

スパコンの使い方

大阪大学 情報推進部 情報基盤課

利用方法の解説

本講習会では初心者を対象に
大規模計算機システムの利用方法を解説します

途中、スパコンを利用したデモを行います

配布したアカウントは講習会後もしばらく利用可能です
ご自宅からでも接続できますのでご自由にお試してください

本日のプログラム

I. システムのご紹介

II. 利用方法の解説

i. システムへの接続

ii. プログラムの作成・環境設定・コンパイル

iii. ジョブスクリプトの作成

iv. ジョブスクリプトの投入

III. 利用を希望する方へ

OCTOPUS

2017年12月運用開始

構成の異なる4種類のノードで構成されている



	CPUノード	GPUノード	Xeon Phiノード	大容量主記憶 搭載ノード
コア数	24	24	64	128
演算性能	1.996 TFLOPS	23.196 TFLOPS	2.662 TFLOPS	8.192 TFLOPS
メモリ	192GB	192GB	192GB	6TB
ノード数	236ノード	37ノード	44ノード	2ノード

合計319ノード 1.463PFLOPS

SQUID

2021年5月運用開始

構成の異なる3種類のノードで構成されている



	CPUノード	GPUノード	ベクトルノード
コア数	76	76	VH:64 VE:10
演算性能	5.837 TFLOPS	161.837 TFLOPS	24.56 TFLOPS
メモリ	256GB	512GB	VH:128GB VE:48GB
ノード数	1520ノード	42ノード (8GPU / ノード)	36ノード (8VE / ノード)

合計1,598ノード 16.519PFLOPS

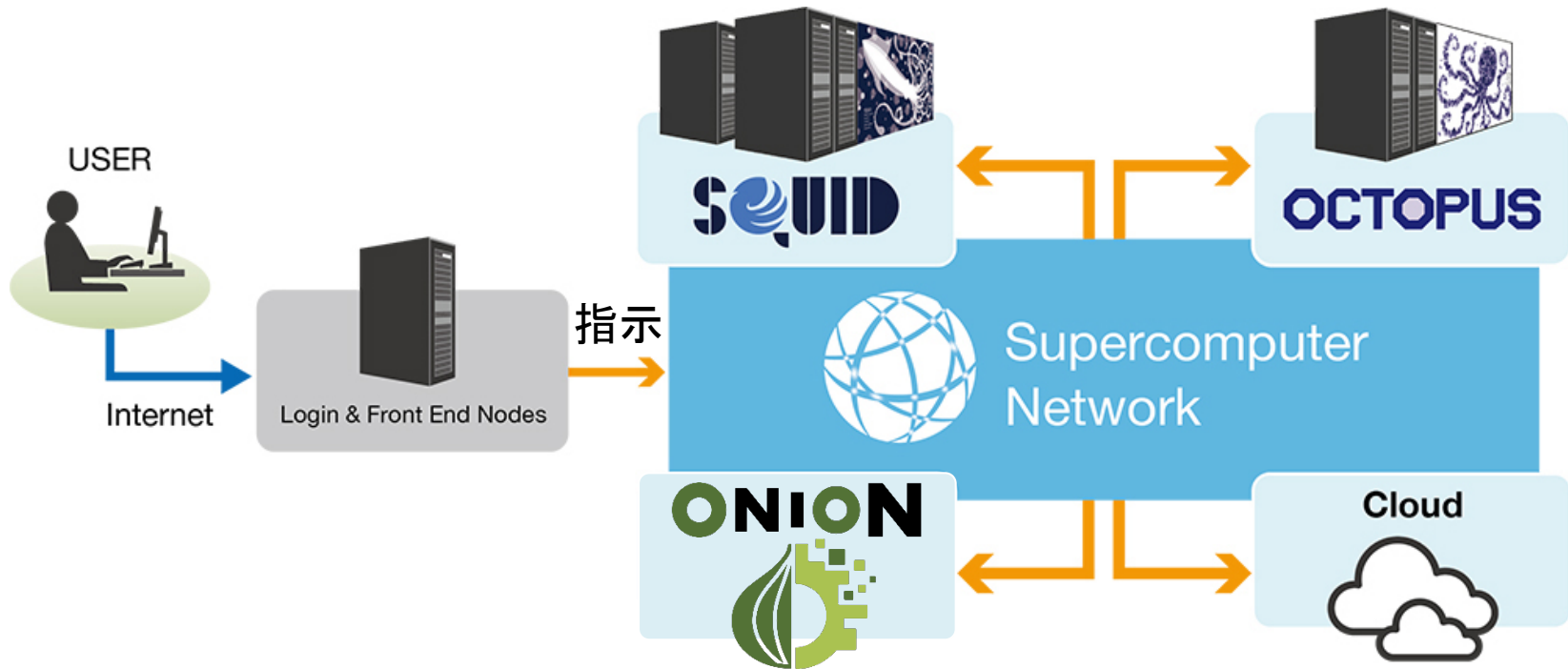
フロントエンドサーバ

プログラムのコンパイルや計算結果の確認を行うための**作業用サーバ**

フロントエンド端末から各計算機に対して
処理の実行を指示 ※詳細は後述

スパコン本体へのログインは**原則禁止**(一部例外有)

システム全体図



今回はSQUID、OCTOPUSの使い方を紹介します

本日のプログラム

I. システムのご紹介

II. 利用方法の解説

- i. システムへの接続
- ii. プログラムの作成・環境設定・コンパイル
- iii. ジョブスクリプトの作成
- iv. ジョブスクリプトの投入

利用の流れ

ユーザー

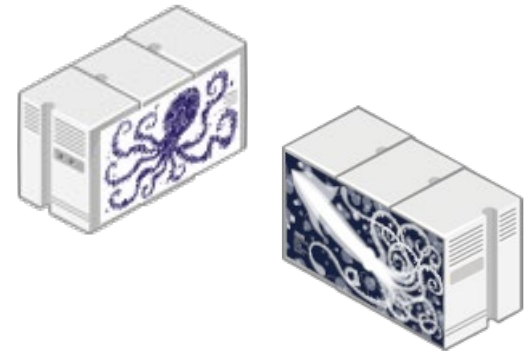


フロントエンド端末



システムへの接続

計算ノード



環境設定

プログラム作成

コンパイル

ジョブスクリプト
作成

ジョブスクリプト
投入

本日のプログラム

I. システムのご紹介

II. 利用方法の解説

i. システムへの接続

ii. プログラムの作成・環境設定・コンパイル

iii. ジョブスクリプトの作成

iv. ジョブスクリプトの投入

III. 利用を希望する方へ

システムへの接続

ログインはSSH (Secure Shell) 接続

Win: コマンドプロンプト、TeraTermなど Mac: ターミナル

接続先は OCTOPUS : **octopus.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp**
SQUID : **squidhpc.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp**

ユーザー



フロントエンド端末

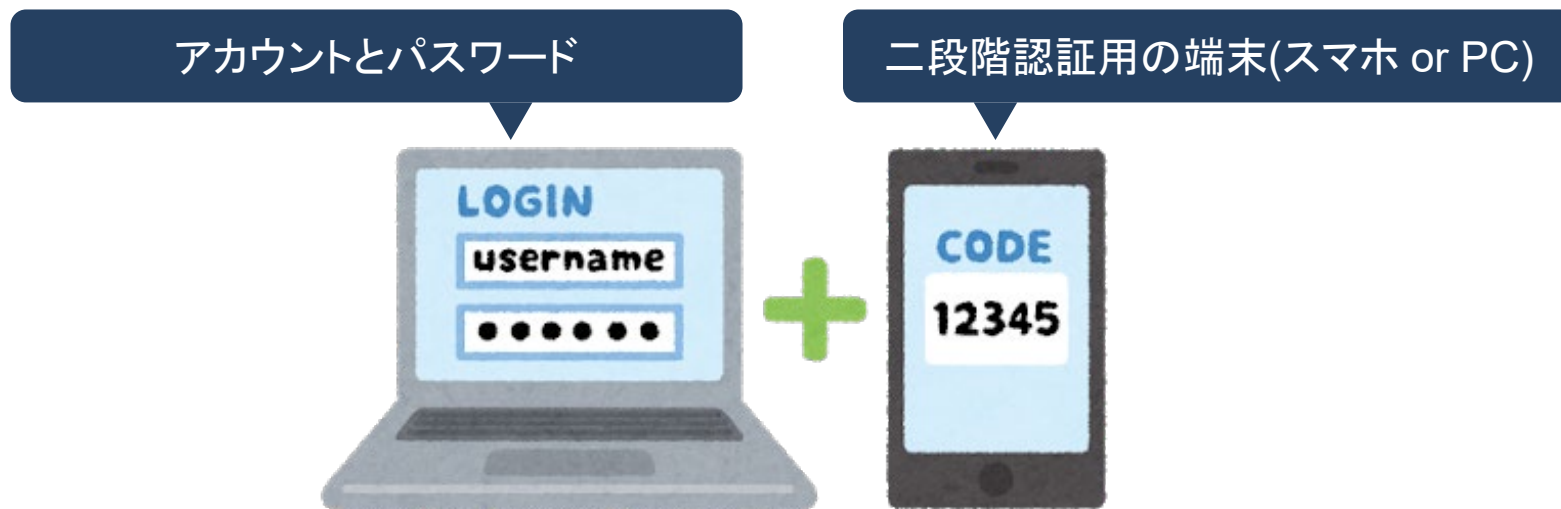


複数台あり、ログインユーザの
少ない端末に自動で振り分ける

接続コマンド例: `ssh アカウント名@squidhpc.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp`

SQUIDへのログイン

SQUIDは二段階認証でのログインとなります
OCTOPUSと異なり二段階認証用の端末が必要です



二段階認証用の端末

ご自身のスマートフォンやパソコンを
二段階認証用の端末としてお使いください

以下いずれかのアプリケーションをインストールしてください

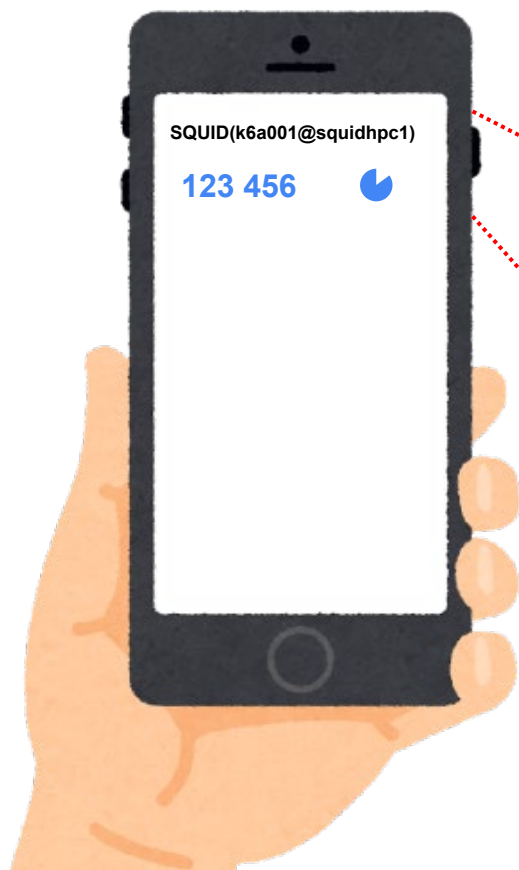
OS	アプリケーション	配布元
Android	Google Authenticator	Google Play Store
iOS	Microsoft Authenticator	Apple App Store
Windows	WinAuth	Github
macOS	Step Two	Apple App Store



SQUIDへのログイン

初回のみ

SQUIDに初めてログインするとQRコードが表示されます。
QRコードをアプリで読み込むことで2段階認証の登録が完了します



Initialize google-authenticator

Warning: pasting the following URL into your browser exposes the OTP secret to Google:

https://www.google.com/chart?chs=200*200&chld=M|0&cht=qf&otpauth://totp/user1@squidhpc.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp%3Fsecret%3DDXXXXXXXXXCLI%26issuer%3Dsquidhpc.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp



Your new secret key is: XXXXXXXXXXXX

Enter code from app (-1 to skip): -1
Code confirmation skipped
Your emergency scratch codes are:

「-1」を入力して
登録完了

本日のプログラム

I. システムのご紹介

II. 利用方法の解説

i. システムへの接続

ii. プログラムの作成・環境設定・コンパイル

iii. ジョブスクリプトの作成

iv. ジョブスクリプトの投入

III. 利用を希望する方へ

プログラムの作成

計算機を利用するために、まずプログラムを作成する必要があります

当センターの計算機で使用可能な主な言語

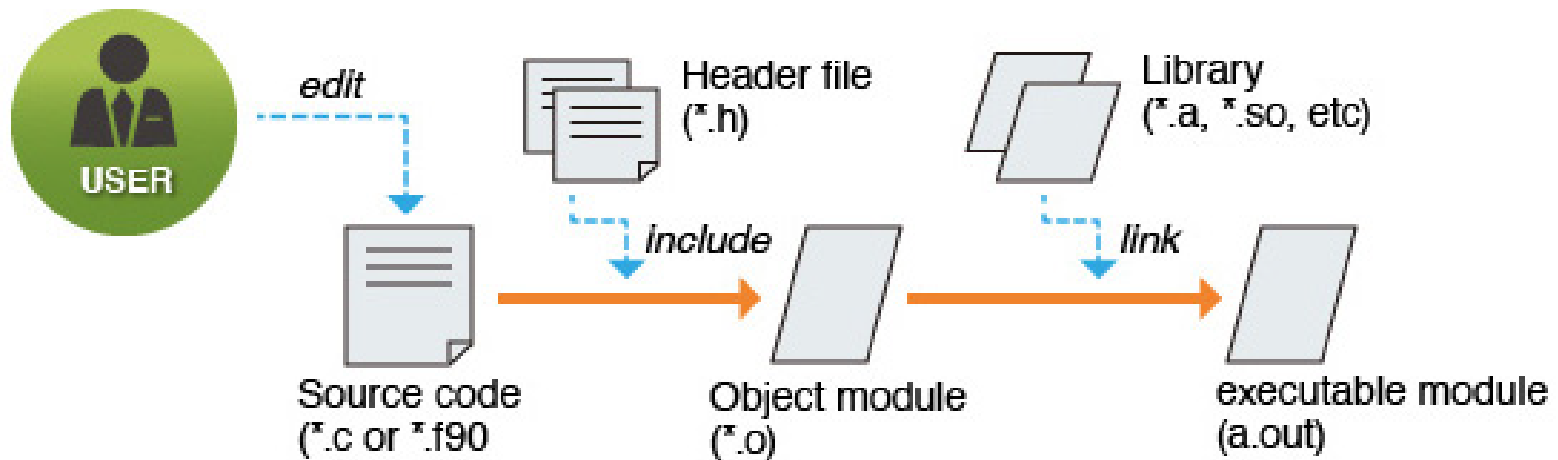
Fortran言語、C言語、C++言語

Python、R、Julia、etc...

「プログラムの書き方」については
説明しません

コンパイル

プログラムを「機械が実行できる形式」に変換すること



環境設定 (OCTOPUSでは不要)

利用するノード群に応じて環境設定が必要
モジュールを読み込むことで一括設定が可能

	汎用CPUノード	GPUノード	ベクトルノード
モジュール	BaseCPU/2021	BaseGPU/2021	BaseVEC/2021

コマンド例：汎用CPUノードを利用する場合

```
$ module load BaseCPU/2021
```

コンパイルの方法

コンパイルを行う際のコマンド(SQUID)

	Fortran言語	C言語	C++言語
Intelコンパイラ (汎用CPUノード向け)	ifort	icc	icpc
NVIDIA HPC SDK (GPUノード向け)	nvfortran	nvc	nvc++
NECコンパイラ (ベクトルノード向け)	nfort	ncc	nc++

コマンド例:汎用CPUノード用のFortranプログラム

```
$ ifort program.f
```

→実行形式ファイル「a.out」が生成

コンパイルオプション

コンパイル時にオプションを指定することで
様々な機能を使用することが可能

```
$ ifort program.f -option
```

オプションの一例

-o [filename] : 実行形式のファイル名を指定

指定しない場合は「a.out」が出力

-parallel : 並列化オプション

並列化処理を使用する場合に指定

-O... : 最適化オプション

最適化のレベル指定

デモ1(コンパイル)

1. プログラムの取得(コピー)

SQUIDの場合

```
$ cp /system/lecture/nyumon/sample.f ~/
```

OCTOPUSの場合

```
$ cp /octfs/apl/kosyu/nyumon/sample.f ~/
```

2. 汎用CPUノードの環境設定を読み込み ※OCTOPUSでは不要

```
$ module load BaseCPU/2021
```

3. sample.f を汎用CPUノード用にコンパイ

```
$ ifort sample.f
```

※文字入力時は [Tab]キーでの補完機能を活用してください

本日のプログラム

I. システムのご紹介

II. 利用方法の解説

i. システムへの接続

ii. プログラムの作成・環境設定・コンパイル

iii. ジョブスクリプトの作成

iv. ジョブスクリプトの投入

III. 利用を希望する方へ

計算機の利用方法

会話型（インタラクティブ利用）

コマンド等を通してコンピュータに直接命令し、リアルタイムで処理を実行

操作として手軽で直感的

一括処理型（バッチ利用）

コンピュータにまとめて処理を命令し実行

命令が終われば、放置（ログアウト）してもOK

会話型

原則として利用不可

スーパーコンピュータでは使えません。

ただし“会話型風”の機能(インタラクティブ利用)はあり

フロントエンド端末での計算実行も禁止

基本的に「一括処理型」で利用

一括処理型

処理を「ジョブスクリプト」に記述

ジョブスクリプトに基づき計算機が処理を実行

SQUIDでa.outという
プログラムを実行したい

ジョブスクリプトを作成

ユーザー

送信

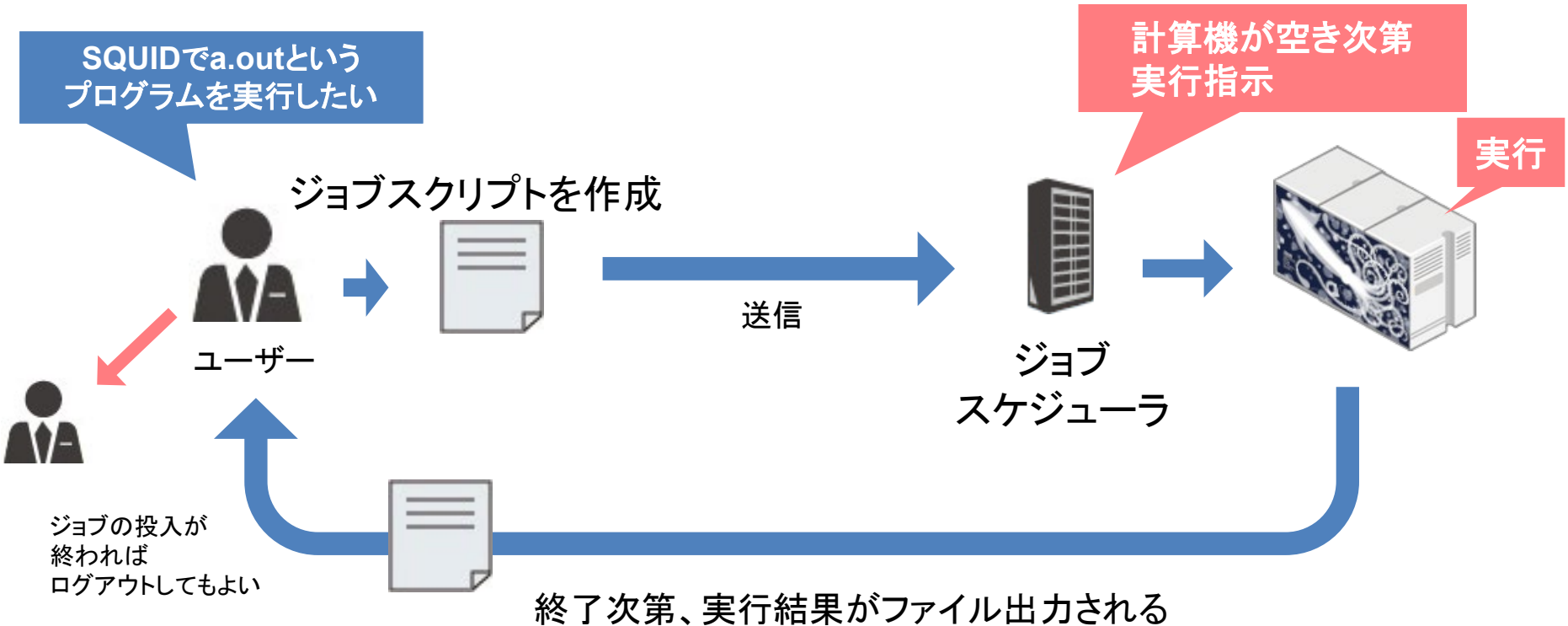
ジョブ
スケジューラ

計算機が空き次第
実行指示

実行

ジョブの投入が
終われば
ログアウトしてもよい

終了次第、実行結果がファイル出力される



ジョブスクリプト

ジョブスクリプトの構成

リソースや環境設定 : #PBSから始まるNQSオプション
計算機に実行させる処理の記述 : シェルスクリプト

ジョブスクリプトの例

```
#!/bin/bash
```

リソース、環境設定の指定

```
#PBS -q SQUID
```

```
#PBS -l elapstim_req=1:00:00
```

```
#PBS --group=G12345
```

```
module load BaseCPU/2021
```

```
cd $PBS_O_WORKDIR
```

```
./a.out
```

計算機に実行させる処理の記述

リソース、環境設定の指定

NQSIIオプション(以下)でリソースや環境の設定を行う

オプション	説明
#PBS -q	ジョブクラスを指定し、計算に使用する計算機やリソースを指定する
#PBS -l	使用する資源値
	elapstim_req : ジョブの経過時間
	memsz_job : 1ノードあたりのメモリ量
	cpunum_job : 1ノード当たりのコア数
	gpunum_job : 1ノード当たりのGPU数 ※GPUノードで必須
#PBS --venode	1ノードあたりのVE数 ※ベクトルノードで必須
#PBS --group	グループの指定 ※SQUIDで必須
#PBS -m	計算の処理状態に変化が起きたときメール通知を行う
	a : ジョブが異常終了したとき
	b : ジョブが開始したとき
	e : ジョブが終了したとき
#PBS -M	メールの通知先アドレスを指定する
#PBS -v	環境変数の指定(exportではなくこちらを使うことを推奨する)

必須！

ジョブクラス(OCTOPUS)

使用する計算機、リソースはジョブクラスで指定
NQSIIオプション「#PBS -q」の後に続けて記述

ジョブクラス	対象ノード	利用可能 経過時間	利用可能 コア数	利用可能 メモリ	同時利用 可能ノード数
OCTOPUS	汎用CPUノード GPUノード	120時間	3,072Core (24Core×128ノード)	24,320GB (190GB×128ノード)	128ノード
OCTPHI	Xeon Phiノード	120時間	2,048Core (64Core×32ノード)	6,080GB (190GB×32ノード)	32ノード
OCTMEM	大容量主記憶 搭載ノード	120時間	256Core (128Core×2ノード)	12TB (6TB×2ノード)	2ノード
DBG	汎用CPUノード GPUノード	10分	24Core (24Core×1ノード)	190GB (190GB×1ノード)	1ノード

ジョブクラス(SQUID)

使用する計算機、リソースはジョブクラスで指定
NQSIIオプション「#PBS -q」の後に続けて記述

ジョブクラス	利用可能 経過時間	利用可能 コア数	利用可能 メモリ	同時利用 可能ノード数	備考
SQUID	24時間	38,912Core (76Core×512ノード)	124TB (248GB×512ノード)	512ノード	
SQUID-H	24時間	38,912Core (76Core×512ノード)	124TB (248GB×512ノード)	512ノード	高優先度
SQUID-S	24時間	38Core (76Core×0.5ノード)	124GB (248GB×0.5ノード)	1ノード	ノード共有
DBG	10分	152Core (76Core×2ノード)	496GB (248GB×2ノード)	2ノード	

計算機に実行させる処理の記述

ファイルやディレクトリの実行・操作を記述
記述方法はシェルスクリプト

よく使用するNQS 用の環境変数

\$PBS_O_WORKDIR : ジョブ投入時のディレクトリが設定される

処理の記述の最終行に改行を入れること！

⇒ 未入力の場合、その行のコマンドが実行されない

ジョブスクリプト例 (SQUID)

```
#!/bin/bash
```

```
#PBS -q SQUID
```

```
#PBS -l elapstim_req=1:00:00
```

```
#PBS --group=G12345
```

```
module load BaseCPU/2021
```

```
cd $PBS_O_WORKDIR
```

```
./a.out > result.txt
```

ジョブクラスはSQUID

ノードを1時間確保

グループ名はG12345

汎用CPUノードの環境設定を読み込み

ジョブ投入時のディレクトリへ移動

a.outを実行し、結果をresult.txtに出力する
(リダイレクション)

デモ2(ジョブスクリプト)

1. 演習用スクリプトをコピー

SQUIDの場合

```
$ cp /system/lecture/nyumon/jobscript.sh ~/
```

OCTOPUSの場合

```
$ cp /octfs/apl/kosyu/nyumon/jobscript.sh ~/
```

2. jobscript.shを元に汎用CPUノード用の ジョブスクリプトを作成

(参考)emacsの操作方法:

保存 ctrl-x → ctrl-s

終了 ctrl-x → ctrl-c

```
$ emacs jobscript.sh -nw
```

※グループ名は kosyuXXX です。(XXXは利用者番号の下3桁)

利用者番号:k6a001 ⇨ グループ名:kosyu001

【参考】自身のグループ名は id コマンドでも確認できます

uid=1805(k6a001) gid=22000(ocean) groups=22000(ocean),14465(kosyu001) グループ名

本日のプログラム

I. システムのご紹介

II. 利用方法の解説

i. システムへの接続

ii. プログラムの作成・環境設定・コンパイル

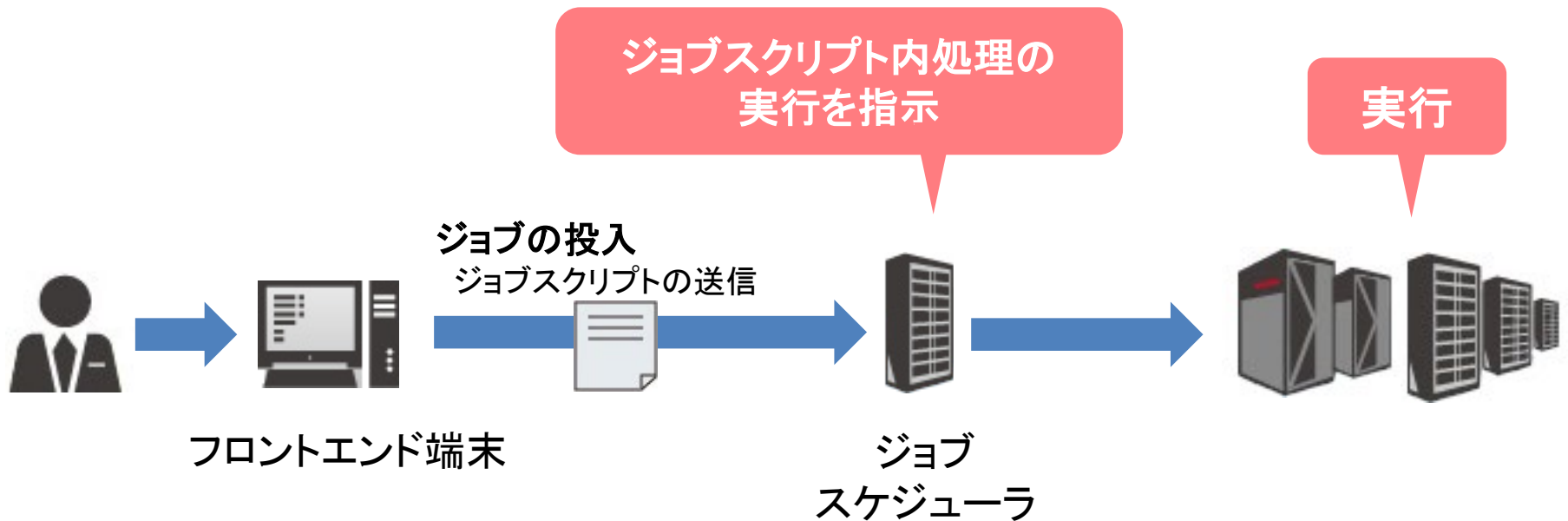
iii. ジョブスクリプトの作成

iv. ジョブスクリプトの投入

III. 利用を希望する方へ

実行までの流れ

ジョブスクリプトは**ジョブスケジューラ**が受け付ける
ジョブスケジューラが各計算機にジョブの実行を指示



スケジューラとは

あらかじめ管理者によって設定された資源割当ポリシーに従い、ジョブを計算資源に割り当てる



主な役割

クラスタを構成する計算機(ノード)の静的情報※を把握

※ディスク容量、メモリ容量、CPU性能、etc

ノード毎の資源使用率を定期的に監視、管理

ユーザより実行したいジョブ要求を受信

ジョブを実行するのに適切なノードを選定

ジョブ実行に伴う入出力データのファイル転送

スケジューラとは

当センターではバックフィル型を採用

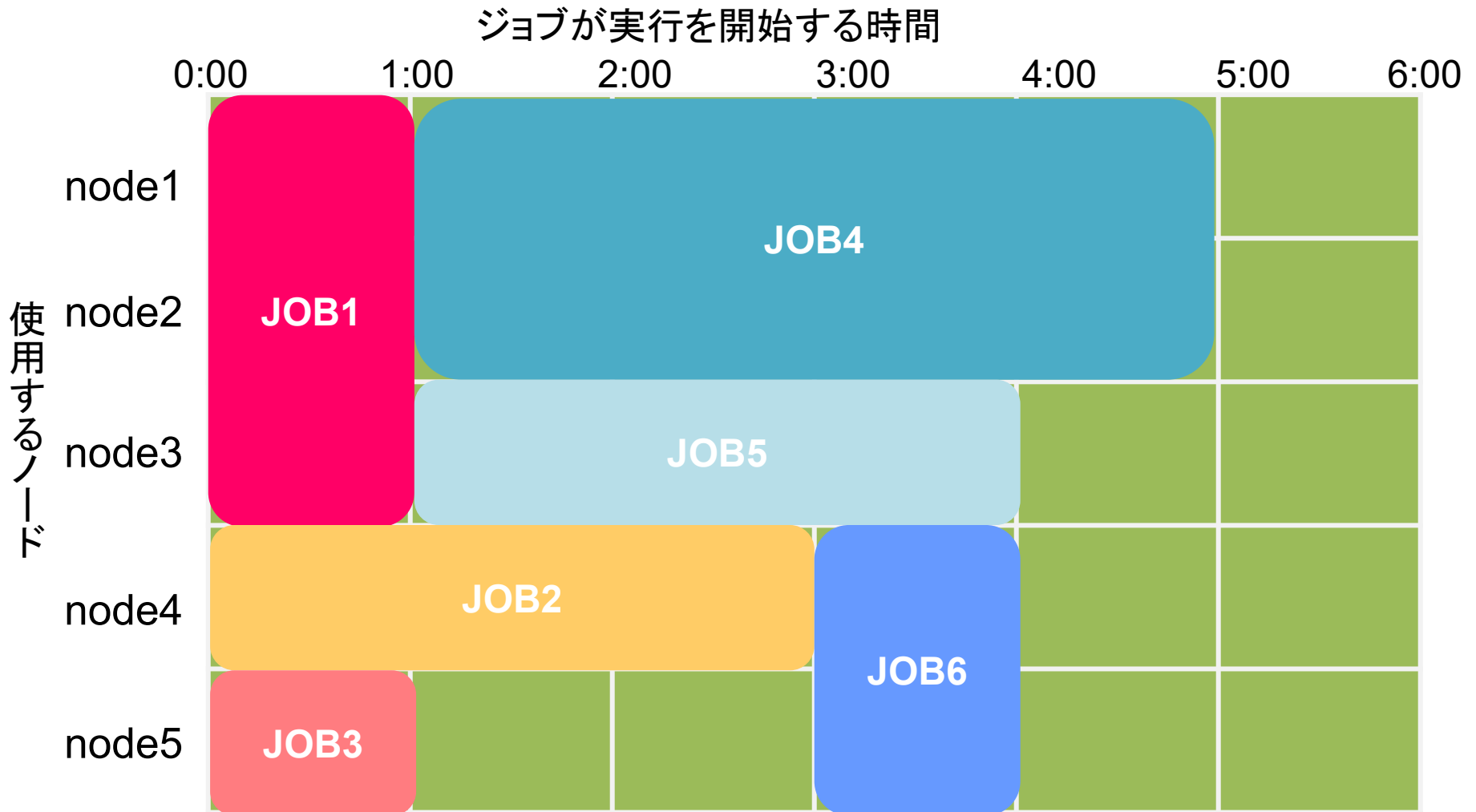
特徴

ジョブの実行開始時間のマップを作成する

マップに載れば、実行開始時間と経過時間が保障される

実行中は指定したリソースを占有して割当てる

スケジューラのイメージ



ジョブの投入方法

フロントエンド端末からジョブを投入

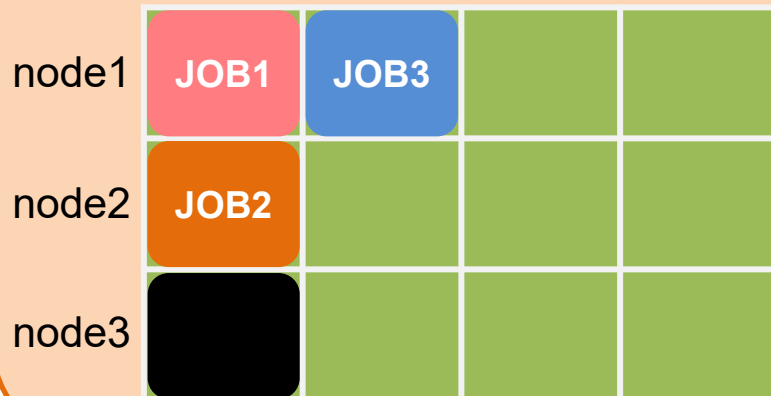
コマンド

\$ **qsub [ジョブスクリプトファイル]**

(参考)複数ジョブを投入する場合

順不同でスケジューリング

```
$ qsub [JobScript1]  
$ qsub [JobScript2]...
```



順番通りにスケジューリング

```
$ qsub [JobScript1] [JobScript2]...
```



投入済みジョブの確認方法

ジョブの状態を確認することが可能

コマンド

\$ **qstat**

実行結果

RequestID	ReqName	UserName	Queue	STT	Memory	CPU	Elapse
1234.sqd	job-test	K6a001	SC1	RUN	8.72G	830.66	208

ジョブの状態

待ち状態では「QUE」 実行が始まると「RUN」となる。

実行時間

CPU : 実際にジョブが消費した時間
複数CPU指定の場合は、全CPUを累積表示

Elapse : ジョブが実行されてからの経過時間

投入済みジョブの確認方法

ジョブの予約状況の確認することが可能

コマンド

\$ **sstat**

実行結果

RequestID	ReqName	UserName	Queue	Pri	STT	PlannedStartTime
1234.sqd	job-test	k6a001	SQUID	-1.5684/ -1.5684	ASG	2021-05-21 14:52:50

状態監視

実行時刻が決まると「ASG」表示になる。

混雑具合や優先度により、「実行時間の決定」までの待ち時間が異なるが、一旦実行時間が決定されるとその時刻にジョブ実行が始まる。

実行開始時刻

システムメンテナンスやトラブル時は再スケジュールされることをご了承ください。

投入済みジョブの操作方法

ジョブのキャンセル

コマンド

```
$ qdel [RequestID]
```

実行結果

```
$ qdel 1234.sqd
```

```
Request 1234.sqd was deleted.
```

実行結果の確認方法

実行結果や実行エラーは指定しない限り「標準出力」となる

標準出力はジョブスクリプト名.oリクエストID

標準エラー出力はジョブスクリプト名.eリクエストID

というファイル名で自動出力される

catやlessコマンドでファイルの内容を出力し確認

```
$ cat jobscript.sh.o1234
```

※リダイレクション(./a.out > result.txt)を使った場合は、そちらも確認

標準出力／標準エラー出力の容量制限

⇒ 100MB以上出力したい場合はリダイレクション(>)

デモ3(ジョブスクリプトの投入)

1. 作成したジョブスクリプトを使用してジョブを投入

\$ qsub jobscript.sh

2. 投入したジョブの状態を確認

\$ sstat

\$ qstat

3. 結果ファイルの確認

\$ cat jobscript.sh.oXXXXXX

\$ cat jobscript.sh.eXXXXXX

※リダイレクション(./a.out > result.txt)を使った場合は、そちらも確認

より高度な利用に向けて

本日以降に実施予定の講習会(全てオンライン)

日時	講習会名	概要
12月3日(金) 13:30 - 16:30	スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用	スケジューラの使い方
12月8日(水) 13:00 - 17:00	GPUプログラミング入門 (OpenACC)	GPUを用いた計算の概要説明と OpenACCによるGPUプログラミングの基礎
12月9日(木) 13:30 - 16:30	SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎	SQUIDベクトルノードで動作するプログラムの 性能測定や基礎的なチューニング手法
12月10日(金) 10:00 - 16:00	並列プログラミング入門 (OpenMP/MPI)	OpenMP、MPI、コンパイラの自動並列化機能 による並列プログラミングの基礎と利用方法
12月20日(月) 13:30 - 14:30	GPUプログラミング実践 (OpenACC)	OpenACCによるGPUプログラミングの 最適化手法、複数GPUでの並列実行方法

本日のプログラム

I. システムのご紹介

II. 利用方法の解説

i. システムへの接続

ii. プログラムの作成・コンパイル

iii. ジョブスクリプトの作成

iv. ジョブスクリプトの投入

III. 利用を希望する方へ

利用を希望する方へ

本センターの大規模計算機システムは
どなたでも**利用可能**です！

大学院生

教員

研究者

大阪大学

他大学

民間企業

利用負担金が必要になります

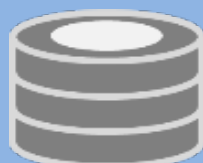
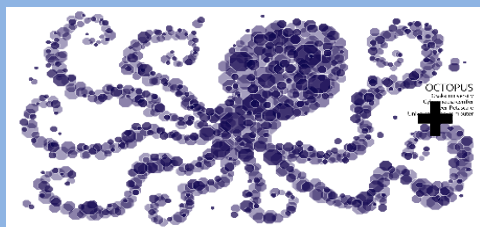
利用負担金制度

一般利用(学術利用)

産業利用
成果公開

産業利用
成果非公開

OCTOPUS



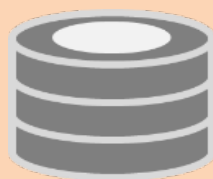
HDDストレージ
初期容量3TB
2,000円/TB で追加可能

ONION



オブジェクトストレージ
12,000円/TB

SQUID



HDDストレージ
初期容量5TB
2,000円/TB で追加可能



SSDストレージ
初期容量なし
5,000円/TB で追加可能

金額
× 5

10万円～

詳細は <http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/cost/>

利用負担金制度

利用形態は前払い式

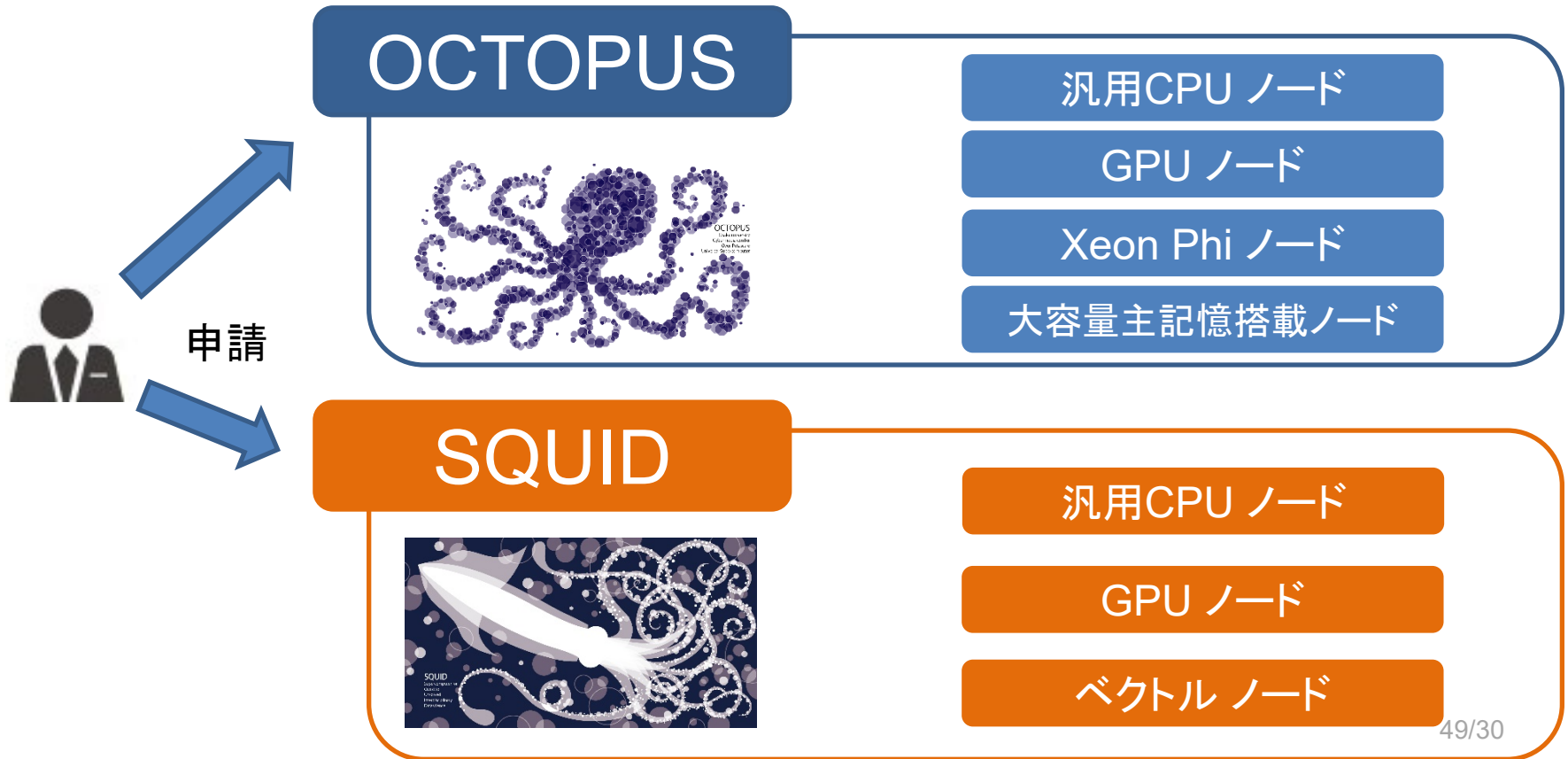
コースに応じて以下のポイントが割り当てられます。

基本負担額	ポイント
10万円	1,000 ポイント
50万円	5,250 ポイント
100万円	11,000 ポイント
300万円	34,500 ポイント
500万円	60,000 ポイント

※成果非公開型の場合は金額が5倍になります

「OCTOPUSポイント」 「SQUIDポイント」

OCTOPUS、SQUIDへの申請で全てのノードを自由に使用可能とすることを目的に導入された制度です。



「ポイント制度」とは

ポイントの消費量は
以下の計算式から算出されます

$$\text{使用したノード時間} \times \text{消費係数} \times \text{季節係数}$$

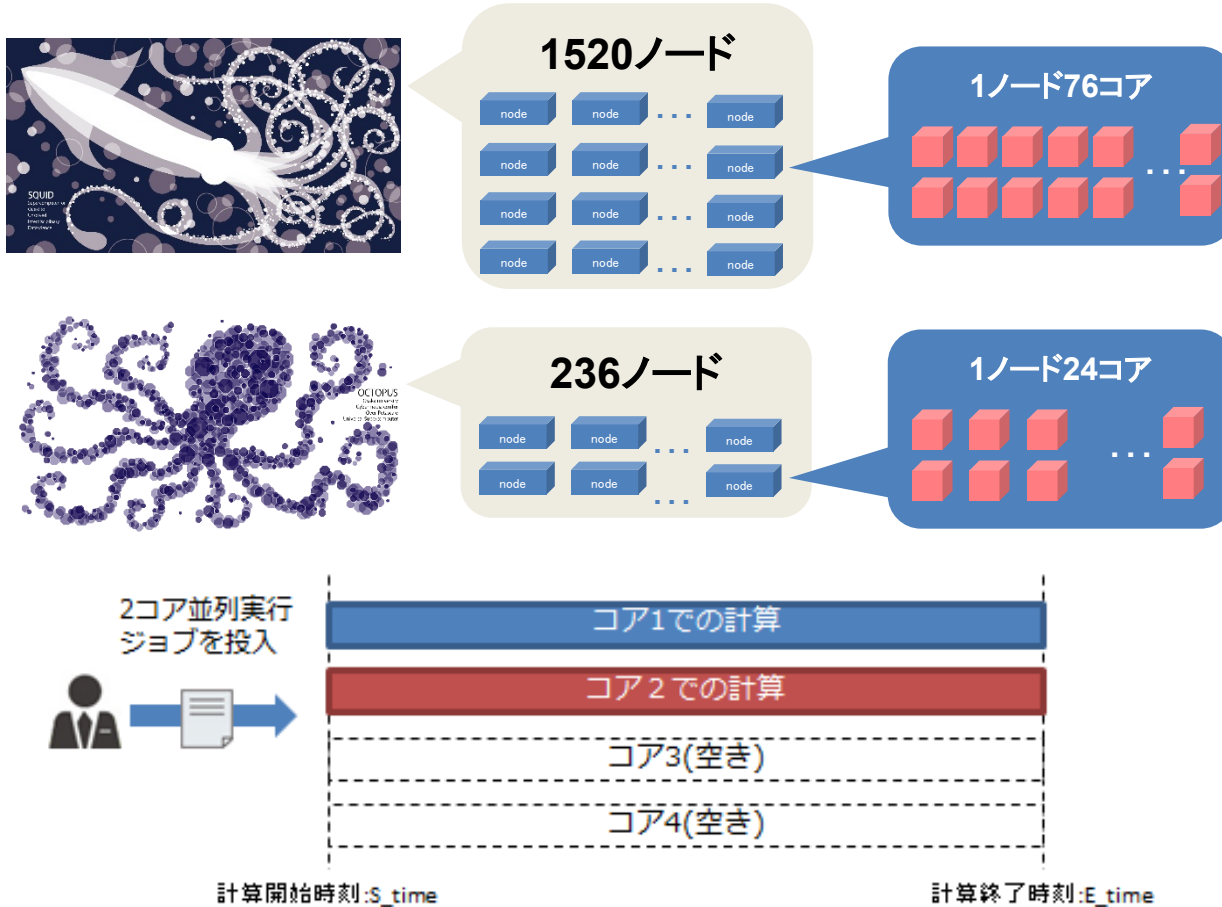
「ノード時間」とは

$$\text{ノード時間} = \text{計算に使用するノード数} \times \text{計算時間(単位:時間)}$$

(例)

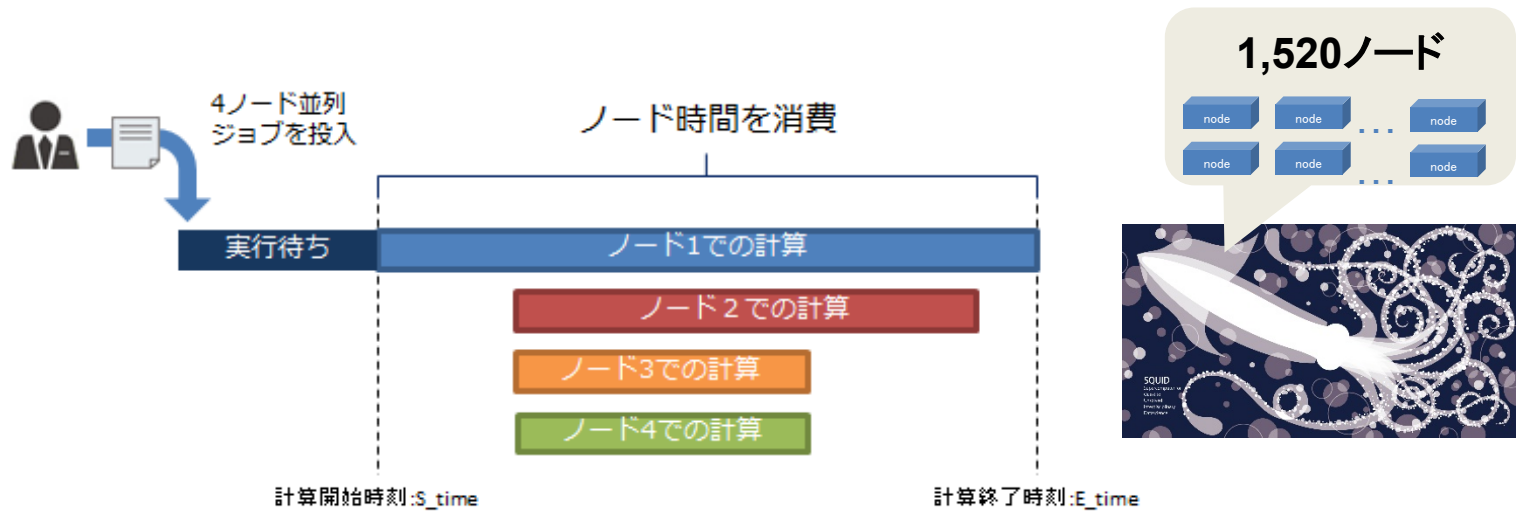
1ノードで3時間の計算	→	3ノード時間消費
30ノードで5時間の計算	→	150ノード時間消費
100ノードで1時間の計算	→	100ノード時間消費
1ノードで100時間の計算	→	100ノード時間消費

「ノード時間」の補足



ノード内で使用するコアを限定しても、ノード時間は変わりません

「ノード時間」の補足



ノード時間は4ノード × (計算終了時間 - 計算開始時間)です

「ノード時間」の補足

```
#!/bin/bash  
#PBS -q SQUID  
#PBS -l elapstim_req=2:00:00
```

計算機を2時間確保



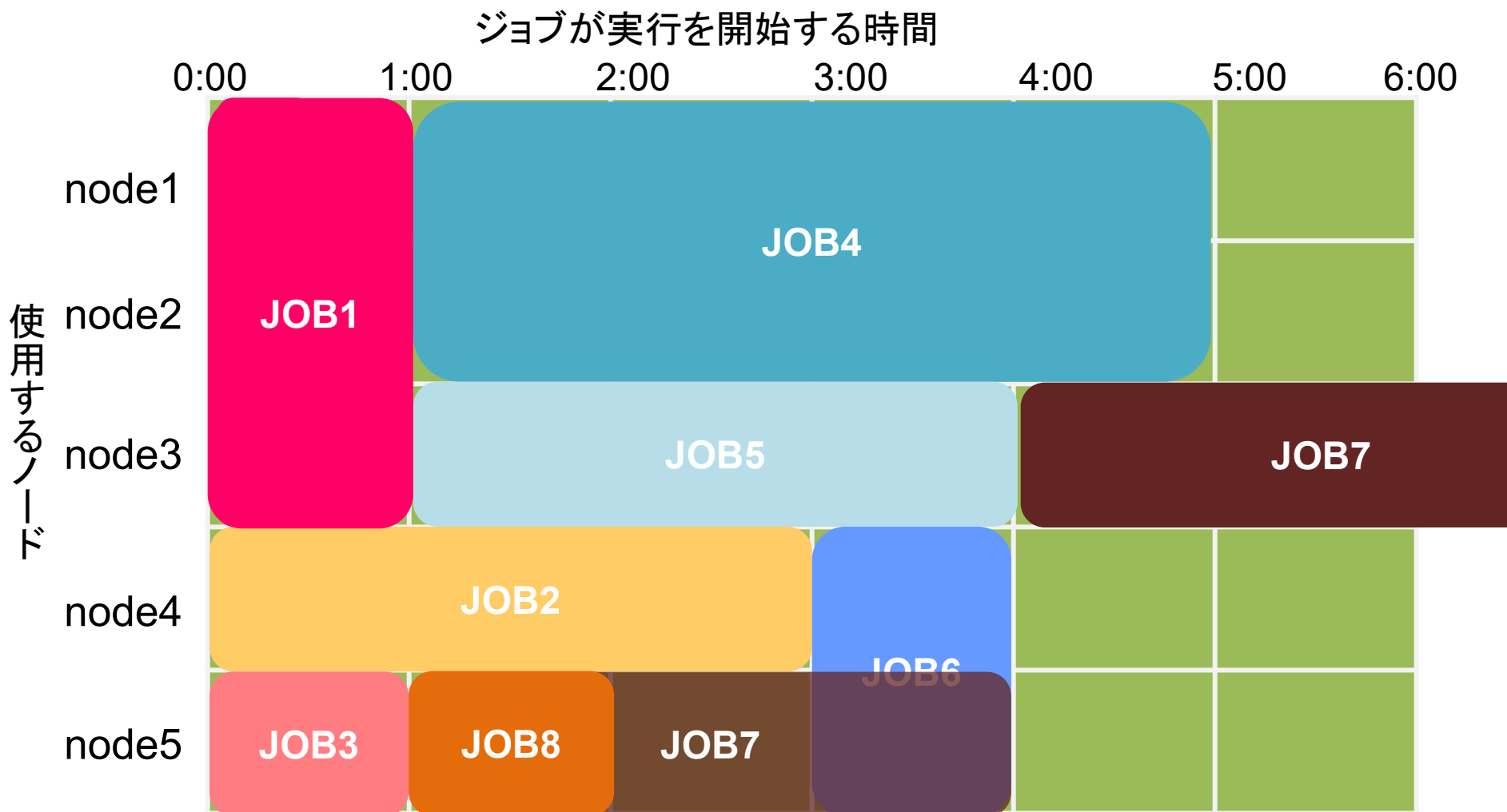
実行待ち

計算時間

実際には1時間で終了 ⇒ 消費は1時間

消費するノード時間は、実際にかかった計算時間のみです

スケジューラのイメージ



「消費係数」について

使用したノード時間 × 消費係数 × 季節係数

消費係数

各ノード群の消費電力を元に設定

ノード群	消費係数
汎用CPUノード	0.0520
GPUノード	0.2173
Xeon Phiノード	0.0418
大容量主記憶搭載ノード	0.3703

同じノード時間を使用しても、
OCTOPUSポイントの消費量は異なる



「季節係数」について

使用したノード時間 × 消費係数 × 季節係数

季節係数

前年度の利用率を元に
0を超える1 以下の値を設定

ノード群	4～ 6月	7～ 9月	10～ 12月	1～ 3月
CPUノード	0.9	1	1	1
GPUノード	0.9	1	1	1
Xeon Phiノード	0.7	1	1	1
大容量主記憶 搭載ノード	0.6	1	1	1

(例)

2020年度4月～6月の利用率が低かった



2021年度4月～6月の季節係数を低く設定

OCTOPUSポイントの例

消費OCTOPUSポイント =
使用ノード時間 × 消費係数 × 季節係数

消費係数

ノード群	消費係数
汎用CPUノード	0.0520
GPUノード	0.2173
Xeon Phiノード	0.0418
大容量主記憶 搭載ノード	0.3703

季節係数(2021年度)

ノード群	4～ 6月	7～ 9月	10～ 12月	1～ 3月
汎用CPUノード	0.9	1	1	1
GPUノード	0.9	1	1	1
Xeon Phiノード	0.7	1	1	1
大容量主記憶 搭載ノード	0.6	1	1	1

- ・汎用CPUノードを10ノード並列実行で3時間使用(季節係数:1)

$$10 \times 3 \times 0.0520 \times 1 = 1.560 \rightarrow \mathbf{1.560 \text{ ポイント消費}}$$

OCTOPUSポイントの目安

10万円コースで利用できるノード時間の目安

OCTOPUS	ノード群	消費係数	ノード時間
10万円コース 1,000ポイント	汎用CPUノード	0.0520	19,230 ノード時間
	GPUノード	0.2173	4,601 ノード時間
	XeonPhiノード	0.0418	23,923 ノード時間
	大容量主記憶搭載ノード	0.3703	2,700 ノード時間

※季節係数が 1 の場合

SQUIDポイントの目安

10万円コースで利用できるノード時間の目安

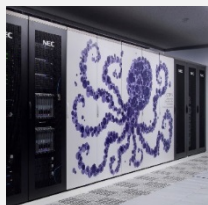
SQUID	ノード群	消費係数	ノード時間
10万円コース 1,000ポイント	汎用CPUノード	0.1499	6,671 ノード時間
	GPUノード	0.9174	1,090 ノード時間
	ベクトルノード	0.5656	1,768 ノード時間

※季節係数が 1 の場合

まずは試用制度をお試ください

3カ月間 以下の資源をご提供

無料



OCTOPUS

共有利用

26 OCTOPUSポイント
+ ディスク 3TB

500 ノード時間

汎用
CPU
ノード

622 ノード時間

Xeon
Phi
ノード

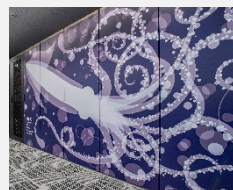
119 ノード時間

GPU
ノード

70 ノード時間

大容量
主記憶
搭載
ノード

※季節係数が1の場合



SQUID

共有利用

75 SQUIDポイント
+ ディスク 5TB

500 ノード時間

汎用
CPU
ノード

81 ノード時間

GPU
ノード

132 ノード時間

ベクトル
ノード

利用申請方法

申請は年度単位(4月から翌年3月まで)です
申請はWEBフォームから受け付けています

詳細は下記のページをご覧ください！

一般利用(学術利用) <http://osku.jp/u094>

試用制度による利用 <http://osku.jp/e029>

スパコン利用に向けて

利用の参考になるWebページ

サイバーメディアセンター 大規模計算機システム Webページ
<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp>

利用方法

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/>

FAQ

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/faq/>

問い合わせフォーム

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/support/contact/auto_form/

研究成果

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/researchlist/>

大規模計算機システムに関するご質問は

大阪大学 情報推進部 情報基盤課
研究系システム班

system@cmc.osaka-u.ac.jp

までお気軽にご連絡ください！