スパコンの利用方法

大阪大学 情報推進部 情報基盤課

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

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:24 VE:80
演算性能	5.837 PFLOPS	161.837 PFLOPS	24.56 PFLOPS
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　16.591PFLOPS

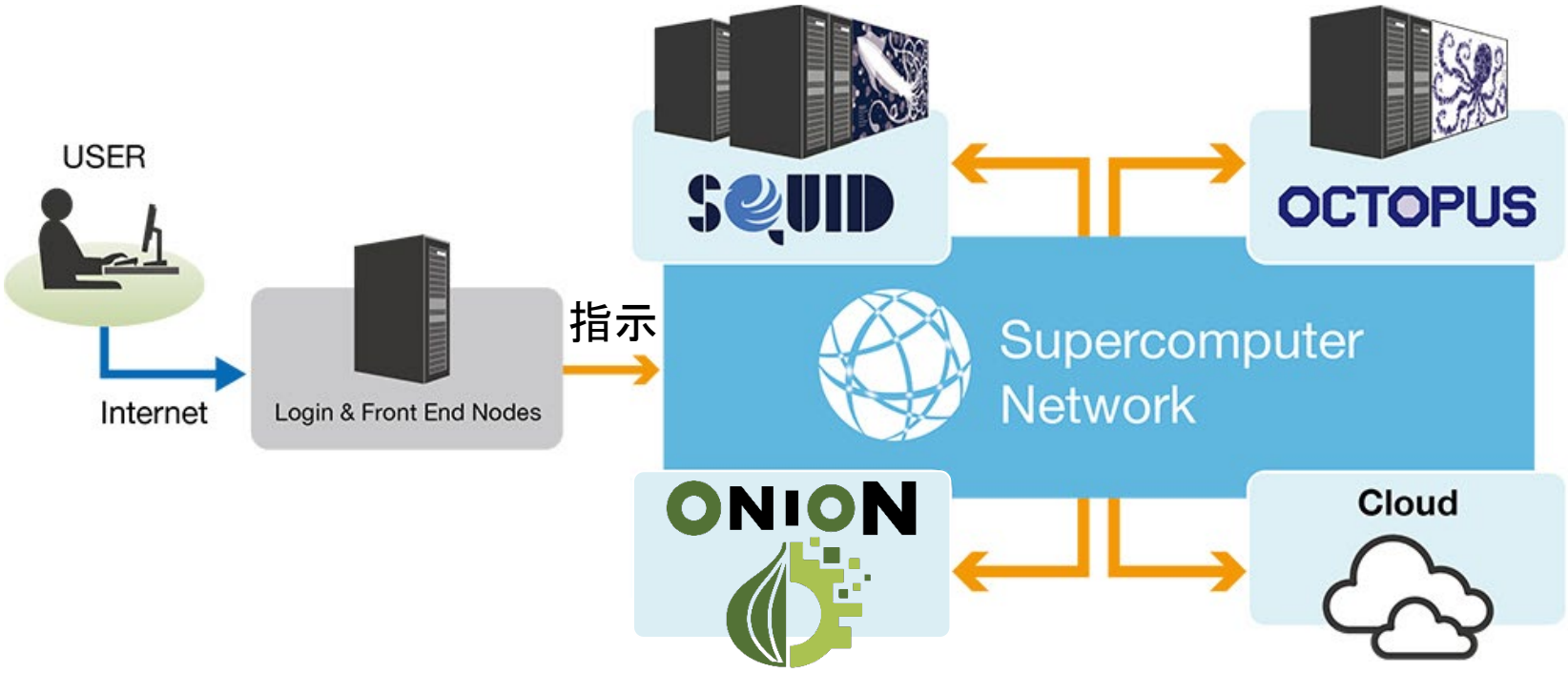
フロントエンドサーバ

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

システムへの接続

フロントエンド端末

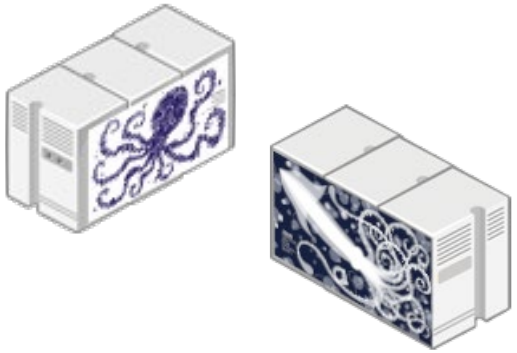
環境設定

プログラム作成

コンパイル

ジョブスクリプト
作成

計算機



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

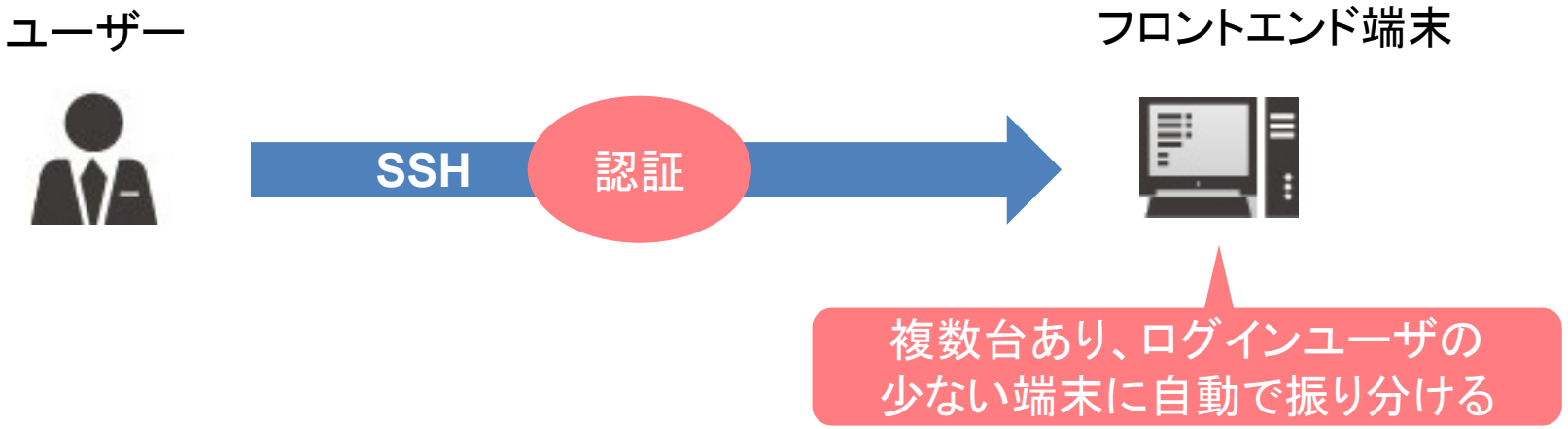
システムへの接続

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**



SQUIDのみ

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

SQUIDのみ

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

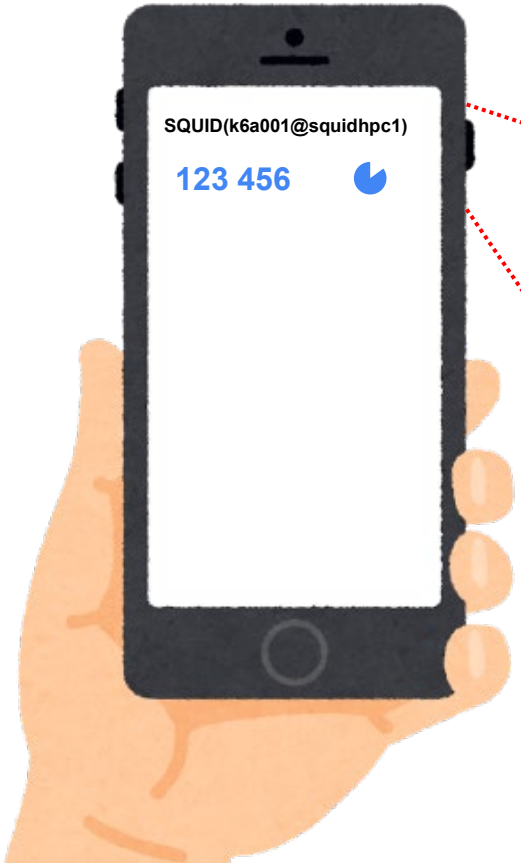
OS	アプリケーション	配布元
Android	Google Authenticator Microsoft Authenticator	Google Play Store
iOS		Apple App Store
Windows	WinAuth	Github
macOS	Step Two	Apple App Store

SQUIDのみ

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



Initiallize google-authenticator

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

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

QR
コード

Your new secret key is: XXXXXXXXXXX

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

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

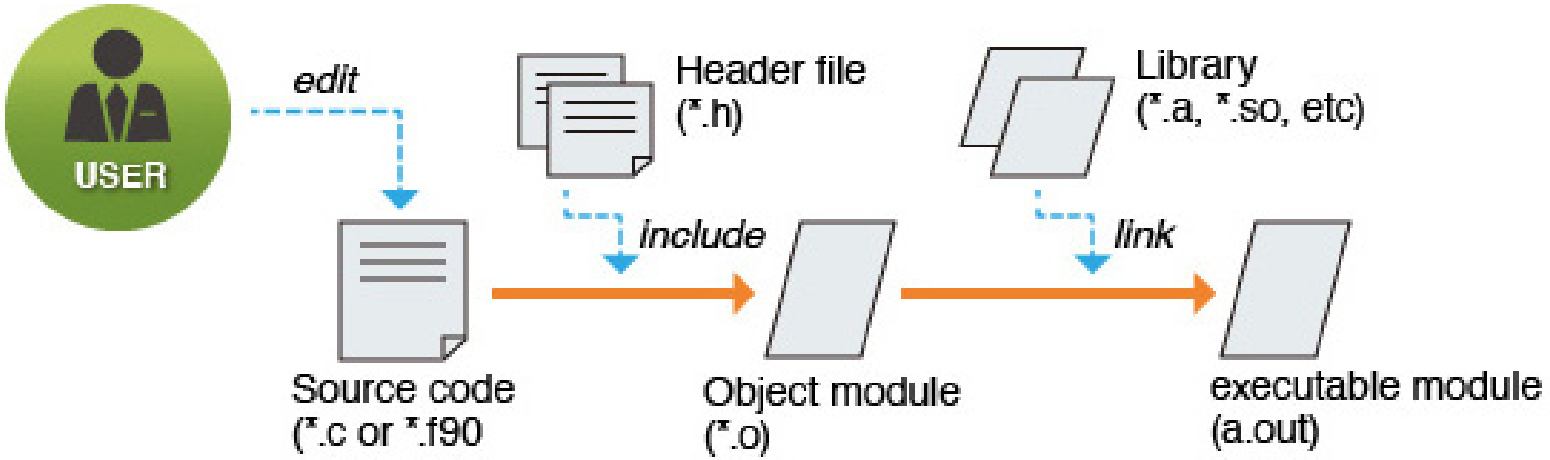
当センターの計算機で使用可能な主な言語

- **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



SQUIDのみ

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/2023	BaseGPU/2023	BaseVEC/2023

コマンド例：汎用CPUノードを利用する場合

```
$ module load BaseCPU/2023
```

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

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

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

現在稼働中の計算機では利用不可

ただし“会話型風”の機能（インタラクティブ利用）はあり

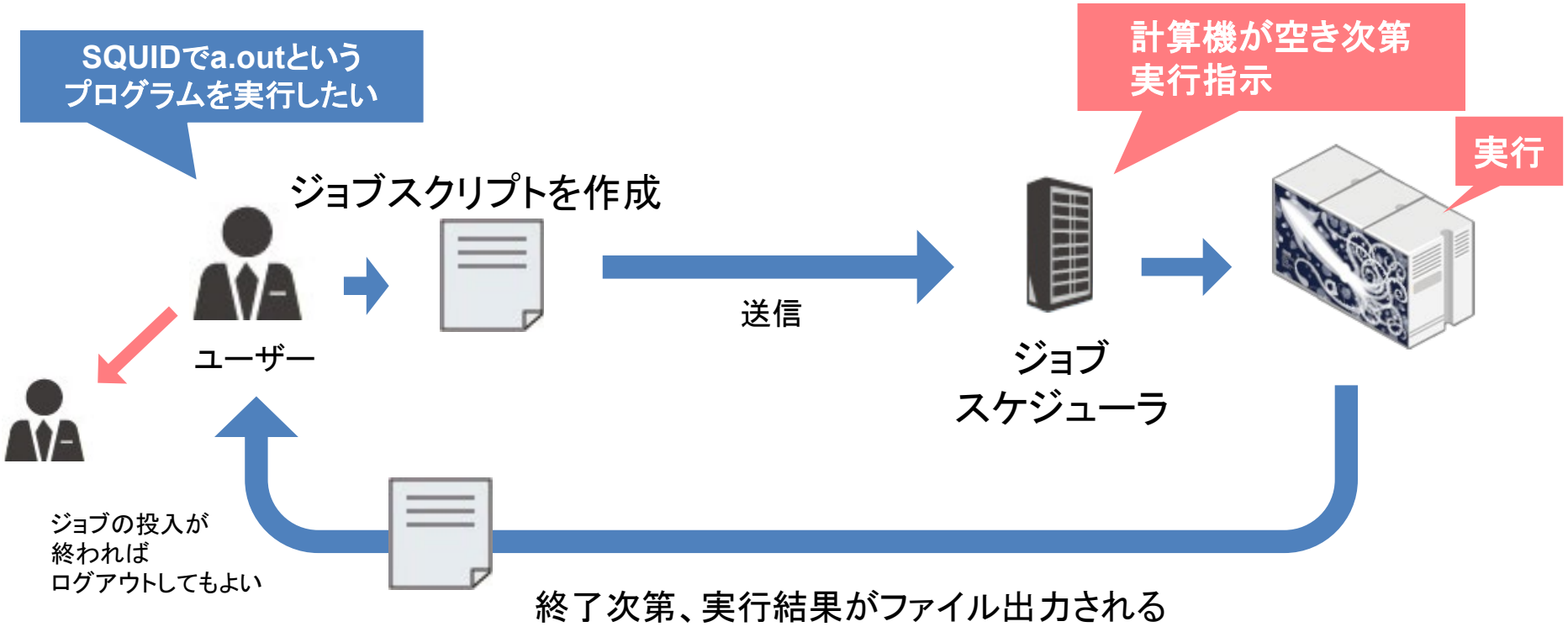
フロントエンド端末での計算実行も禁止

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



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

#PBS -q SQUID
#PBS -l elapstim_req=1:00:00
#PBS --group=G12345

module load BaseCPU/2023
cd $PBS_O_WORKDIR
./a.out
```

リソース、環境設定の指定

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

NQS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
#PBS --venode	1ノードあたりのVE数
#PBS --group	グループの指定
#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！

場合により必須

ジョブクラス一覧(OCTOPUS)

使用する計算機、リソースはジョブクラスで指定
NQS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)	23,680GB (185GB×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 (185GB×32ノード)	32ノード
DBG	汎用CPUノード GPUノード	10分	24Core (24Core×1ノード)	185GB (185GB×1ノード)	1ノード

ジョブクラス一覧(SQUID)

使用する計算機、リソースはジョブクラスで指定
NQS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	120時間	38,912Core (76Core×512ノード)	124TB (248GB×512ノード)	512ノード	
SQUID-H	120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	120時間	38Core (76Core×0.5ノード)	124GB (248GB×0.5ノード)	0.5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

ジョブスクリプト解説

```
#!/bin/bash
#PBS -q SQUID
#PBS -l elapstim_req=1:00:00
#PBS --group=G12345
module load BaseCPU/2023
cd $PBS_O_WORKDIR
./a.out > result.txt
```

ジョブクラスの指定

ノードを1時間確保

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）

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

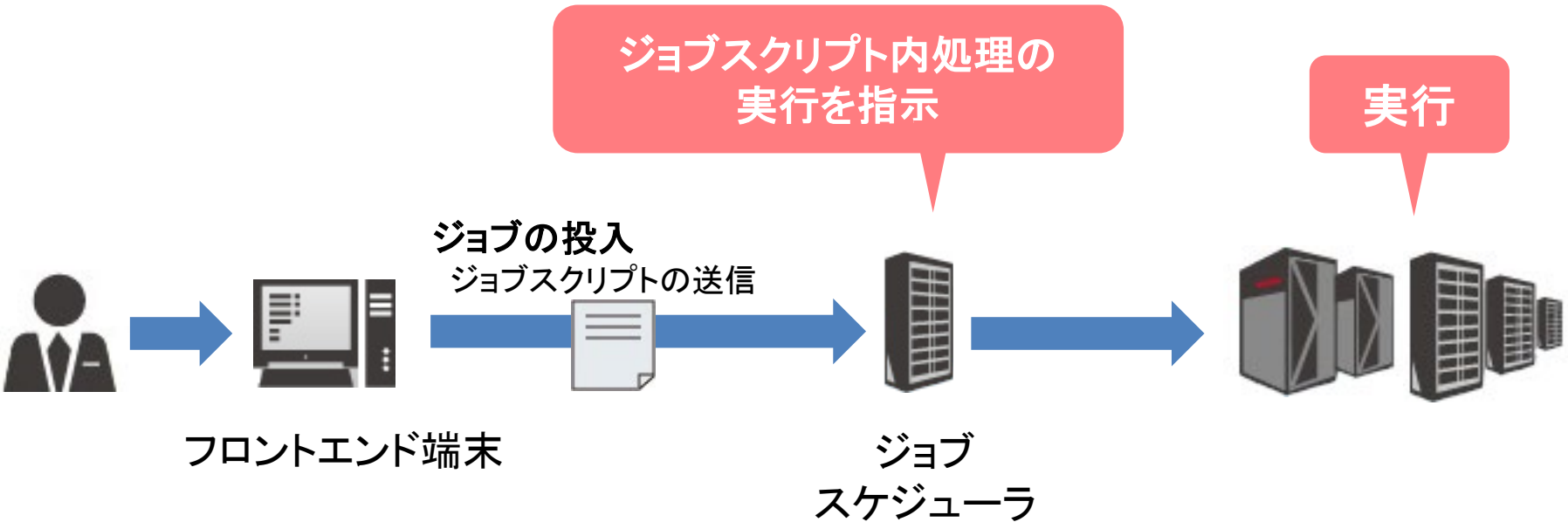
ii. プログラムの作成・環境設定・コンパイル

iii. ジョブスクリプトの作成

iv. ジョブスクリプトの投入

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

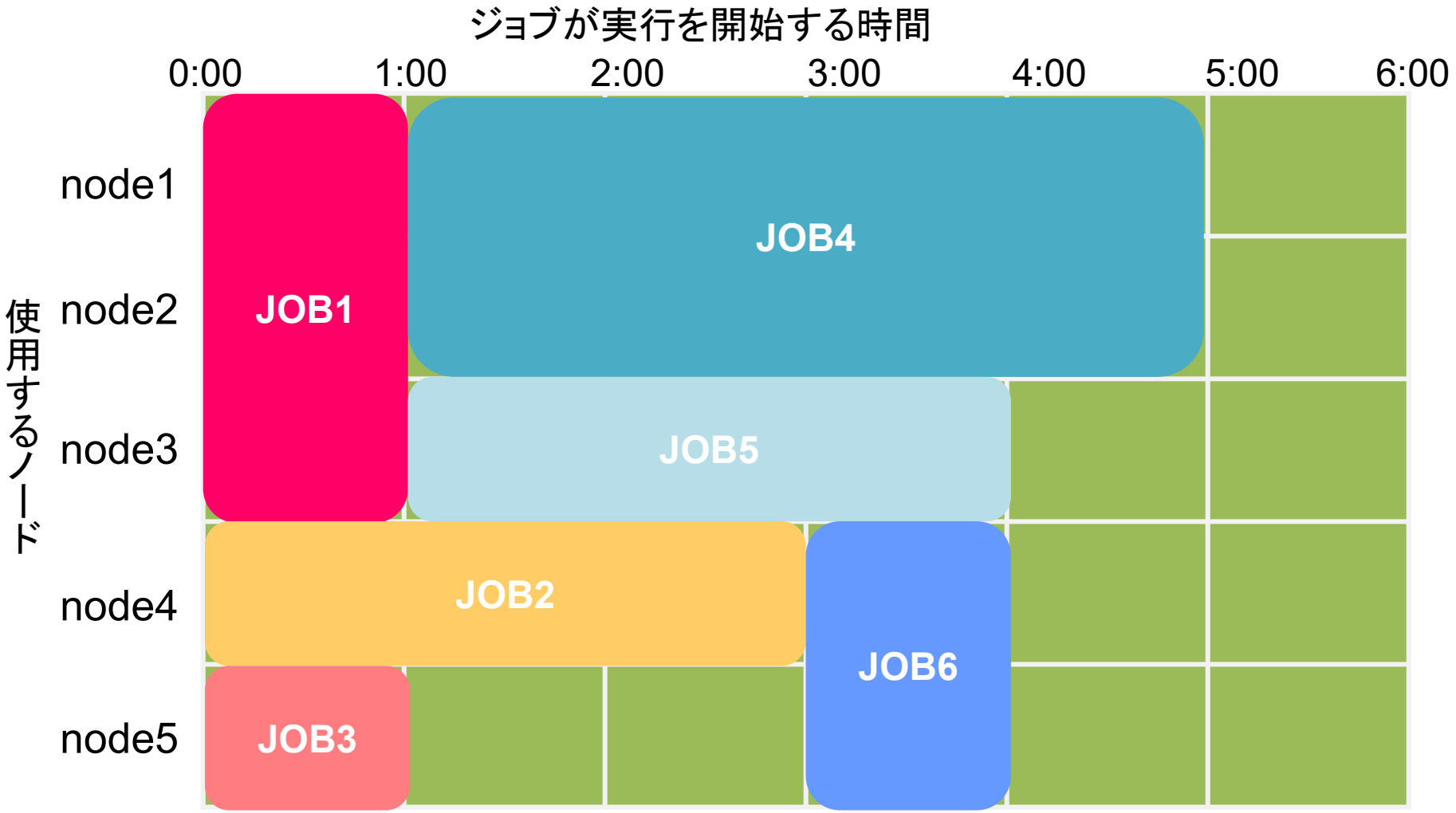
特徴

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り当てる

スケジューラのイメージ



「ノード時間」とは

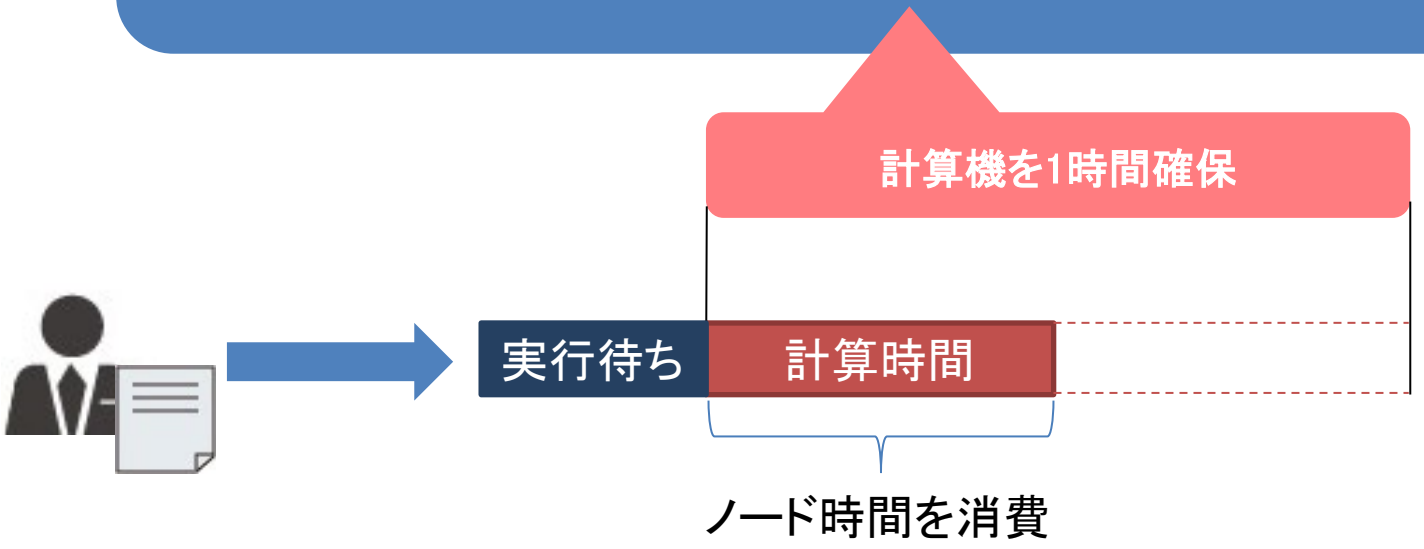
ノード時間 ＝
　計算に使用するノード数 × 計算時間(単位:時間)

（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」の注意点

```
#!/bin/bash
#PBS -q SQUID
#PBS –l elapstim_req=1:00:00
```



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

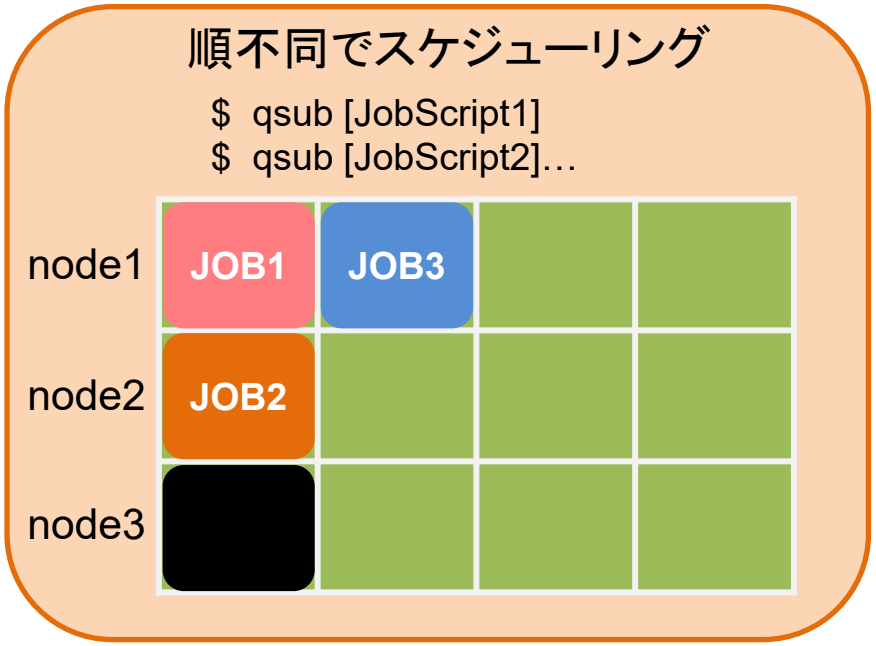
ジョブの投入方法

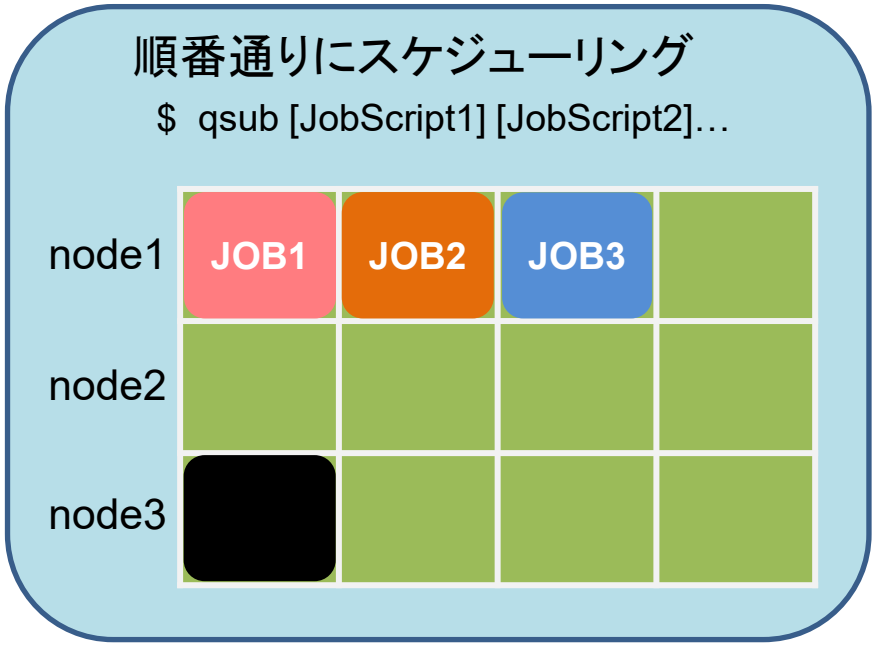
フロントエンド端末からジョブを投入

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





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	2023-06-09 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 nqs.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(>)

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/

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

まずは試用制度をお試しください

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

250 ノード時間
311 ノード時間
60 ノード時間
35 ノード時間

- 汎用CPUノード
- Xeon Phiノード
- GPUノード
- 大容量主記憶搭載ノード

SQUID　共有利用

75 SQUIDポイント
＋ ディスク 5TB

250 ノード時間
41 ノード時間
66 ノード時間

- 汎用CPUノード
- GPUノード
- ベクトルノード

※季節係数、燃料係数が1の場合

利用を希望する方へ

本日以降の講習会（全てオンライン）

講習会名	概要
スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用 【6月14日(水)】	計算機利用（バッチ利用）の概要
ONION活用講習会 【6月16日(金)】	データ集約基盤 ONION(Osaka university Next-generation Infrastructure for Open research and open InnovatioN) の機能説明
SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎 【6月20日(火)】	性能測定や基礎的なチューニング手法の説明
汎用CPUノード 高速化技法の基礎 （Intelコンパイラ） 【6月22日(木)】	Intelコンパイラの概要とチューニング手法
並列プログラミング入門(OpenMP/MPI) 【6月23日(金)】	並列プログラミングの基礎と利用方法
GPUプログラミング入門（OpenACC） 【6月27日(火)】	OpenACCによるGPUプログラミング手法の基礎

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

または

お問い合わせフォーム
http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/support/contact/auto_form/

までお気軽にご連絡ください！