

Efektivní využívání programových nástrojů Ansys na infrastrukturách MetaCentra / CERIT-SC

Slávek Licehammer

MetaCentrum

25. listopadu 2013



1. Spouštění standardními prostředky MetaCentra / CERIT-SC
2. Ansys **Fluent**, Ansys **CFX**, Ansys **Mechanical**
3. Práce s licencemi a volby plánovače
4. Ansys Remote Solve Manager
5. Plány s produkty Ansys v MetaCentru a CERIT-SC do budoucna

Využití více procesorů

- ▶ Paralelní výpočet
- ▶ Distribuovaný výpočet

Způsob práce

- ▶ Dávkově
- ▶ Interaktivně (využití grafického prostředí)

Unix

- ▶ Tunelování protokolu X11
- ▶ `ssh -X skirit.ics.muni.cz`

Windows

- ▶ Nainstalování X serveru (např Xming)
- ▶ Nastavení tunelování X11 v Putty

Dokumentace

- ▶ <https://wiki.metacentrum.cz/wiki/X-Window>

Paralelní běh

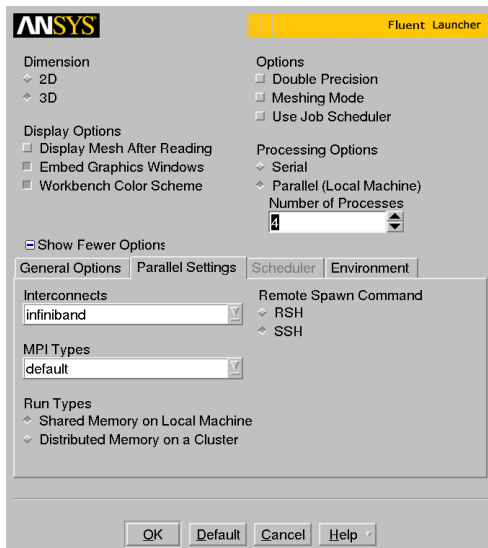
```
fluent 3d -g -t $PBS_NUM_PPN -p shmemp -i inputFile
```

Distribuovaný běh

```
fluent 3d -g -p ethernet -cnf=$PBS_NODEFILE -ssh -i inputfile
```

Volby při spuštění

-i	vstupní soubor
-g	bez grafického prostředí
-p	druh síťového připojení [shmemp ethernet infiniband]
-t	počet použitých jader
-cnf=soubor	soubor obsahující jména uzlů na který se úloha spustí
-ssh	použití ssh namísto rsh



Paralelní běh

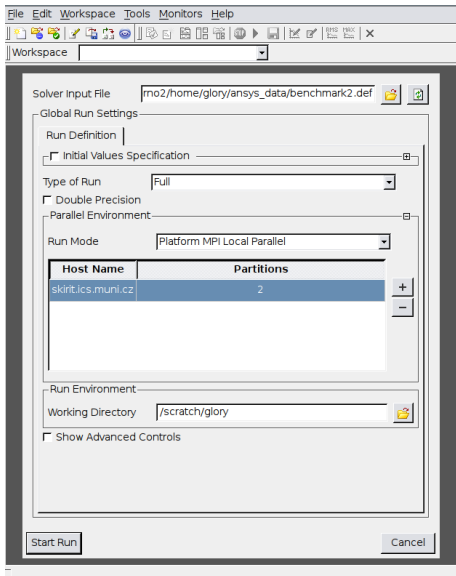
```
cfx5solve -def input.def -fullname test -par-local -part  
$PBS_NUM_PPN
```

Distribuovaný běh

```
$MACHINES='perl -ne 'chomp; $_{$_}++; END { print join ", ",  
map { $_."*".$_{$_} keys %_ }' $PBS_NODEFILE'  
cfx5solve -def input.def -fullname test -par-dist "$MACHINES"
```

Volby při spuštění

-def	vstupní soubor
-fullname	vlastní označení úlohy
-par-local	paralelní běh
-part	počet použitých jader
-par-dist HOSTNAMES	distribuovaný běh



Paralelní běh

```
ansys145 -np $PBS_NUM_PPN -b -i inputfile -o outputfile
```

Distribuovaný běh

```
$MACHINES='perl -ne 'chomp; $_{$_}++; END { print join ":",  
%_ }' $PBS_NODEFILE'
```

```
ansys145 -dis -machines $MACHINES -usessh -dir $SCRATCHDIR
```


GUI

```
launcher145
```

Volby při spuštění

-np	počet použitých jader
-dis	distibovaný běh
-machines	přiřazené stroje a počet jader na každém z nich
-usessh	použití ssh namísto rsh

File Profiles Options Tools Links Help

Simulation Environment:
 ANSYS

License:
 ANSYS Academic Research Mechanical

File Management Customization/ Preferences **High Performance Computing Setup**

Type of High Performance Computing (HPC) Run:

- None Use GPU Accelerator Capability
- Use Shared-Memory Parallel (SMP) -- Number of Processors Use GPU Accelerator Capability
- Use Distributed Computing (MPP)

MPI Type:

- Use Secure Shell instead of Remote Shell (ssh instead of rsh)
- Use launcher-specified working directory on all nodes

Use Local Machine Only -- Number of Processors

Specify Multiple Hosts

Available Hosts:

Selected Hosts:

skirit-1.ics.muni.cz	2	<input type="checkbox"/> <input type="checkbox"/>	<input type="button" value="New Host.."/> <input type="button" value="Remove"/> <input type="button" value="Edit.."/>
skirit-2.ics.muni.cz	2		

Navázání na přerušný běh

- ▶ Je nutno použít stejnou konfiguraci zdrojů

Automatické omezení počtu jader

- ▶ Podle dostupných licencí
- ▶ Podle fyzických procesorů na stroji

Solvery podporující distribuovaný výpočet

- ▶ Všechny solvery podporují paralelní výpočet
- ▶ Podporu distribuovaných výpočtů lze zjistit v manuálu
- ▶ /software/ansys-14/doc/v145/ans_dan.pdf (strana 16)

Interaktivní úloha

qsub -I

Použití vlastností

qsub -l vlastnost

Užitečné vlastnosti

infiniband	uzly s infinibandem
cl_ <název_clusteru>	konkrétní cluster (např. cl_skirit)
xeon	procesory Intel Xeon
nodecpuX	počet jader na uzlu (1, 2, 4, 8, 16, 32)
#excl	vyhrazení uzlu exkluzivně
ssd	ssd disk na scratch

Dostupné licence

- ▶ Ansys Mechanical - 5 licencí
- ▶ Ansys CFD (CFX + Fluent) - 25 licencí
- ▶ Ansys HPC license - 60 licencí

Využití licencí

- ▶ Základní licence - spustění na max. 4 jádrech (2 pro Mechanical)
- ▶ HPC licence - +1 jádro za každou

Příklad - fluent na 8 jádrech

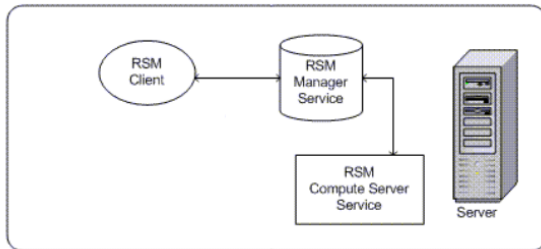
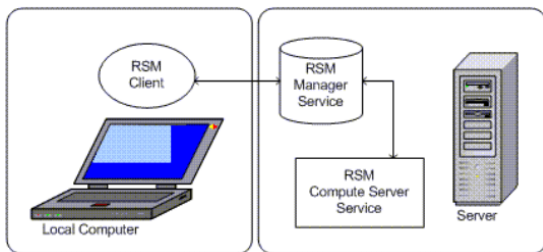
- ▶ 1 × Ansys CFD
- ▶ 4 × Ansys HPC

Připravovaná funkcionality

Zatím nelze použít v plánovači

Parametry příkazu qsub

- ▶ -l ansysCFD=počet
- ▶ -l ansysMECH=počet
- ▶ -l ansysHPC=počet



Další rozvoj produktů Ansys v MetaCentru a CERIT-SC

- ▶ Spouštění úloh přes plánovač pomocí Remove Solve Manageru
- ▶ Zamezení vybíhání částí úloh mimo kontrolu plánovače
- ▶ Využití GPU pro výpočty
- ▶ Ověření dostupnosti licencí plánovačem
- ▶ Případné rozšíření množství poskytovaných licencí
- ▶ Další případné ladění výkonu ve spolupráci s experty z firmy SVS FEM s.r.o.

Dostupná dokumentace

- ▶ <https://wiki.metacentrum.cz/wiki/ANSYS>
- ▶ </software/ansys-14/doc/readme.html>
- ▶ /software/ansys-14/doc/v145/*.pdf
- ▶ <http://www1.ansys.com/customer> (pouze pro registrované uživatele)

Děkuji za pozornost.