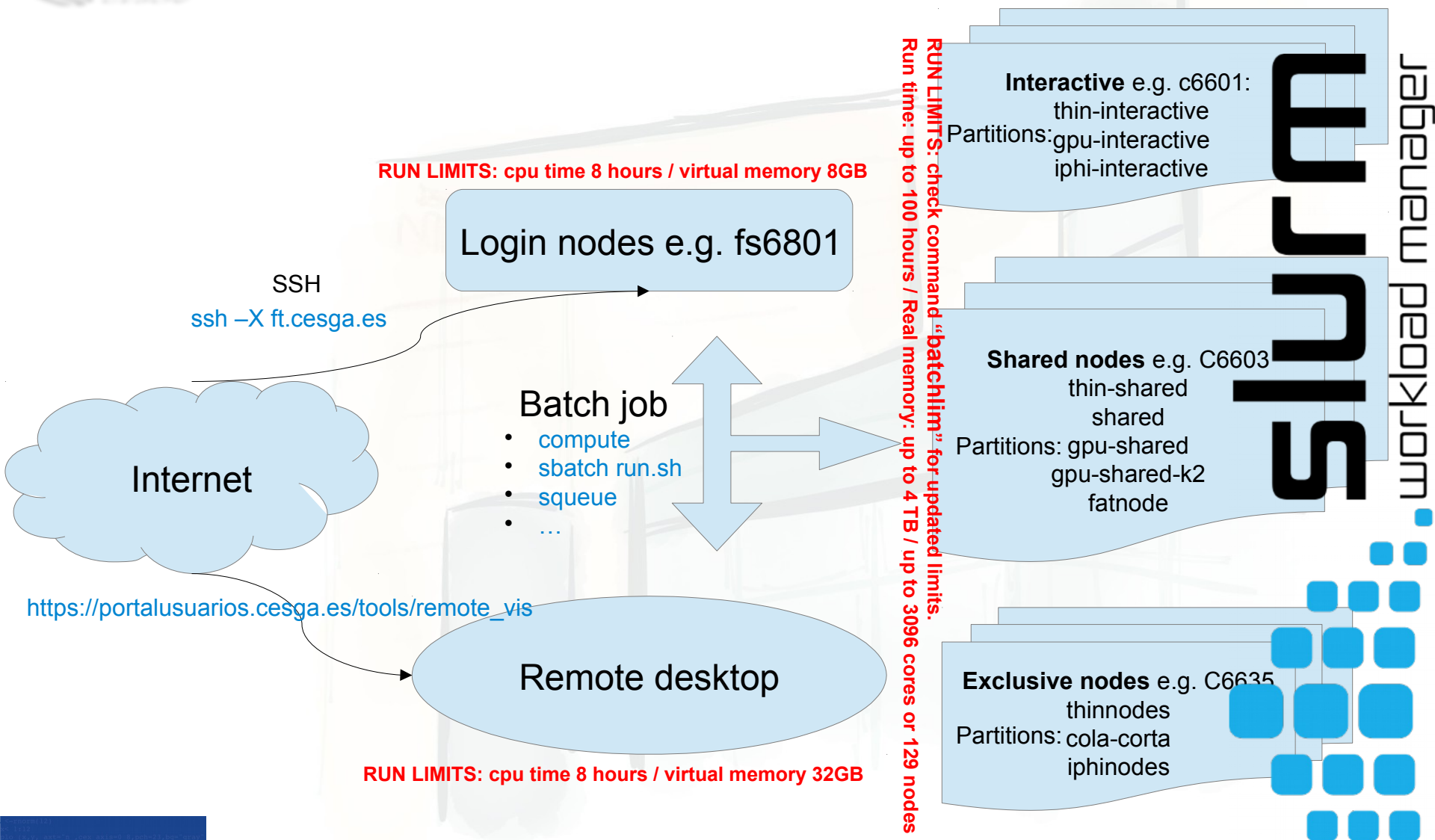


R y HPC. (Uso de R en el CESGA).



Aurelio Rodríguez
V Jornadas R Galicia
28 de Octubre 2018
Santiago de Compostela



Descripción del hardware

Nodos	Procesador	Cores	RAM	HDD	Acelerador	IB*	LUSTRE*	Partición
306	2xIntel E5-2680v3@2.50GHz	24	128GB	1TB		😊	😊	thinnodes/thin-shared
4	2xIntel E5-2680v3@2.50GHz	24	128GB	1TB	2 NVIDIA K80	😊	😊	gpu-shared
2	2xIntel E5-2680v3@2.50GHz	24	128GB	1TB	2 Intel Phi	😊	😊	iphinodes
1	8xIntel E7-8867v3@2.50GHz	128	4TB	24TB		😊	😊	fatnode
4	2xIntel E5-2680v3@2.50GHz	24	128GB	1TB		😊	😊	login
18	2xIntel E5-2680v3@2.50GHz	24	64/128GB	2TB		😊	😭	shared
10	2xIntel E3-1240v3@3.40GHz	4	32GB	2TB		😭	😭	shared
68	2xIntel E5-2650v3@2.30GHz	20	64GB	300GB		😭	😭	shared
7	2xIntel E5-2650v3@2.30GHz	20	128GB	4TB	NVIDIA K2	😭	😭	gpu-shared-k2
1	2xIntel E5-2650v3@2.30GHz	20	128GB	4TB	NVIDIA V100	😭	😭	gpu-shared-v100
4	2xIntel E5-2650v3@2.30GHz	20	128GB	4TB		😭	😭	shared

*IB: red Infiniband FDR 56Gbps

*LUSTRE: Sistema de ficheros paralelo de alto rendimiento

```
swtestg@fs6801 ~]$ myquota
```

- HOME and Store filesystems:

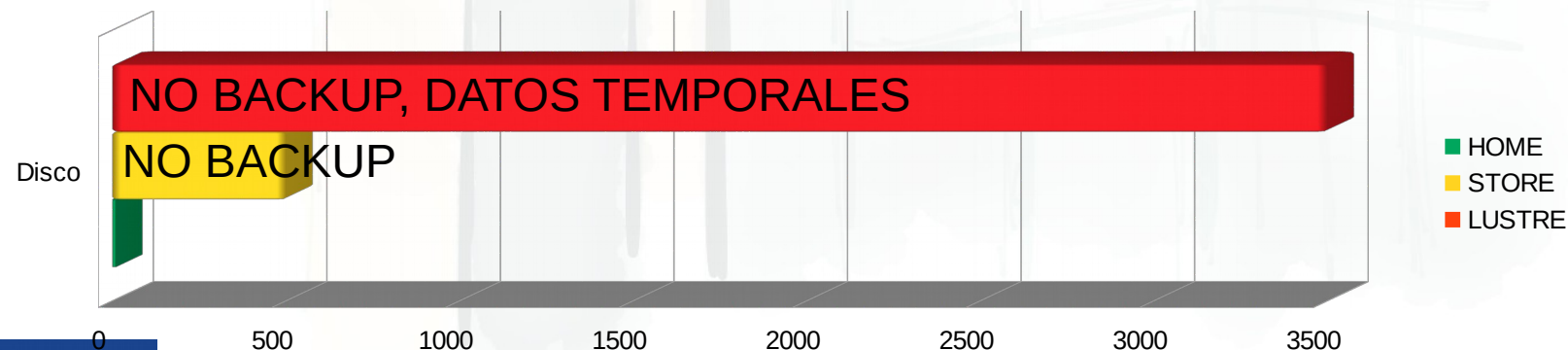
Filesystem	blocks	quota	limit	grace	files	quota	limit	grace
10.117.49.200:/Home_FT2	5972	10005M	10240M		108	100k	101k	
10.117.49.201:/Store_uni	31206M	499G	500G		48581	300k	301k	

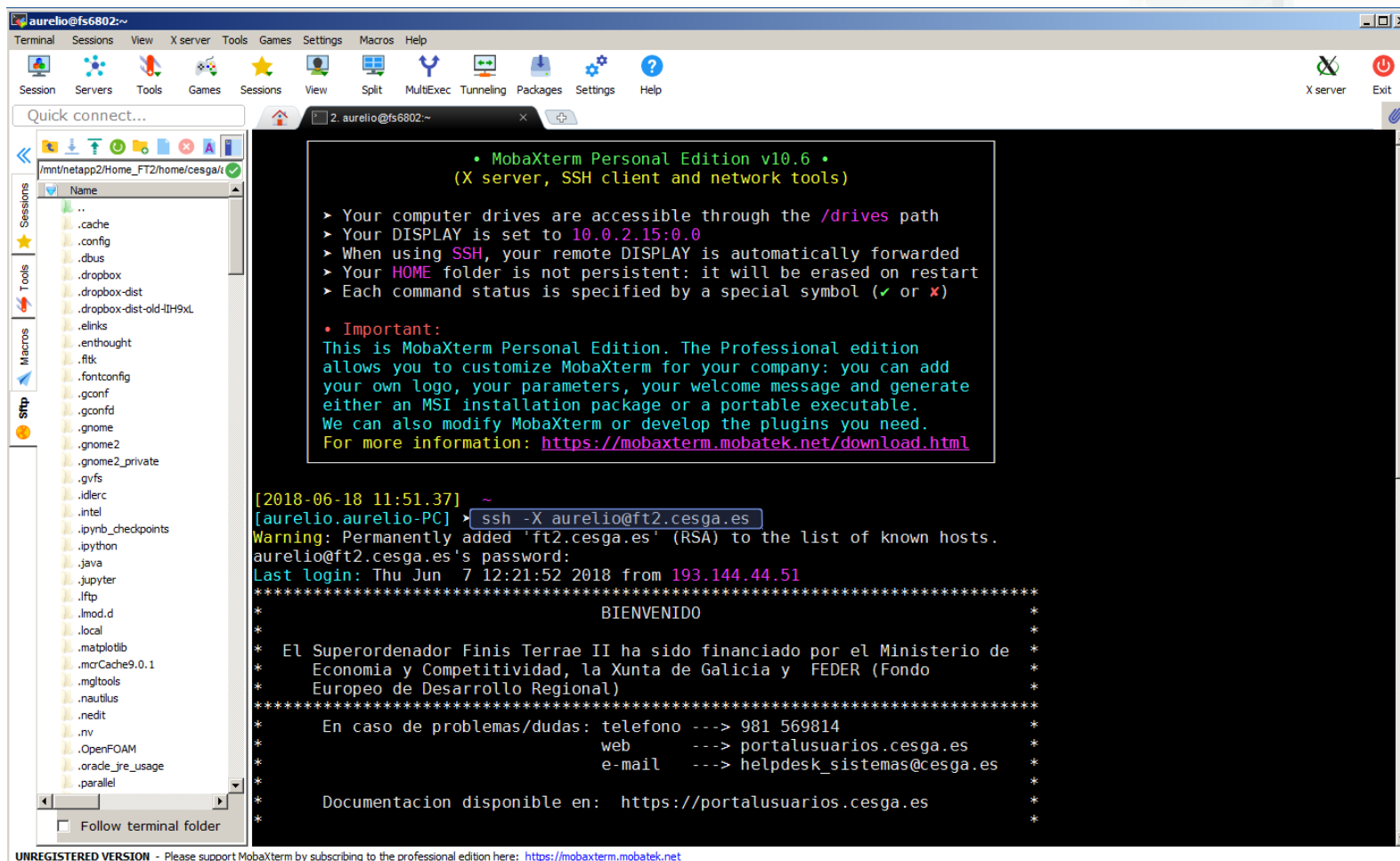
- Special filesystems:

...

- LUSTRE filesystem:

Filesystem	used	quota	limit	grace	files	quota	limit	grace
/mnt/lustre/scratch	0k	3T	3.5T	-	0	200000	240000	-





The screenshot shows the MobaXterm Personal Edition v10.6 interface. The left sidebar displays a file tree for the session 'aurelio@ft2.cesga.es'. The main terminal window shows the following content:

```

• MobaXterm Personal Edition v10.6 •
(X server, SSH client and network tools)

> Your computer drives are accessible through the /drives path
> Your DISPLAY is set to 10.0.2.15:0.0
> When using SSH, your remote DISPLAY is automatically forwarded
> Your HOME folder is not persistent: it will be erased on restart
> Each command status is specified by a special symbol (✓ or ✗)

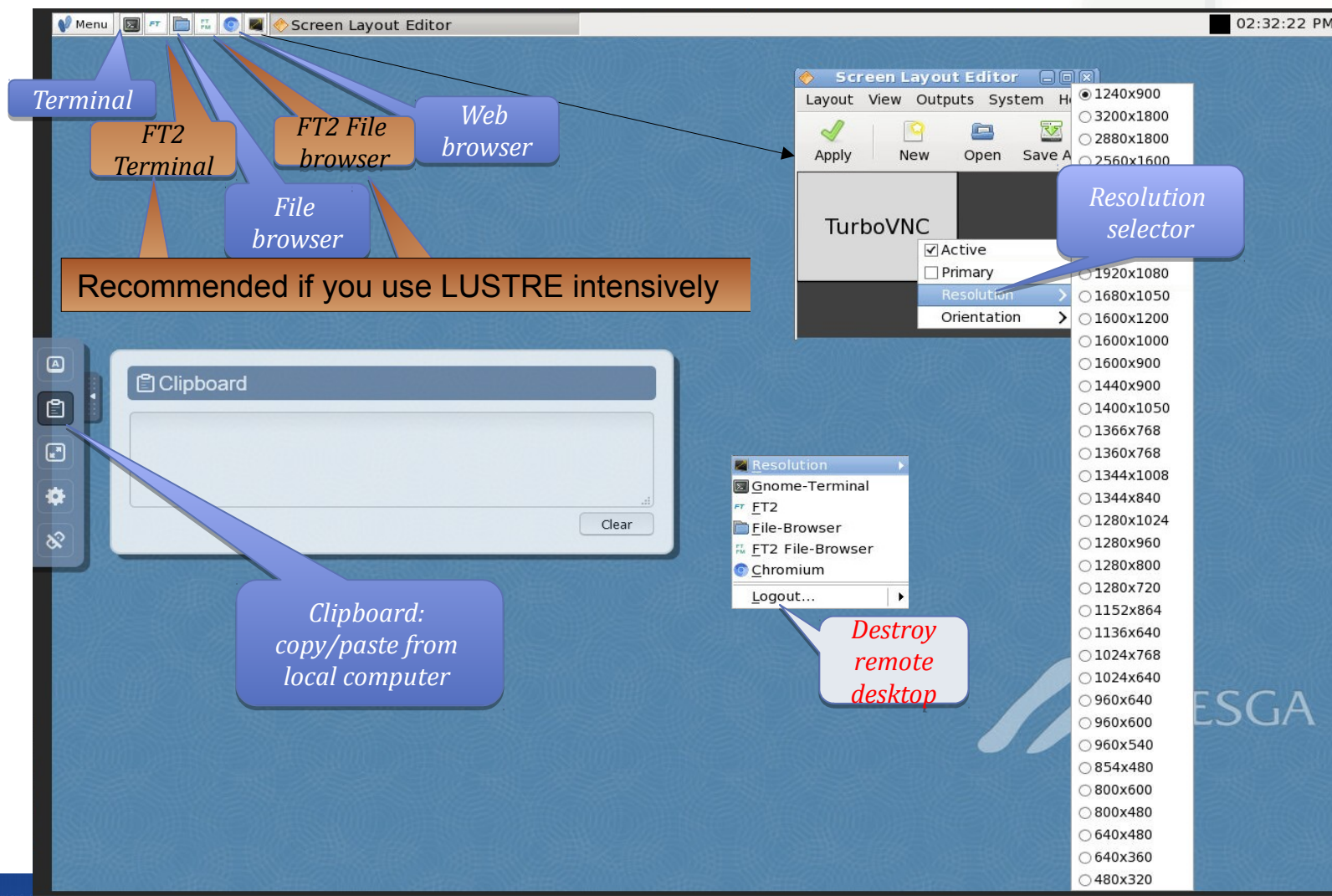
• Important:
This is MobaXterm Personal Edition. The Professional edition
allows you to customize MobaXterm for your company: you can add
your own logo, your parameters, your welcome message and generate
either an MSI installation package or a portable executable.
We can also modify MobaXterm or develop the plugins you need.
For more information: https://mobaxterm.mobatek.net/download.html

[2018-06-18 11:51:37] ~
[aurelio.aurelio-PC] > ssh -X aurelio@ft2.cesga.es
Warning: Permanently added 'ft2.cesga.es' (RSA) to the list of known hosts.
aurelio@ft2.cesga.es's password:
Last login: Thu Jun  7 12:21:52 2018 from 193.144.44.51
*****
BIENVENIDO
*****
*
* El Superordenador Finis Terrae II ha sido financiado por el Ministerio de
* Economía y Competitividad, la Xunta de Galicia y FEDER (Fondo
* Europeo de Desarrollo Regional)
*****
*
* En caso de problemas/dudas: telefono ---> 981 569814
* web ---> portalusuarios.cesga.es
* e-mail ---> helpdesk_sistemas@cesga.es
*
* Documentacion disponible en: https://portalusuarios.cesga.es
*

```

At the bottom of the terminal window, it says: UNREGISTERED VERSION - Please support MobaXterm by subscribing to the professional edition here: <https://mobaxterm.mobatek.net>

Escritorio remoto bajo web



The screenshot shows a remote desktop interface with a top menu bar containing 'Menu', 'FT', and 'Screen Layout Editor'. The main workspace has a blue background. Several application windows are visible:

- Terminal**: A window with a blue title bar and a text area.
- FT2 Terminal**: A window with an orange title bar and a text area.
- FT2 File browser**: A window with an orange title bar and a file list.
- Web browser**: A window with a blue title bar and a web page.
- File browser**: A window with a blue title bar and a file list.
- Clipboard**: A window with a blue title bar and a text area, with a 'Clear' button.
- Screen Layout Editor**: A window with a blue title bar and a list of resolution options.
- Resolution selector**: A window with a blue title bar and a list of resolution options.
- Resolution**: A window with a blue title bar and a list of resolution options.
- Logout...**: A window with a blue title bar and a list of resolution options.

Callouts and annotations include:

- Terminal**: Points to the Terminal window.
- FT2 Terminal**: Points to the FT2 Terminal window.
- FT2 File browser**: Points to the FT2 File browser window.
- Web browser**: Points to the Web browser window.
- File browser**: Points to the File browser window.
- Clipboard: copy/paste from local computer**: Points to the Clipboard window.
- Resolution selector**: Points to the Resolution selector window.
- Resolution**: Points to the Resolution window.
- Logout...**: Points to the Logout... window.
- Destroy remote desktop**: A red callout pointing to the Logout... window.
- Recommended if you use LUSTRE intensively**: A brown box with text.

Bajo una terminal del escritorio remoto o bajo la conexión ssh:

`module load intel/2018.3.222 R`

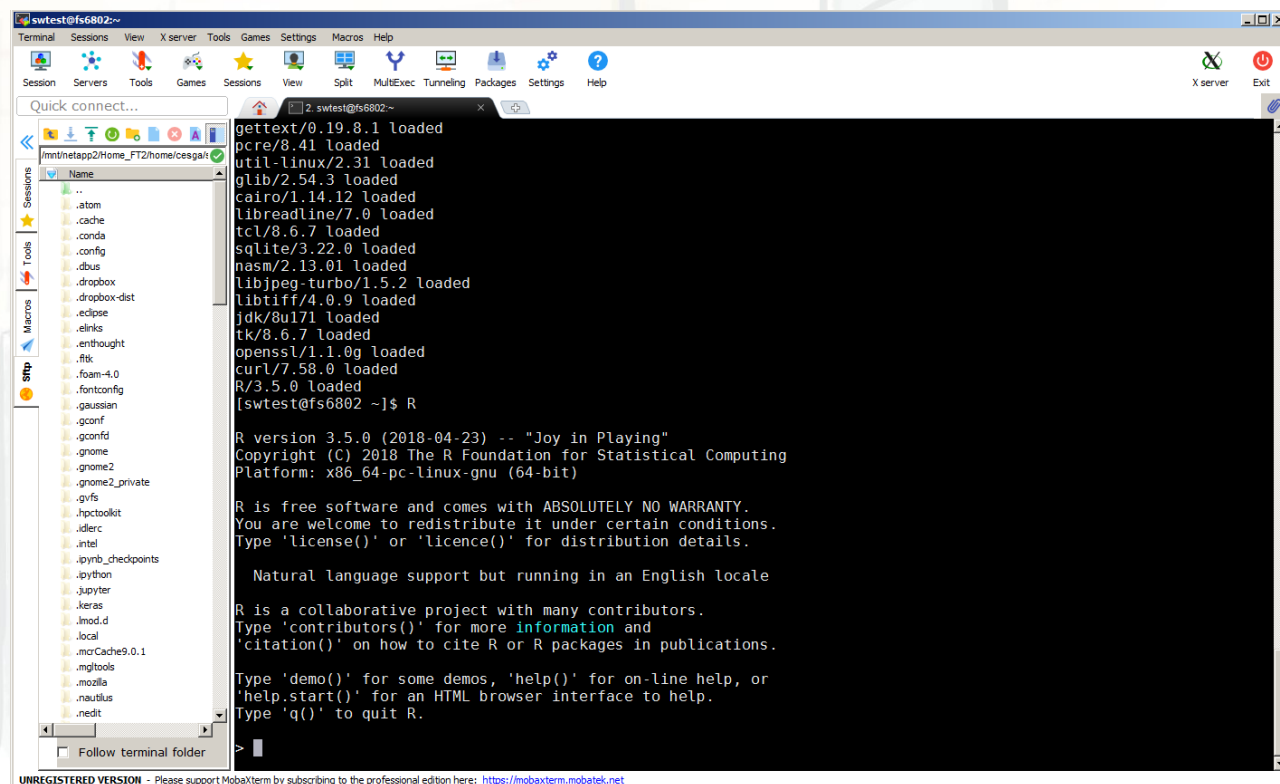
`R`

Límites:

cpu time: 8 horas

virtual memory:

- 8GB (login node)
- 32GB (desktop)



```

swtest@fs6802:~$ module load intel/2018.3.222 R
gettext/0.19.8.1 loaded
pcre/8.41 loaded
util-linux/2.31 loaded
glib/2.54.3 loaded
cairo/1.14.12 loaded
libreadline/7.0 loaded
tcl/8.6.7 loaded
sqlite/3.22.0 loaded
nasm/2.13.01 loaded
libjpeg-turbo/1.5.2 loaded
libtiff/4.0.9 loaded
jdk/8u171 loaded
tk/8.6.7 loaded
openssl/1.1.0g loaded
curl/7.58.0 loaded
R/3.5.0 loaded
[swtest@fs6802 ~]$ R

R version 3.5.0 (2018-04-23) -- "Joy in Playing"
Copyright (C) 2018 The R Foundation for Statistical Computing
Platform: x86_64-pc-linux-gnu (64-bit)

R is free software and comes with ABSOLUTELY NO WARRANTY.
You are welcome to redistribute it under certain conditions.
Type 'license()' or 'licence()' for distribution details.

Natural language support but running in an English locale

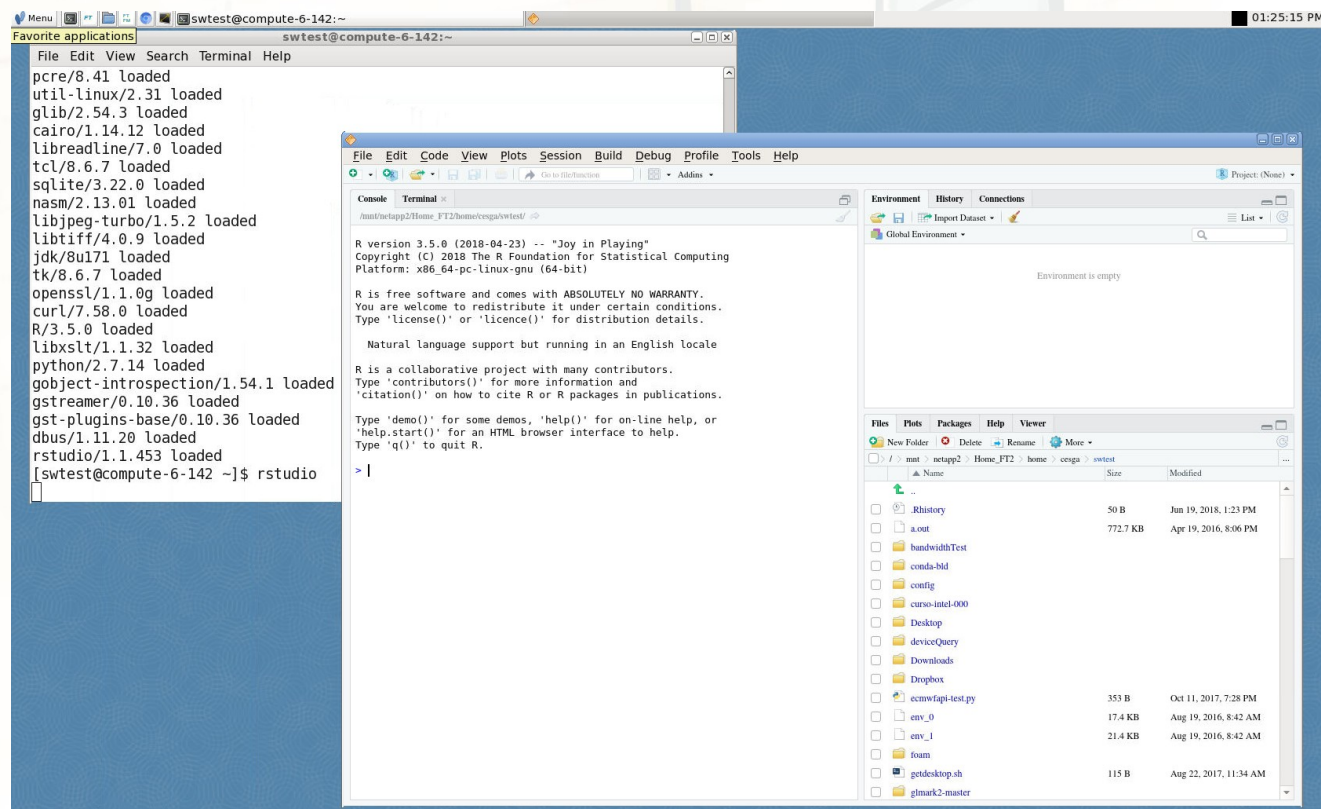
R is a collaborative project with many contributors.
Type 'contributors()' for more information and
'citation()' on how to cite R or R packages in publications.

Type 'demo()' for some demos, 'help()' for on-line help, or
'help.start()' for an HTML browser interface to help.
Type 'q()' to quit R.

>
  
```

Bajo una terminal del escritorio remoto:

```
module load intel/2018.3.222 R rstudio
rstudio
```



Aún bajo estudio ... :

- Problemas de seguridad
- Ejecución en interactivo

<https://www.rstudio.com/pricing/>

Problemática similar presente en otros programas:

Python notebooks
SageMath


```
installed.packages()  
Capabilities()
```

```
install.packages("Rpackage")
```

Instalación por defecto en:

```
$HOME/R/x86_64-pc-linux-gnu-library/<Rversion>
```

Cuidado con el
compilador: intel/gcc



Configurable mediante la variable de entorno: R_LIBS_USER

Ejemplo:

```
install.packages("shiny")
```

<https://shiny.rstudio.com/articles/basics.html>

Script de envío (run.sh)

```
#!/bin/bash
#SBATCH -t 01:00:00
#SBATCH -c 2
module load intel/2018.3.222 R
Rscript test.R
```

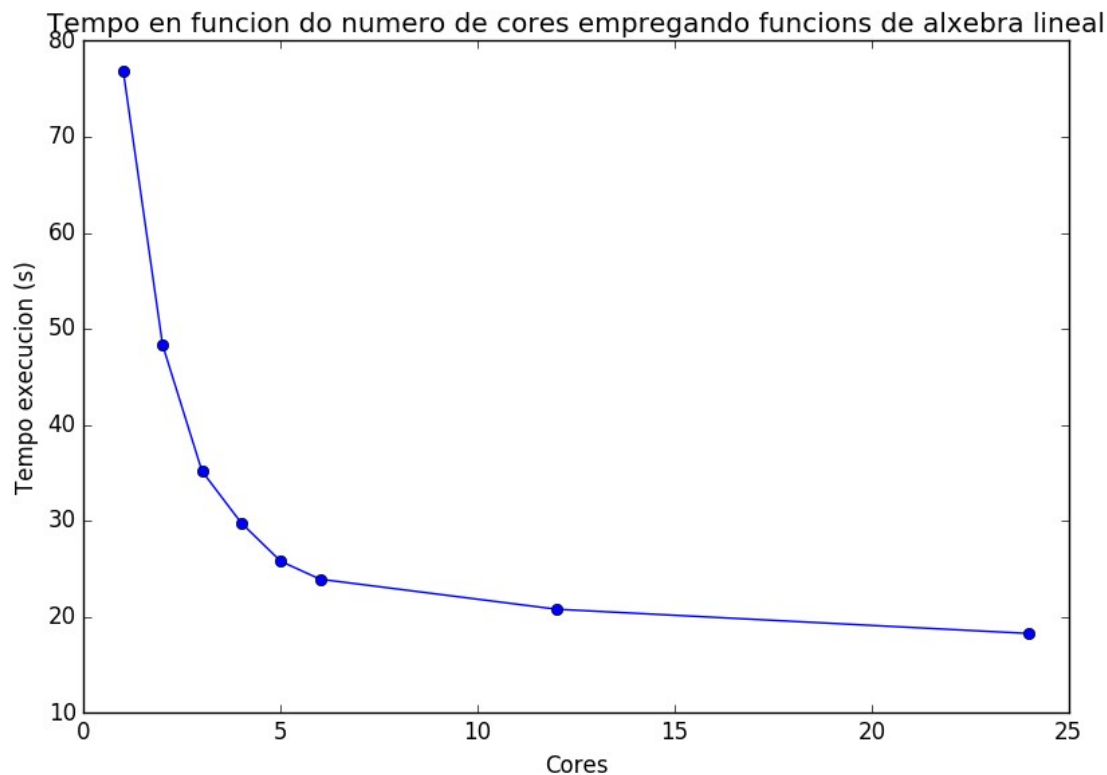
Envío de trabajo

```
sbatch run.sh
```

Recomendado: man Rscript

```
N <- 10000
```

```
system.time(x <- matrix(rnorm(N^2), N, N) %*% matrix(rnorm(N^2), N, N))
```



Parallelize R code on a Slurm cluster

<https://cran.r-project.org/web/packages/rslurm/vignettes/rslurm.html>

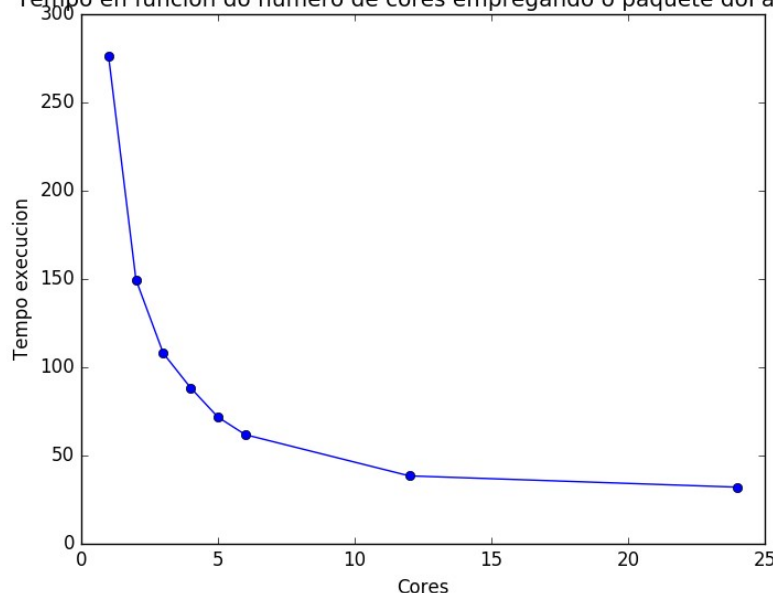
- Entorno **multicore** nunca usar más de **un nodo**
- Basado en el paradigma **master-slave**
- Funciones específicas para la paralelización:
 - **sapply** → **parSapply**
- Fácil paralelización de bucles tipo “for” (%dopar%), obteniendo buena escalabilidad
- Limitaciones:
 - Bucles “for” de muchas iteraciones con funciones que requieren mucho tiempo de computación pueden provocar que los “slaves” se corrompan

Ejemplo:

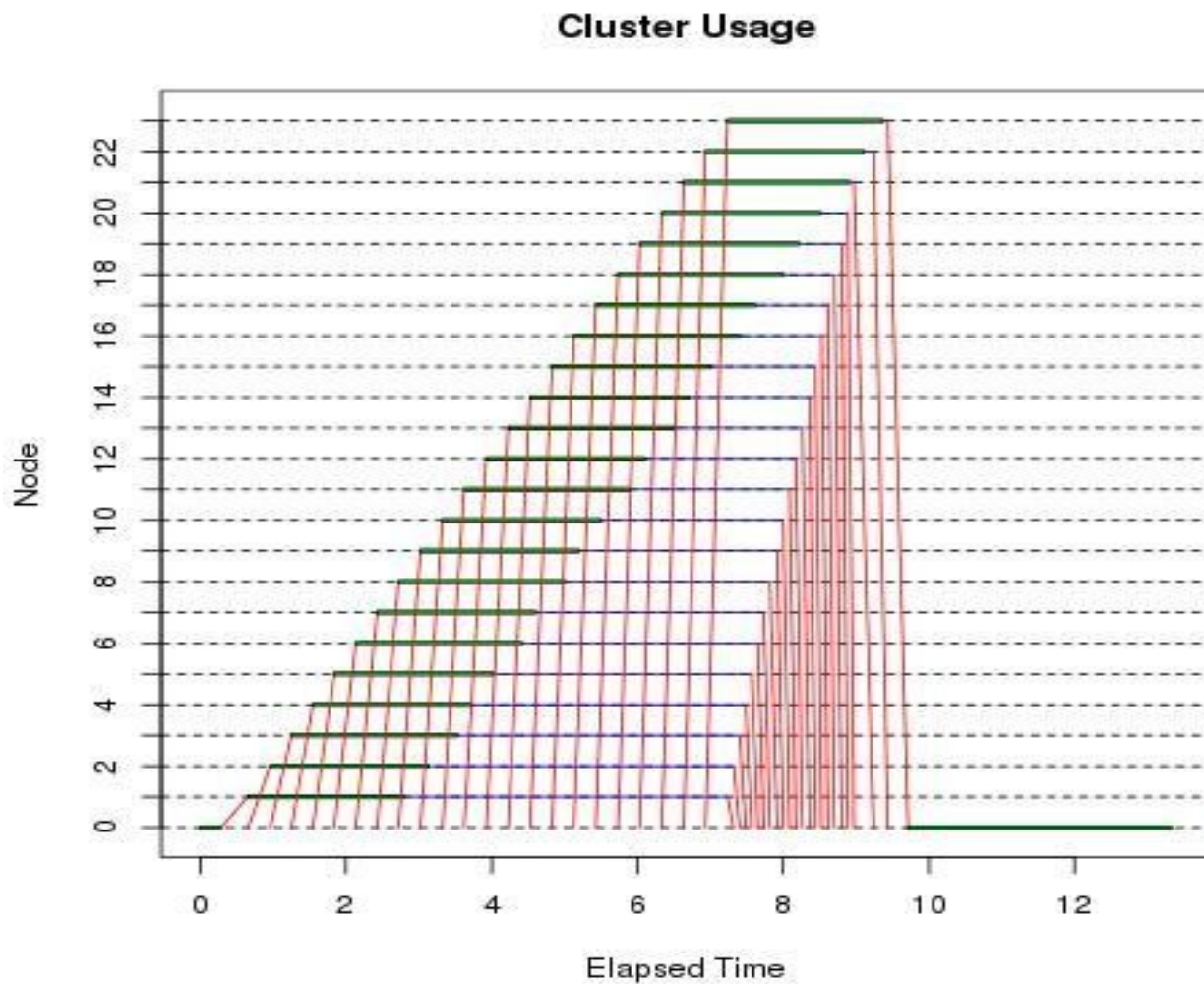
<https://cran.r-project.org/web/packages/doParallel/vignettes/gettingstartedParallel.pdf>

```
library(doParallel)
registerDoParallel(cores=as.numeric(Sys.getenv("SLURM_NTASKS")))
x <- iris [which(iris[,5] != "setosa"), c(1,5)]
parallel_time <- system.time({
  r <- foreach(icount(100000), .combine=cbind) %dopar% {
    ind <- sample(100, 100, replace=TRUE)
    result1 <- glm(x[ind,2]~x[ind,1], family=binomial(logit))
    coefficients(result1)
  }
})
parallel_time
```

Tempo en funcion do numero de cores empregando o paquete doParallel



- Snow permite usar **más de un nodo de cálculo** (usando ciertas funciones de Rmpi)
- Sintaxis relativamente sencilla en comparación con Rmpi
- Fáciles paralelizaciones de bucles “for” con doSnow
- Limitaciones:
 - La expansión de procesos es secuencial → cuantos más procesos, más tiempo en crear el clúster de snow
 - Se envía toda la información del máster a cada slave para obtener un buen rendimiento, se necesitaría que el tiempo de cálculo en cada slave sea superior al tiempo de envío y recepción de datos entre slave y master



- Permite usar **más de un nodo de cálculo**
- Sintaxis similar a las **funciones** propias de herramientas **MPI**
- Programación siguiendo los esquemas de lenguajes como C o Fortran en el paradigma MPI
- Limitaciones:
 - La expansión de procesos se hace a través de la función “mpi.spawn” → problemas a la hora de integrarlo con slurm
 - Debemos usar “mpirun -np 1” en vez de srun, independientemente de los recursos solicitados

Ejemplo (hello.R):

```
library(Rmpi)
ns <- mpi.universe.size() -1
mpi.spawn.Rslaves(nslaves=ns)
mpi.bcast.cmd( id <- mpi.comm.rank() )
mpi.bcast.cmd( ns <- mpi.comm.size() )mpi.bcast.cmd(
host <-mpi.get.processor.name() )
mpi.remote.exec(paste("I am", id, "of", ns, "running on", host))
mpi.close.Rslaves(dellog = FALSE)
mpi.exit()
```

<https://cran.r-project.org/web/views/HighPerformanceComputing.html>

- Multitud de paquetes disponibles
- Muy útil en estudios paramétricos
- Multinodo: Requiere programación y conocimientos en paralelización

Actualización sistema operativo del Finis Terrae II

- ✓ *RedHat 7.5*
- ✓ *Actualización de kernel (3.10.0) + glibc (versión 2.17 sistema / versión 2.28 en aplicaciones): Esto asegura casi un 100% de compatibilidad con cualquier aplicación*
- ✓ *Actualización del stack de Infiniband (MLNX_OFED 4.3) con mejora del rendimiento en ciertas aplicaciones*
- ✓ *Nueva versión del SLURM (17.02.9) que resuelve algunos problemas/límites presentes actualmente*

Actualización sistema operativo del Finis Terrae II

- ✓ *LUSTRE 2.10 con notables mejoras en seguridad y rendimiento:*
- ✓ *Aplicaciones: migración automática de las aplicaciones más usadas (instalación de versiones actualizadas).*
 - ✓ *Resto: bajo petición de usuario*
- ✓ **Migración progresiva de todas las particiones**
 - ✓ **Finales de Octubre/principios Noviembre: Thinnodes**
 - ✓ **Resto: fecha límite Diciembre**

Dudas, preguntas, comentarios....

