

Gadget 2 kód telepítése és futtatása az Atlasz HPC klaszteren

Rudolf Ádám, ELTE TTK, Fizikus MSc

2012.11.14.

Bevezetés

A Gadget 2 egy kozmológiai N-test szimulációra specializált C-ben és FORTRAN-ban írt kódcsomag, amit az élvonalbeli kutatásokban is használnak.

(Pl.: Millenium Simulation Project:

<http://www.mpa-garching.mpg.de/galform/virgo/millennium/>) A kód több processzoron való párhuzamos futtatásra van optimalizálva. Letölthető a <http://www.mpa-garching.mpg.de/gadget/> címről. A letöltött állományban megtalálható az elméleti alapokat tartalmazó eredeti cikk, valamint a telepítést és a használatot segítő részletes felhasználói kézikönyv.

Feladatunk a program telepítése a szükséges komponensekkel együtt, tesztelése egy, valamint több processzoron való futtatással és valamilyen asztrofizikai probléma szimulálása.

A számításokat az Eötvös Loránd Tudományegyetem Atlasz nevű, nagy teljesítményű számolásokra (High Performance Computing, HPC) specializált számítógépcsoportján végeztem. A továbbiakban a teljes részletesség mellőzésével, csak a lényegét leírva bemutatom, hogy hogyan dolgoztam.

1. A programcsomag telepítése

1.1. Függőségek

A felhasználói kézikönyv alapján a program működéséhez négy csomagnak kell telepítve lennie:

- **mpi** - Message Passing Interface. A párhuzamos futtatáshoz van rá szükség.
- **gsl** - GNU scientific library. Egyszerű számolásokhoz van rá szükség.
- **fftw** - Fastest Fourier Transform in the West. 3-asnál régebbi verzió szükséges az mpi-jal való kompatibilitás miatt. A program a nagy távolságú erők számolásához használja.
- **hdf5** - Hierarchical Data Format. Bemeneti, és/vagy kimeneti fájlok formátumához kell.

Az Atlasz gépre annak van jogosultsága belépni, aki rendelkezik Caesar azonosítóval (ELTE polgárok), és leadott egy kitöltött, valamint felelős vezetővel aláíratott űrlapot. Az Atlaszon az fftw kivételével minden telepítve van, így nekünk csak azt kell feltennünk. Az fftw-t le lehet tölteni a <http://www.fftw.org> címről (a kézikönyv alapján). Kicsomagolás után konfiguráltam, ahol egyebek mellett engedélyezni kellett az mpi-jal való együttműködést, valamint, mivel root jogosultságaink nincsenek a gépen, a saját mappánkba kell telepíteni:

```
./configure --enable-mpi --enable-type-prefix  
--enable-float --prefix=/users/USERNAME/fftw
```

Ezután a megszokott módon, a `make` és `make install` parancsokkal telepítjük. Ha ezt megtettük, a Gadget programot telepíthetjük és használhatjuk.

1.2. A Gadget 2 telepítése

Letöltöttem a programot a <http://www.mpagarching.mpg.de/gadget/> linkről, és kicsomagoltam. Ezután a `make` fájlt módosítani kell, hogy a program az adott számítógépen is tudja, hol keresse a szükséges csomagokat. Itt kell megadnunk azt is, ha hdf5 formátumot szeretnénk használni az alapértelmezett, FORTRAN által használt formátum helyett. Későbbiekben szükségünk lesz erre, szóval ezt is beállítottam.

2. Asztrofizikai szimulációk futtatása

2.1. Tesztfuttatás a mellékelt galaxy szimulációval

A Gadget make fájlja a különböző szimulációk futtatására különböző módon állítandó. A letöltött programhoz mellékelve van néhány teszteléshez használható szimuláció. Ezek állnak a hozzájuk tartozó make fájlból, paraméter-fájlból, valamint kezdőfeltételeket tartalmazó fájlokból.

Tesztként a galaxy nevű, galaxisütközést megvalósító szimulációt futtattam. Ehhez a makefile-t bemásoltam a Gadget 2 mappájába, és a fent leírtak szerint az adott számítógépre specializálva módosítottam. A paraméterfájlban is meg kell adni az adott körülmények között érvényes elérési utakat a kezdeti feltételeket tartalmazó fájlban, valamint a kimenetnek. Ha szeretnénk, itt változtathatunk szimulációs paramétereket, például az idő kezdetét és végét, a snapshotok kimentésének frekvenciáját, a bemeneti és kimeneti állományok formátumát, vagy nevét.

A make parancs kiadása után generálódik egy Gadget2 nevű futtatható állomány, amit futtatáskor argumentumként várja a hozzá tartozó paraméter-fájl. Egyszerűen kiadva a parancsot, a szimuláció elindul és lefut a fejgépen (az Atlasz számítógépklaszter egyetlen, kitüntetett számítógépén). Tulajdonképpen ez a szimuláció a fejgépen, párhuzamos futtatás nélkül is lefut belátható idő alatt, de érdemes megnézni a több processzoron történő futtatást, egyrészt, mert ez adja az Atlasz igazi erősségét, másrészt, mert így érzi igazán elemében magát a Gadget.

A párhuzamos futtatásra az mpi ad lehetőséget. Futtatni az openmpi.mpirun paranccsal tudunk, ami után teljes elérési úttal kell megadni a futtatandó fájlt, valamint annak argumentumát. Ezt hosszúsága miatt érdemes bash scriptként elmenteni. Ezt az sbatch parancsra kell átadni egyéb paraméterek mellett, amiket nem részleteznék, megtalálhatók a <http://www.caesar.elte.hu/hpc/atlasz-uguide.html> címen. Ha ezt a parancsot kiadjuk, azzal elindítunk egy jobot, ami beáll a sorba a végrehajtásra váró többi job közé. Lehetőségünk van még megtudni, hogy melyik számítógépcsoporton mennyi szabad node van, valamint lekérni a sorbanálló jobok listáját, valamint leállítani az általunk indított folyamatokat. A párhuzamos futtatást teszteltem, de mint korábban említettem, főleg a fejgépen való, egyszerű futtatást használtam.

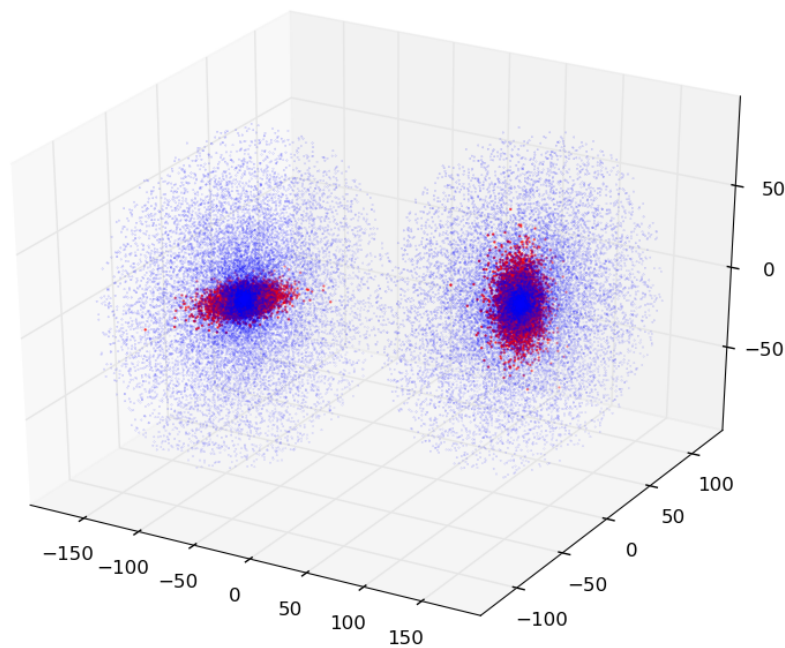
2.2. Eredmény, vizualizáció

A program a beállítások szerint .hdf5 fájlalba menti a részecskék helyét adott időközönként, a paraméterfájlban megadottak szerint. Feladat még az adatok valamilyen vizualizálása. Erre a

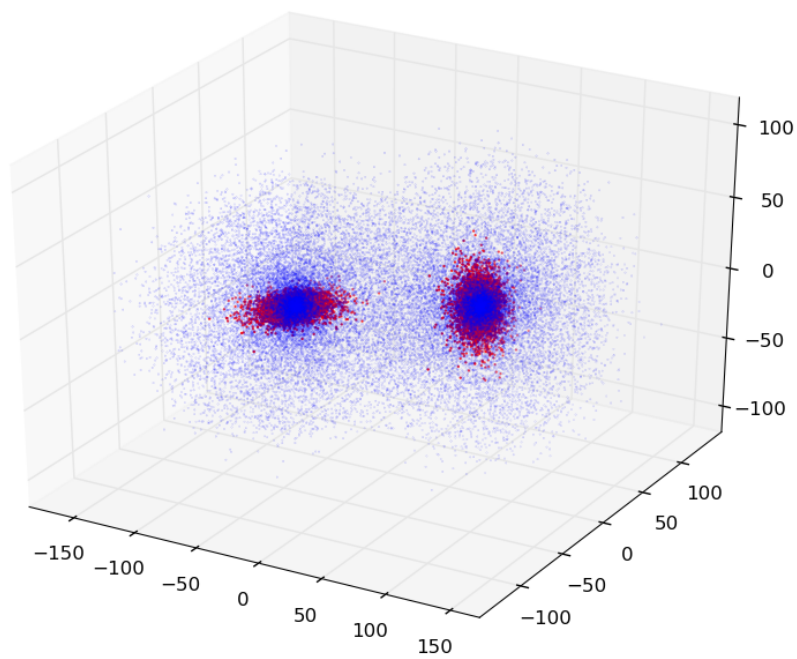
<http://elbrunz.wordpress.com/2012/01/07/my-first-gadget2-tests/> oldalon található python scriptet alkalmaztam. Ennek működéséhez szükség van természetesen python fordítóra, valamint a tables és a matplotlib csomagokra azok függőségeivel együtt. A scriptet futtatva a vele egy könyvtárban lévő, megfelelő névformátumú .hdf5 kiterjesztésű fájlból .png kiterjesztésű plotokat gyárt. A névformátum alapértelmezetten úgy van beállítva, hogy megegyezzen a Gadget alapértelmezett kimeneti neveivel.

A kapott .hdf5 fájlokat scp kliens segítségével kimásoltam, és a saját gépemem lefutattam rajta a fenti programot. A kapott képek alább láthatók.

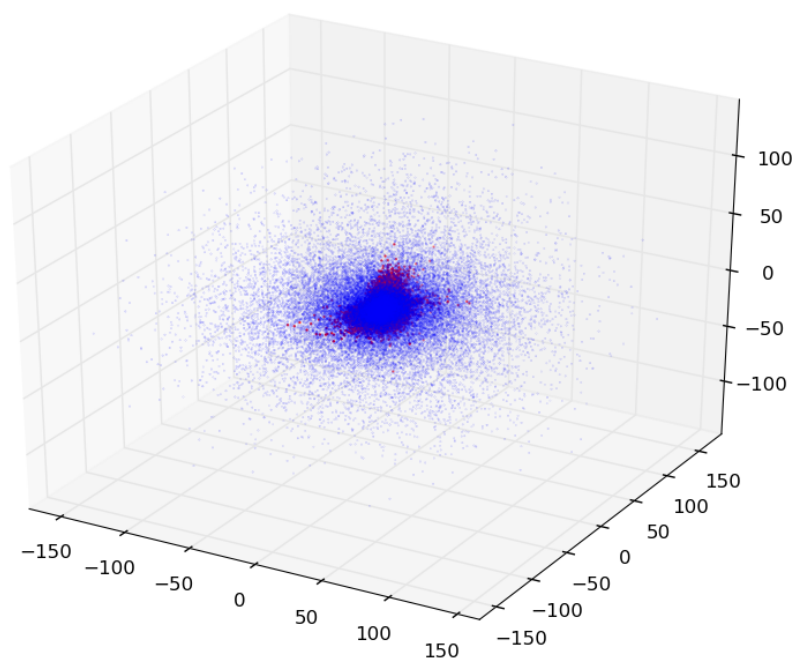
Köszönöm Kun Jeromosnak és Hauszknacht Péternek a segítséget!



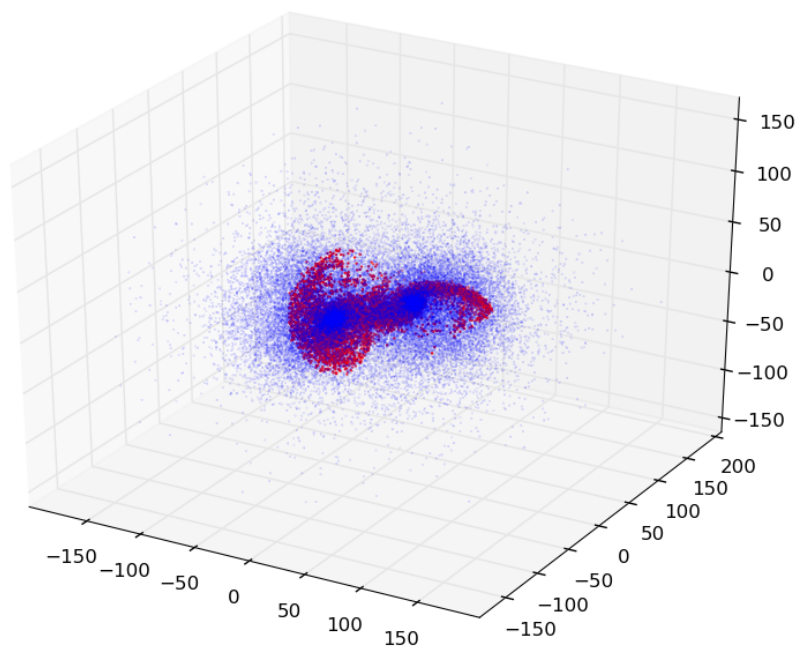
1. ábra. Snapshot $t = 0$ -ban



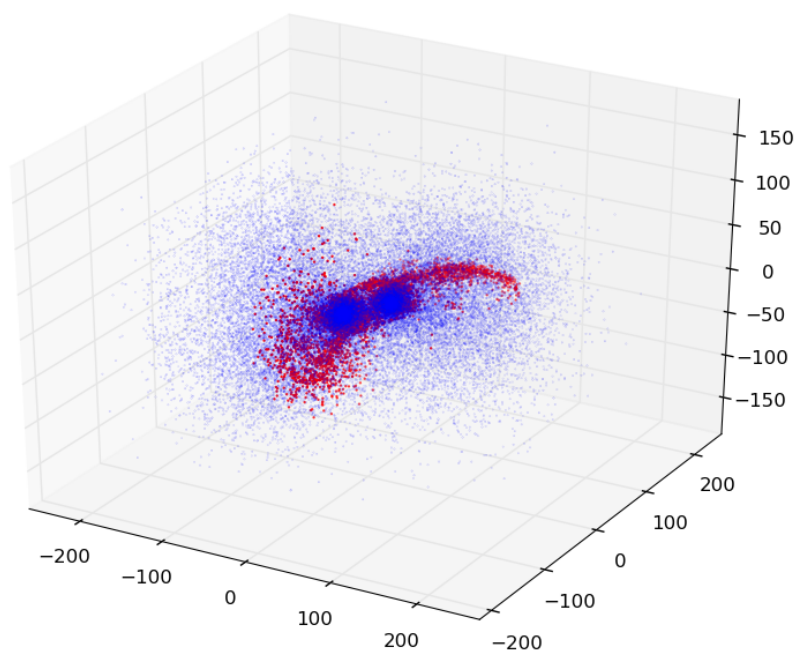
2. ábra. Snapshot $t = 0.5$ -ben



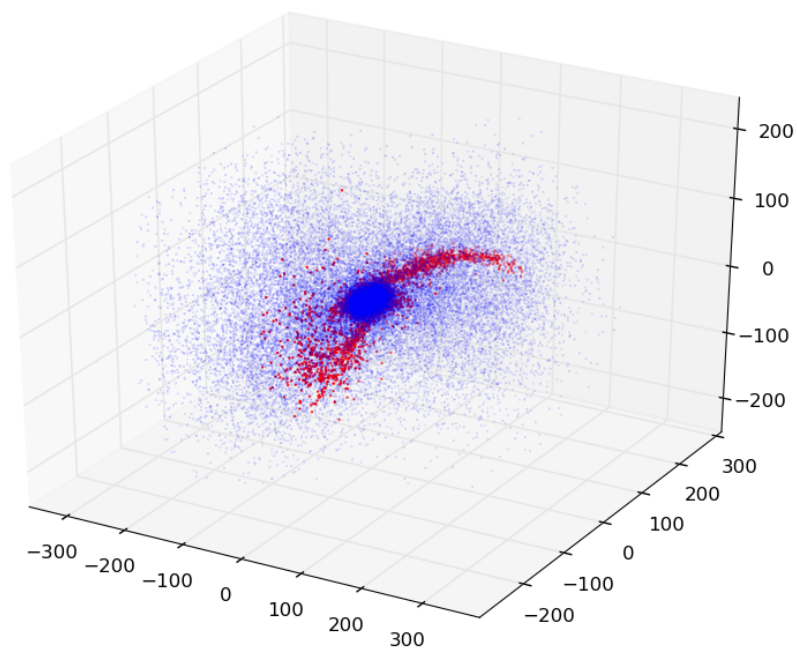
3. ábra. Snapshot $t = 1.0$ -ban



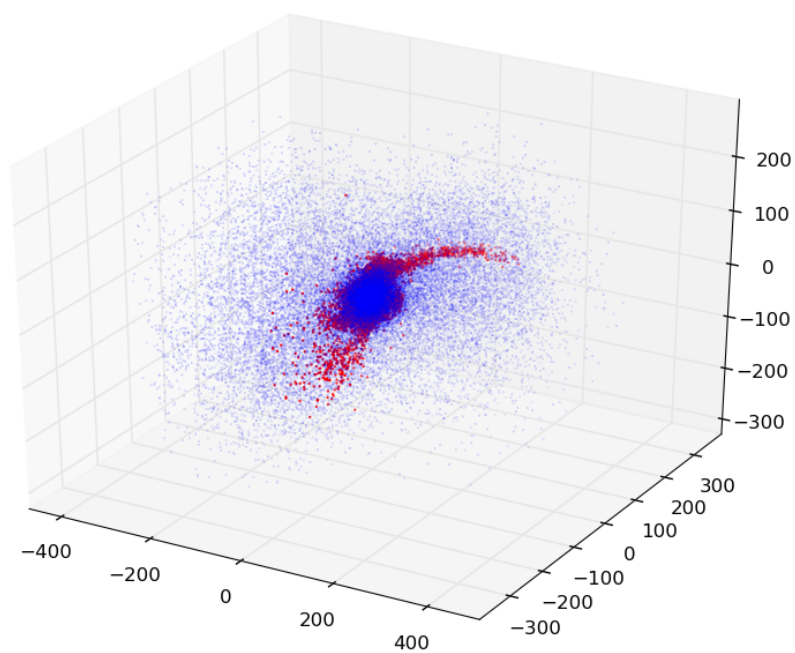
4. ábra. Snapshot $t = 1.5$ -ben



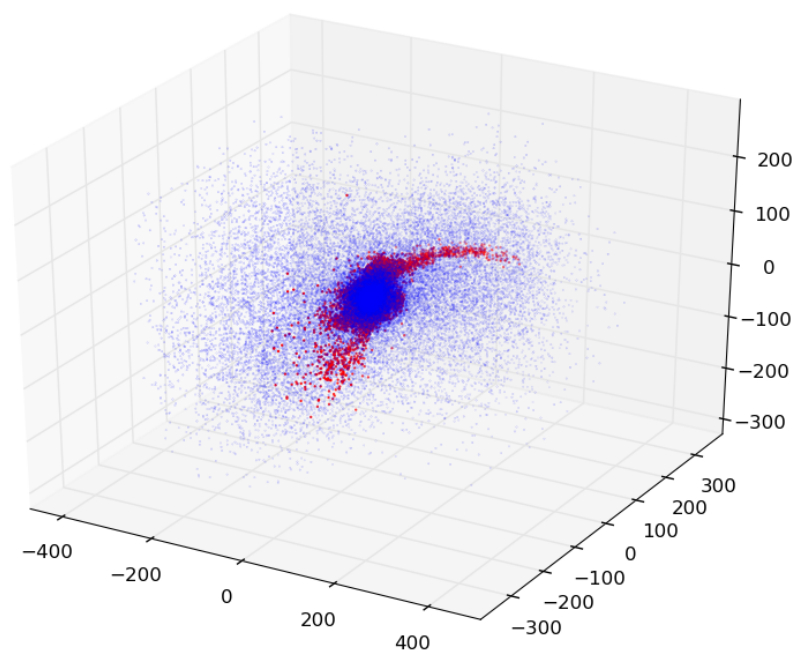
5. ábra. Snapshot $t = 2.0$ -ban



6. ábra. Snapshot $t = 2.5$ -ben



7. ábra. Snapshot $t = 3.0$ -ban



8. ábra. Snapshot $t = 3.5$ -ben