

Leibniz-Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften



COMSOL at LRZ – a Howto "LRZ Linux Cluster Systems and COMSOL Workflows"

Martin Ohlerich



• LRZ Linux Cluster Systems

- General Overview
- Access/Login
- Basic Usage

COMSOL Workflow Configurations

- A normal Batch Job
- From GUI on a Login-Node
- From GUI on a local PC via a Login-Node



• LRZ Linux Cluster Systems

- General Overview
- Access/Login
- Basic Usage
- COMSOL Workflow Configurations
 - A normal Batch Job
 - From GUI on a Login-Node
 - From GUI on a local PC via a Login-Node

LRZ Linux Cluster Overview



Ē

Leibniz-Rechenzentrum







In terminal on your Laptop/PC login on *lxlogin6.lrz.de*

- \$ ssh bla34zak@lxlogin6.lrz.de
- or, if X-forwarding (graphical applications such as COMSOL GUI)
- \$ ssh -Y bla34zak@lxlogin6.lrz.de

Copying files to/from Ixlogin6.Irz.de

\$ scp bla34zak@lxlogin6.lrz.de:path/to/file .

or back

\$ scp file bla34zak@lxlogin6.lrz.de:path/to/

Works also for folders:

\$ scp -r folder bla34zak@lxlogin6.lrz.de:path/to/



Access/Login – PuTTY under Windows





SCP/File Transfer under Windows/Linux/MAC

		CD							1	
A C:\ - a2c06aa@lxlogin6	o.lrz.de - WinS	СР					- 1			
Lokal Markieren Dateien	n Befehle Sit	zung Einstellungen I	Entfernt Hilfe							
🖶 🔁 📚 Synchronisier	ren 🦻 🐙	💽 🚳 📦 Liste	🔹 Übertragungsoptionen	Standard 🔹	<i>🔁</i> -					
📮 a2c06aa@lxlogin6.lrz.d	e 🚅 Neue	Sitzung								
L. C: OSDisk	- 🚰 🔽 🛛	+ • + • E E	🏠 🎜 🐕	🔤 a2c06aa 🛛 🝷 🚰	7 -	-> - 🗈 🖻 🏠 🎜	🔍 Dateien su	ichen 🗜		
🙀 Hochladen 👻 🃝 Be	arbeiten 👻 🕽	🕻 🛃 🕞 Eigenschaf	ten 🛗 🕞 🛨 🖂 🕅	Herunterladen 👻 🃝	Bearbeiten	• 🗙 🖬 🕞 Eigenscha	aften 🚰 »	+ - V		
C:\				/home/hpc/a2c06/a2c06aa						
Name	Größe	Тур	Geändert	Name	Größe	Geändert	Rechte	Besitzer		
SMSTaskSequence		Dateiordner	05.01.2017 16:03:31	€		05.07.2017 16:06:02	rwxr-sr-x	root		
Corel PaintShop Pro		Dateiordner	08.01.2017 11:17:04	comsol		06.07.2017 10:42:30	rwxr-sr-x	a2c06aa		$\lambda/10$
Logs		Dateiordner	12.09.2016 13:52:16	micromixer_cluster.m	80.120 KB	06.07.2017 10:21:07	rwxrr	a2c06aa		
PerfLogs		Dateiordner	16.07.2016 15:23:21	micromixer_cluster_cl	1.431 KB	06.07.2017 10:24:11	rw-rr	a2c06aa		
Program Files		Dateiordner	19.03.2017 09:04:16							
Program Files (x86)		Dateiordner	19.03.2017 05:16:22							
- temp		Dateiordner	06.07.2017 11:06:33							
Users		Dateiordner	05.07.2017 14:10:03							
Windows		Dateiordner	30.06.2017 11:58:08							
📓 globdata.ini	2 KB	Konfigurationsein	07.11.2007 08:00:40							
Microsoft Windows S	0 KB	Datei	05.01.2017 15:13:12							
Personality.ini	1 KB	Konfigurationsein	11.11.2016 13:43:38							
				<				>		
0 B von 1.143 B in 0 von 12			9 versteckt	0 B von 81.551 KB in 0 von 3				6 versteckt	1	
						🔒 SF	TP-3 🗐	0:00:13		











Login – Things that make life easier (Linux/MAC)

Local PC/Laptop:

\$ ssh-keygen -t rsa # generate private-public key pair Generating public/private rsa key pair.Enter file in which to save the key (XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX/.ssh/id_rsa): Enter passphrase (empty for no passphrase): Enter same passphrase again: Enter a non-empty, • • •

\$ cat ~/.ssh/id_rsa.pub ssh-rsa AAAB3NzaC1yc2EAAAADAQA . Secure passphrase

(different from your login password!)

Copy this public key into ~/.ssh/authorized_keys in the Home directory on Ixlogin6.Irz.de !

(more information)



Login – Things that make life easier (Linux/MAC)





Login – Things that make life easier (Windows)

PuTTY Key Generator ? File Key No key. No	PuTTY Key Generator File Key Conversions Help Key Please generate some randomness by moving the mouse over the bl	Copy this public key into ~/,ssh/authorized_keys in the Home directory on "Ixlogin6.lrz.de !
Actions Generate a public/private key pair Load an existing private key file Save the generated key Parameters Type of key to generate: O SSH-1 (RSA) Number of bits in a generated key: 2048	Actions Generate a public/private key pair Load an existing private key file Save the generated key Save public key Parameters Type of key to generate: SSH-1 (RSA) © SSH-2 RSA St	PuTTY Key Generator ? × File Key Conversions Help
Enter a non-empty, s (different from you	Secure passphrase r login password!)	Centerate Generate Load an existing private key file Load Save the generated key Save public key Parameters Type of key to generate: O SSH-1 (RSA) Image: SSH-2 RSA

Number of bits in a generated key:

2048

lrz

Login – Things that make life easier (Windows)

	Pageant Key List	? ×
	ssh-rsa 2048 12:5e:64:99:4f:28:72:05f3:1e:b3:38:69:5f:cf:28 rsa-key-20	170706
Help	Add Key Remove Key	Close
ageant	Пар	



The Environmental Module System

On Ixlogin6 (LRZ cluster):

\$ module help	# get help
\$ module list	<pre># list loaded modules</pre>
Currently Loaded Modulefiles:	
1) admin/1.0 3) intel/16.0	5) mpi.intel/5.1
2) tempdir/1.0 4) mkl/11.3	6) lrz/default
\$ module avail comsol	<pre># search for available mods</pre>
/lrz/sys/share/modules/fi	iles/applications
comsol/4.1 comsol/4.2 comsol/5.	.2a comsol/5.3(default)
\$ module load comsol	# load module
\$ module unload comsol	# remove module

Sets *environment variables* (PATH/LD_LIBRARY_PATH/...) and *aliases*

(more information)







SLURM – Basic Job Control

On Ixlogin6 (LRZ cluster):

\$ sinfo -M my CLUSTER: mpp2	op2 2	# get	info about	clusters	s (all)		
PARTITION	AVAIL TIMELI	MIT NODES S	STATE NODEI	IST			
mpp2_batch*	up 2-00:00	:00 2 0	drain* mpp2r	04c04s[()3-04]		
mpp2_batch*	up 2-00:00	: 00 2 a	alloc mpp2r	04c04s[()1-12]		
<pre> \$ sbatch job.sh</pre>							
JOBID PARTIT	ION NAME	USER	STATE	TIME	TIME_LIMI		
NODES NODELIS	ST(REASON)						
345705 mpp2_1	oatch ans_test	bla34zak	PENDING	0:00	20:00		
4 (Resour	rces)						
\$ scancel -M	mpp2 345705	# cano	cel job				



On Ixlogin6 (LRZ cluster):

```
# get info about pending/running/completed jobs
$ scontrol show jobid -dd 345418 -M mpp2
JobId=345418 JobName=comsol
    UserId=bla34zak (39481) GroupId=a2c06(2351)
...
Command=/lrz/sys/applications/comsol/5.3/bin/comsol batch ...
...
```

Very useful when debugging the job submission string From COMSOL GUI



SLURM Job Script

```
#!/bin/bash
#SBATCH -o ./job_%j.out  # output of screen
#SBATCH -D.
                            # work directory
#SBATCH -J comsol mpp2
                            # job name
#SBATCH --get-user-env # environment
#SBATCH --clusters=mpp2 # which queue
#SBATCH --nodes=4
                       # CPU resources
#SBATCH --ntasks-per-node=28 # multiples of 28 for mpp2
#SBATCH --mail-type=none # notification @ state change
#SBATCH --mail-user=<bla34zak@lrz.de>
#SBATCH --time=00:30:00 # estimated run time
. /etc/profile.d/modules.sh  # activate environment modules
module load comsol/5.3
mpiexec hostname | sort > mpi_hostfile
comsol batch -inputfile micromixer_cluster.mph
            -outputfile micromixer_cluster_output.mph
            -f mpi_hostfile
```



- LRZ Linux Cluster Systems
 - General Overview
 - Access/Login
 - Basic Usage

COMSOL Workflow Configurations

- A normal Batch Job
- From GUI on a Login-Node
- From GUI on a local PC via a Login-Node



On Ixlogin6 (LRZ cluster): MPH file prepared



On MPP2, you get only complete nodes!



On Ixlogin6 (LRZ cluster): ... as before; now hybrid

From GUI on Login-Node

On Ixlogin6 (LRZ cluster): open COMSOL



	🐺 Einstellungen		-	
-	Cluster Computing			
	= Berechnen 🔒			
	Label: Cluster Computing	I] ĵ
	- Batch-Einstellungen			
2	Dateiname:	micromixer_cluster_MPP2_out.mph		
	Knotenanzahl:	4		
	Batch-Lizenz verwen	den		
1	 Cluster Computing Ein 	stellungen		
	Einstellungen:	Benutzer gesteuert	~	
	Scheduler-Typ:	SLURM	~	
1	Scheduler:	mpp2		
	Benutzer:	a2c06ab		
	Name der Queue:			
	Verzeichnis:	/local/home/di49zop/Progs/Comsol/TestCase	Durchsuchen	1
	Server-Verzeichnis	pfad angeben		
	Verzeichnis: /home/hp	c/a2c06/a2c06ab/comsol/3_GUI_from_remotePC	Durchsuchen	I.
	Externen Pfad zum	COMSOL batch-Verzeichnis spezifizieren		ł
	Verzeichnis: /home/hp	c/a2c06/a2c06ab/comsol/3_GUI_from_remotePC	Durchsuchen	
	Pfad zum externen	COMSOL-Installationsverzeichnis spezifizieren		ł
	Verzeichnis: /lrz/sys/a	pplications/comsol/5.3	Durchsuchen	
	Anzahl an Job-Neustarts:	0		
	Alive-Time (Sekunden):	300		

Leibniz-Rechenzentrum

From GUI on Login-Node



Click on Study 1 \rightarrow = Compute

Discussion: Why two cluster computing nodes? What means green color? Differences to Windows GUI? Batch node? (number of cores)

👬 Einst	🔛 Einstellungen 🗖 🗖						
Cluster	Computing						
= Aus	sführen 📙						
Label:	Label: Cluster Computing 1						
▼ Allgemein							
Durch	Studienschritt definiert:	Cluster Com	puting	< 1			
Batch	Job:	Batch 1		~ 1			
Ba	atch-Lizenz verwenden						
▼ Clus	ster-Einstellungen						
Knote	enanzahl:		4				
Anzał	Anzahl der Prozesse auf dem Hostrechner: 28						
7 🔲 AI	7 🔲 Ausschließliche Knoten						
Erforderliche Knoten:							
Speid	her pro Knoten (MB):		0				
Laufz	eit (Minuten):	5	00:20:00				
Prioria	ätswert:		0				

Leibniz-Rechenzentrum

From GUI on local PC via a Login-Node

On local PC-Laptop: open COMSOL

Cluster Computing settings as before + *Remote and Cloud Access*

on Windows: PUTTY, PSCP

	Cluster Computing								
	= Berechnen 📙								
-	▼ Remote und Cloud Zugriff								
	Remote Computing Einstellungen								
	Einstellungen: Benutzer gesteuer	t	~						
5	🗾 Remote ausführen								
	Befehlsaufruf per Fernzugriff:	SSH	~						
	SSH-Befehl:	SSH	~						
nac	SSH-Verzeichnis:		Durchsuchen						
nys	SSH-Schlüsseldatei:		Durchsuchen						
	Vorwärts-Ports:								
-	Host-Port:								
	SSH-Benutzer:	a2c06ab							
	Befehl zur Dateiübertraguna	SCP	~						
	SCP-Befehl:	Benutzer	\sim						
	Befehl:								
	SCP-Verzeichnis:		Durchsuchen						
	SCP-Schlüsseldatei:		Durchsuchen						
	SCP-Benutzer:	a2c06ab							
	Remote Hosts								
	lxlogin6.lrz.de								
	1 + 🗮 📂 🔒								
Leibniz-	Ziel-Betriebssystem bei Fernzugri	ff: Linux	~						



General Preferences

Options → Preferences

Allgemein	Multicore								
Anwendungsbibliotheken	Anzahl der Kerne: 🔲 14								
Bauteilbibliotheken									
Client-Server	Anzahl von Sockets: 📘 2								
Dateien	Cluster Computing								
E-Mail		CUIDM .							
Ergebnisse	Scheduler-Typ:	SLORM							
Geometrie	Zusätzliche Planer-Argumente:								
Grafik- und Plotfenster									
Hilfe	Zusätzliche MPI Argumente:								
Methoden	MPI Verzeichnis:								
Model Builder									
Multicore und Cluster Computing	Scheduler:	mpp2							
Parametrischer Sweep	Benutzer:	a2c06ab							
Physics Builder									
Remote Computing	Name der Queue:								
Sicherheit	Batch-Verzeichnis:	/local/home/di49zop/Progs/Comsol/Test Durchsuchen							
Updates	Server-Verzeichnispfad angeben								
	Verzeichnis: /home/hpc/a2c06/a2c06ab/comsol/3_GUI_from_remoteP Durchsuche								
	Externen Pfad zum COMSOL batch-Verzeichnis spezifizieren								
	Verzeichnis: /home/hpc/a2c06/a2c06ab/comsol/3_GUI_from_remoteP Durchsuchen								
	Pfad zum externen COMSOL-Installationsverzeichnis spezifizieren								
	Verzeichnis: /lrz/sys/applicatio	tions/comsol/5.3 Durchsuchen							
	Befehl Voranstellen:								
	Befehl Hintenanstellen:								
	Anzahl an Job-Neustarts:	0							
	Alive-Time (Sekunden):	300							

Leibniz-Rechenzentrum



Visualization (from browser)

🥯 🗶 .			_	Li	RZ VNC Client	- Mozilla Firefox	(~ /	^ 😣
	NC Client 3	< +												
	https://te rz.cs /ync	irz.ae					C	Q , Suchen		📩 📋	÷	^	9	=
🙋 Mail 🗈 L	LRZ~ 🖹 CFD~ 🖹 I	ntel 🗸 🛅 Comsol 🗸 🛞 moo	lule Doc 🦂 Va	lgrind 🕒 Th	e Dark Knight	Emoti 🗎 Para	allel∨	🖹 LFS-LinuxFromScrat	🗸 🖻 PDE N	umerics∨	🗄 Grap	nics∨ 🗎] C++∨	**
Irz Supe	perMUC VNC Client	Linux Cluster VNC Client M	yProxy Client	Help	About				J					Î
					-									
				Lir	าux (Cluste	er							
Allgemein Ans	sicht					• 1 * 4	L							
Anwendungsbibliotheken Ren	ndern:	OpenGL 🥎	\sim	V		.llent								
Bauteilbibliotheken														
Client-Server Opt	timieren auf:	Qualitat	\sim	VNC Sess	sion Reserved	d Time (hours):								
Dateien Anti	ti-Aliasing:	Medium	\sim											
E-Mail			- 1											
Ergebnisse Det	tail:	Normal	~		Set / Reset \	/NC Password								
Geometrie	Logo auf Arbei	itsfläche zeigen												
Grafik- und Plotfenster	Materialfarbe	und -textur anzeiger	1											
Hilfe				(D										
			Username	Password	MyProxy C	Lertificate	SLCS P	roxy						
					linux cluster									
rvgirun coms					•••••									
				_	_		_							
					LOG									
July 13, 2017		Leibn	iz-Rech	enzent	rum								25	×



Thank you for your attention!