

Szkolenie użytkowników ICM

2022-11-03; Podstawy użytkowania infrastruktury ICM

Ćwiczenia do samodzielnego wykonania

1. Logowanie i uruchamianie obliczeń

- (a) Zalogować się na węzeł dostępowy (*hpc.icm.edu.pl*) – protokół SSH
- (b) Utworzyć nowy folder na potrzeby ćwiczenia
- (c) Przekopiować do nowego katalogu dwa pliki wsadowe z folderu `/apps/siesta/examples/H.*`
- (d) Uruchomić sesję interaktywną na pojedynczym węźle i dwóch rdzeniach (grant: `icm-szkolenia`)
- (e) Sprawdzić listę dostępnych modułów i załadować najnowszą wersję programu *Siesta*
- (f) Uruchomić obliczenia wykorzystując narzędzie `mpirun`. Główny plik wsadowy należy przekierować do programu `siesta` za pomocą operatora `<` i zapisać standardowe wyjście w pliku o nazwie `out`
- (g) Przefiltrować plik wynikowy `out` w poszukiwaniu wzorca `scf` zliczając liczbę wykonanych iteracji (wykorzystać potok, narzędzia `grep` i `wc`)
- (h) Zakończyć sesję interaktywną
- (i) Korzystając z szablonów zawartych w prezentacji – przygotować skrypt (wykorzystując np. edytor *vim*) do systemu kolejkowego dla klastra Topola i przeprowadzić analogiczne obliczenia w trybie wsadowym
- (j) Przetestować działanie wybranych opcji `#SBATCH`

2. Kopiowanie danych pomiędzy systemami

- Pobrać cały folder z wynikami uzyskanymi w ćwiczeniu 1 na swój lokalny komputer (`scp`, `rsync`)
- Przetestować możliwość wybiórczego kopiowania plików (np. pobrać wszystkie z pominięciem pliku `*.DM` lub tylko te zawierające w nazwie `*ion*`)
- Skopiować dane z Topoli na Okeanos – można wykorzystać poznane narzędzia lub współdzielone systemy plików według tabeli dostępnej na stronie internetowej KDM:
https://kdm.icm.edu.pl/0_zasobach_ICM/Zasoby/przechowywanie_danych/
- Z poziomu swojego lokalnego komputera (GNU/Linux) przesłać dowolne dane do/z Okeanosa (`man scp` → patrz opcja `-oProxyJump`. Patrz także `man ssh` – opcja `-J`)
- Przetestować możliwość kompresji danych przed kopiowaniem

3. Utworzyć środowisko wirtualne języka Python korzystając z instrukcji dostępnej na stronie internetowej KDM: <https://kdm.icm.edu.pl/Tutorials/python/python/>. Następnie zainstalować (i opcjonalnie przetestować) dowolny pakiet korzystając z narzędzia `pip`

4. Problemy, pytania, inne zagadnienia