code>#SBATCH --mem-per-cpu=1G</code> |
| Projet | <code>#SBATCH --account=def-username</code> |
| Autres options | <code>#SBATCH --gres=gpus:1</code> |

Commandes utiles

| action | commande | retourne |
|----------------------------|---------------------------------------|-------------------------------------|
| soumettre | <code>sbatch <script.sh></code> | jobid |
| afficher file d'attente | <code>squeue [-u \$USER]</code> | file d'attente |
| annuler | <code>scancel <jobid></code> | - |
| afficher consommation | <code>sacct [-j <jobid>]</code> | ressources consommées par soi |

Référence : https://docs.computecanada.ca/wiki/Running_jobs/fr

Parcours de l'utilisateur type



Récupérer ses résultats

Pour copier de petits fichiers depuis le serveur :

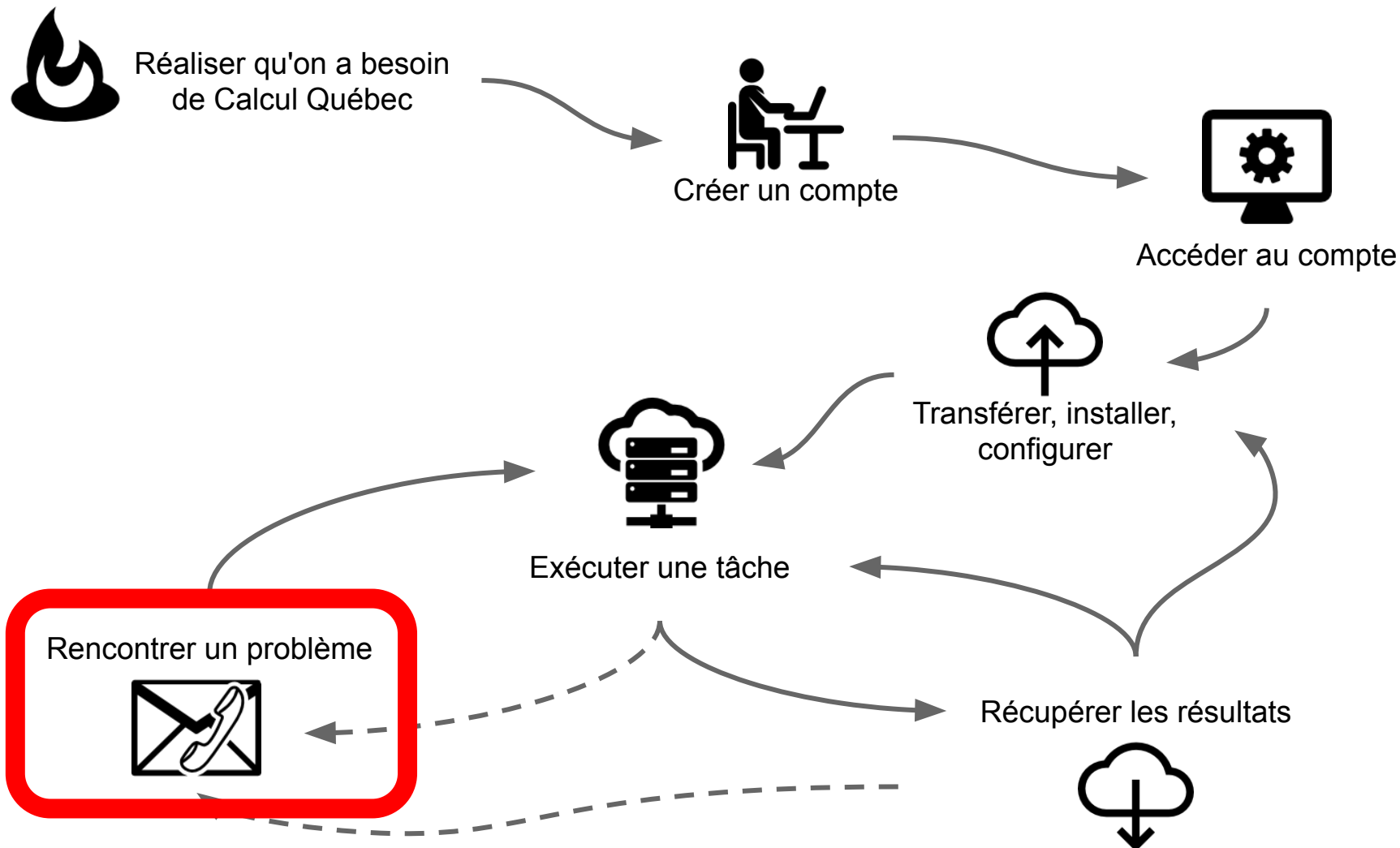
- `scp <username>@<server>:/file/path .`

Pour de plus gros fichiers :



<https://globus.computecanada.ca/>

Parcours de l'utilisateur type



**Et comment je choisis mon
supercalculateur?**

L'information se trouve dans le wiki!

Allons jeter un coup d'oeil sur le serveur et les ressources auxquelles nous avons accès.

docs.calculcanada.ca

Storage

| | |
|---|---|
| HOME Lustre filesystem, 105 TB of space | <ul style="list-style-type: none">• Location of home directories, each of which has a small fixed quota.• You should use the <code>project</code> space for larger storage needs.• 50 GB of space and 500K files per user.• There is a daily backup of the home directories. |
| SCRATCH Lustre filesystem, 2.6 PB of space | <ul style="list-style-type: none">• Large space for storing temporary files during computations.• No backup system in place.• 20 TB of space and 1M files per user.• There is an automated purge of older files in this space. |
| PROJECT Lustre filesystem, 8.9 PB of space | <ul style="list-style-type: none">• This space is designed for sharing data among the members of a research group and for storing large amounts of data.• 1 TB of space and 500K of files per group.• There is a daily backup of the project space. |

For transferring data via [Globus](#), you should use the endpoint `computecanada#be1uga-dtn`, while for tools like `rsync` and `scp` you can use a login node.

Limites de ressources

Tous les serveurs ont des limites de ressources.

| | |
|--------------------------|-------------------|
| Coeurs par noeud | 32 - 48 |
| Mémoire par noeud | 128 Go - 3 To |
| Durée maximum des tâches | 1 jour - 30 jours |
| GPU par noeud | 2 - 16 |
| Vitesse du réseau | 1 Gbps - 100 Gbps |

Conseils et erreurs courantes

Conseils et erreurs

- Demandez uniquement les ressources nécessaires, pas plus
 - Temps d'exécution
 - Nombre de noeuds/coeurs/mémoire
- Votre application ne s'exécutera PAS significativement plus rapidement sur un super-ordinateur
 - À moins que le code ait été développé pour utiliser plusieurs noeuds/coeurs.

Conseils et erreurs

- Attention aux formats de fichiers

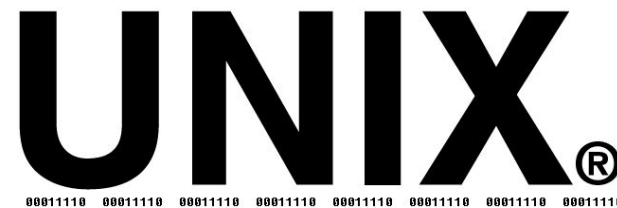
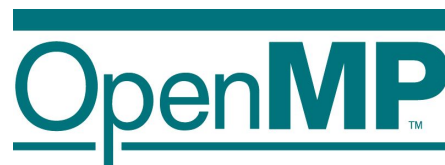
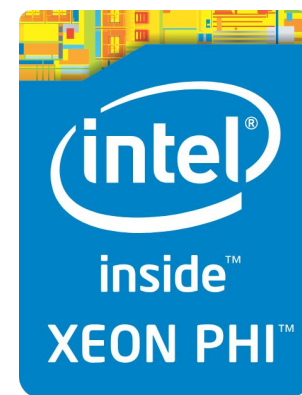


- .txt Windows vs Mac/Linux: pas toujours compatibles (vérifier avec dos2unix)
- Ne lancez JAMAIS de **tâches lourdes** sur les noeuds de tête

Formations

<http://calculquebec.eventbrite.ca/>

Formations à Calcul Québec



Ressources supplémentaires

Sites web

- <http://www.calculquebec.ca/>
- <http://www.calculcanada.ca/>
- <https://docs.calculcanada.ca/>
- <http://calculquebec.eventbrite.ca/>

Nous contacter : support@calculquebec.ca

Twitter: @CalculQ