

Advanced computational techniques

LAB 01

1. Wstęp

Celem zajęć jest wprowadzenie do obsługi zaawansowanych pakietów obliczeń naukowo-technicznych na przykładzie projektu "ModFEM" (ModFEM pozwala na obliczenia metodą elementów skończonych na klastrach z akceleratorami w postaci kart graficznych, podczas zajęć wykorzystywany będzie pojedynczy serwer "ESTERA", "GALOP" lub "HONORATA").

2. Zadanie 1 [wykonywane lokalnie]

Proszę przypomnieć sobie lub zapoznać się z podstawowymi komendami w systemie Linux, tj. **mkdir**, **cp**, **mv**, **rm** itp. (w razie potrzeby proszę skorzystać z dokumentacji: **man komenda**) i wykonać poniższe polecenia [wszystkie polecenia powinny się znaleźć w sprawozdaniu]:

1. Utworzyć poniższą strukturę katalogów **testx** (można to zrobić jednym poleceniem **mkdir** z opcją **-p**), a następnie dodać pliki **x.c** (np. poprzez **touch**):

```
test1--|
      |--test2--|--plik1.c
      |      |--plik2.c
      |--test3--|
              |--plik3.c
```

2. Przenieść 'plik3.c' do katalogu 'test1'

3. Zadanie 2 [wykonywane lokalnie oraz na serwerze]

- o Proszę zalogować się na indywidualne konto, wykorzystując protokół: **SSH** (*ssh konto@adres_ip*), wzór nazwy konta to (zawsze tylko jeden z poniższych):
'nazwisko_imie@10.156.112.45'
'nazwisko_imie@10.156.112.163'
'nazwisko_imie@10.156.112.164'
- o Proszę utworzyć katalog o nazwie 'lab_01' (w nazwach katalogów i plików proszę nie stosować polskich znaków)
- o Proszę zmienić hasło dostępu poleceniem:

```
'passwd'
```

4. Zadanie 3 [wykonywane lokalnie oraz na serwerze]

Proszę przekopiować utworzoną strukturę plików na serwer do utworzonego wcześniej katalogu 'lab_01', w tym celu należy wykorzystać polecenie 'scp' z opcją '-r' (kopiowanie całego drzewa katalogów z plikami), szczegóły (*man scp*).

(Standardowo polecenie **scp** wywoływane jest z komputera lokalnego - tak do kopiowania na serwer, jak i z serwera).

Przykładowe użycia polecenia 'scp':

```
scp -r nazwisko_imie@10.156.112.xx:lab_01/katalog1 ~/.
```

Polecenie kopiuje z komputera o adresie IP: **10.156.112.xx** z konta **nazwisko_imie** katalog 'lab_01/katalog1' do głównego katalogu użytkownika na komputer gdzie użytkownik jest aktualnie zalogowany.

```
scp -r katalog1 nazwisko_imie@10.156.112.xx:lab_01
```

Polecenie kopiuje z lokalnego komputera katalog **katalog1** (będący podkatalogiem katalogu z którego wywoływane jest polecenie **scp**) na komputer o adresie IP: **10.156.112.xx** do podkatalogu **lab_01** katalogu domowego użytkownika **nazwisko_imie**

5. Zadanie 4 [wykonywane na serwerze]

Proszę utworzyć na serwerze katalog `~/ModFEM/` i do utworzonego katalogu przekopiować plik „`/home/students/ModFEM/ModFEM_src.tgz`”, a następnie rozpakować go za pomocą `tar`:

(`tar xvzf ModFEM_src.tgz`)

1. katalog `~/ModFEM/` powinien pozostać katalogiem, w którym przez wszystkie zajęcia przechowywanie Państwo kod źródłowy programu, w którym dokonujecie modyfikacji kodu oraz jego kompilacji i rekompilacji
2. **wszystkie ścieżki dotyczące programu ModFEM w dalszej części opisu zadań są traktowane jako podkatalogi względem `~/ModFEM/`**
3. w przypadku pełnej rekompilacji kodu z nowych dostarczanych źródeł, należy stary katalog `~/ModFEM/` przemianować na `~/ModFEM_vx` ($x = 1, 2, 3$ itd., w katalogu tym mogą znajdować się zmodyfikowane prywatne pliki, których nie należy się pozbywać) i nową paczkę rozpakować ponownie do katalogu `~/ModFEM/`

6. Zadanie 5 [wykonywane na serwerze]

Proszę zapoznać się z zawartością pliku zawierającego lokalne definicje (**kompilatory, opcje, biblioteki itp.**) do tworzenia kodów binarnych programu ModFEM (tzw. plik platformy)

`'src/cmake/Platforms/ACT.cmake'`,

7. Zadanie 6 [wykonywane na serwerze]

Proszę utworzyć katalog do kompilacji : `'bin_cmake/ACT_nompi_none_gcc_g++'` - gdzie:

`_nompi` – nie stosujemy obliczeń rozproszonych z MPI

`_none` – wyłączamy obliczenia równoległe z OpenMP, OpenCL, itp.

`_gcc` – kompilator języka C

`_g++` - kompilator języka C++

następnie przejść do katalogu:

```
cd bin_cmake/ACT_nompi_none_gcc_g++
```

8. Zadanie 7 [wykonywane na komputerze Estera]

Kompilacja w utworzonym katalogu:

`'bin_cmake/imię_nazwisko_nompi_none_gcc_g++'`. Wykonujemy komendę (realizującą konfigurację środowiska budowania kodu):

```
cmake -Wno-dev ../../src/
```

Po uruchomieniu `cmake` należy przeglądnąć powstały wydruk. Czy wszystkie opcje zostały poprawnie ustawione, np. czy poprawnie został wybrany program do rozwiązywania układów równań liniowych:

```
--> MKB INTERFACE selected direct solver: PARDISO
```

```
...
```

```
=> Direct solver via MKB interface: PARDISO
```

czy program nie będzie domyślnie zapisywał struktury macierzy układu równań liniowych:

```
Matrix print is disabled
```

oraz czy włączona jest opcja przenumerowania węzłów siatki MES: -

```
RENUMBERING is enabled
```

(dobrze jeśli program nie generuje też zbyt wielu wydruków dotyczących wydajności obliczeń):

```
ModFEM TIME TEST is disabled
```

[W kolejnych laboratoriach, dla kolejnych zmian w programie ModFEM, jeśli budowanie nie będzie prowadziło do spodziewanych rezultatów (np. nie uwzględni pewnych zmienionych opcji), można dokonać pełnego przebudowania za pomocą: **cmake -Wno-dev ../../src/ ale z uprzednim usunięciem starych plików** (tworzonych przez cmake) poprzez polecenie **rm -rf *** (**uwaga: przebudowania należy dokonać w katalogu bin_cmake/imie_nazwisko_nompi_none_gcc_g++ istnieje ryzyko zmazania wszystkiego, przy uruchomieniu w złym katalogu!!!, najlepiej przed uruchomieniem komend sprawdzić bieżący katalog za pomocą komendy pwd**)]

Następnie wykonujemy kompilację kodu wykorzystując program **make**:

```
make -j4
```

Jeżeli wszystkie kroki wykonane były poprawnie to powinien powstać zestaw kodów programu ModFEM w tym następujące pliki binarne:

```
MOD_FEM_heat_prism_std  
MOD_FEM_heat_prism2d_std  
MOD_FEM_heat_prism2d_std_quad  
MOD_FEM_ns_supg_heat_prism2d_std
```

(w przeciwnym wypadku sprawdzić poprawność definicji w pliku 'src/cmake/Platforms/ACT.cmake'):

9. Zadanie 8 [wykonywane na komputerze Estera]

Uruchomienie kodu:

Proszę przekopiować przykładowe pliki konfiguracyjne problemu

(problem_heat.dat, bc_heat.dat, mesh_prism.dat) ze strony przedmiotu do katalogu ~/lab_01/

W katalogu ~/lab_01/ uruchamiamy program wykonując polecenie:

```
~/ModFEM/bin_cmake/ACT_nompi_none_gcc_g++/MOD_FEM_heat_prism_std .
```

oraz wykonujemy polecenia z menu głównego programu ModFEM:

```
s [enter] z [enter] q [enter]
```

- o poprawne zakończenie obliczeń sygnalizowane jest wydrukiem po wciśnięciu opcji z (obliczającej oszacowanie błędu aproksymacji):

Zienkiewicz-Zhu error estimator = 1.207858240564

(lub o innej bardzo zbliżonej wartości)

Sprawozdanie z laboratorium powinno zawierać krótki opis wykorzystywanych komend w systemie Linux, w tym komend do pracy w sieci ssh i scp. Następnie powinien znaleźć się krótki opis procedury przygotowania plików niezbędnych do kompilacji projektu 'ModFEM'. Sprawozdanie powinno zawierać też początek i koniec wydruku z procedury kompilacji programu ModFEM. W wypadku wystąpienia błędów kompilacji powinny być umieszczone kod błędu wraz z opisem kroków podjętych w celu jego usunięcia (kod błędów obejmuje wydruk CMake oraz wydruk kompilatora GCC). Potwierdzeniem działania programu jest zrzut ekranu zawierający wydruk menu głównego programu ModFEM bezpośrednio po obliczeniu oszacowania normy błędu wraz z widocznym loginem użytkownika.