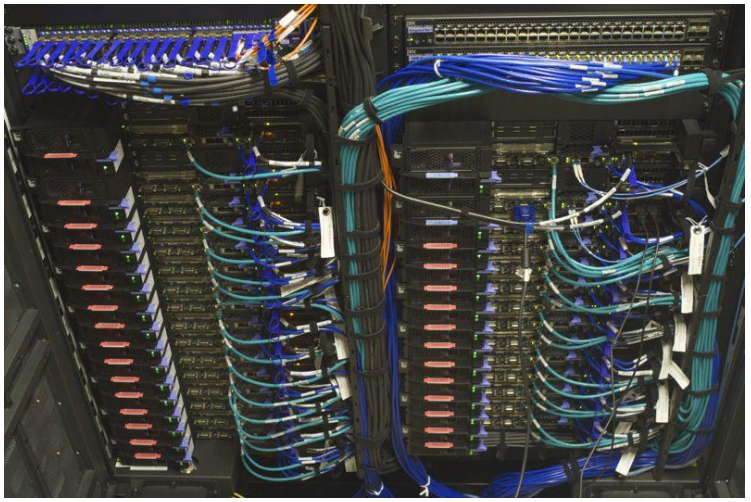
2024/9/28

豊橋技科大HPCクラスタの使い方

豊橋技術科学大学
情報メディア基盤センター

はじめに

- 豊橋技科大には共用のHPCクラスタが設置されています
  HPC = High Performance Computing (高性能計算)



- 豊橋技科大の教員，学生は誰でも利用可能です
- 全国の国立高専など連携機関からも利用可能です
  https://hpcportal.imc.tut.ac.jp/

HPCクラスタの用途

- Linux環境での科学技術計算，シミュレーション，深層学習などの実行
- 科学技術計算，シミュレーションのプログラム開発，プログラミングの学習にも利用可能です
- プログラミング環境
  C/C++, Fortran に適しています
  Intelコンパイラ, GNUコンパイラ
  MPIライブラリ：Intel MPI, OpenMPI
  数値演算ライブラリ (BLAS/LAPACK)：Intel MKL
- データ保存
  /home/[数字]/[ID]　**5GB**（学生）または **20GB**
  （教員，研究利用登録した学生）
  /work/[ID]　制限なし

HPCクラスタの用途

- 計算機利用申込（登録料1,000円）により
  研究レベルの計算の実行,
  研究用アプリケーションの利用が可能です
  https://imc.tut.ac.jp/research/form
- HPCクラスタで利用可能な
  研究用アプリケーション（2024年度）

	用途
ABAQUS	有限要素解析
COMSOL Multiphysics	有限要素解析
Gaussian	量子化学計算
Materials Studio	第一原理計算，量子化学計算

窓口サーバと計算サーバ

- HPCクラスタを使用するには，まず窓口サーバに接続します。窓口サーバではプログラムのコンパイル等が可能です。大規模な計算は計算サーバで行います。
- 計算サーバ（1ノード）の仕様は以下の通りです

項目	仕様
機種名	DELL PowerEdge R740
OS	RedHat Enterprise Linux 7.7
CPU	Intel Xeon Gold 6132 2.60 GHz 14コア × 2
メモリ	192 GB
GPU	NVIDIA Tesla V100 × 2

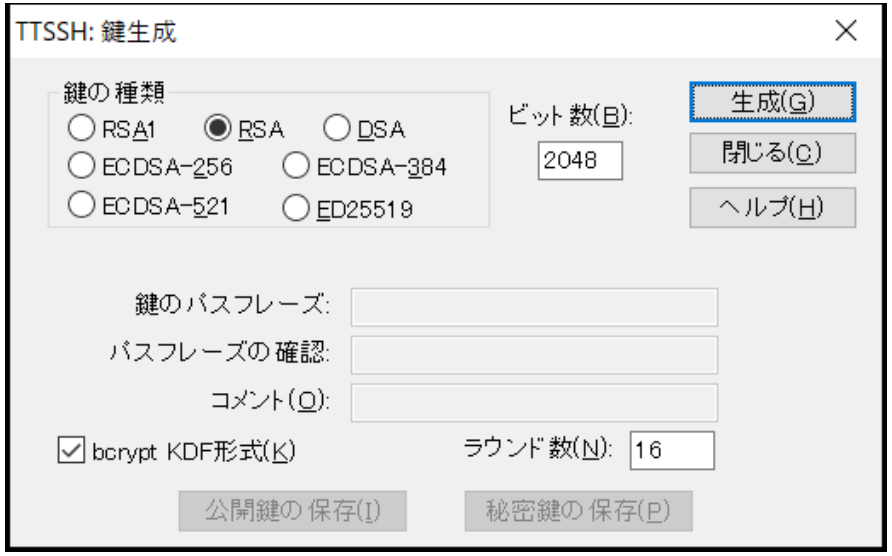
- 計算サーバは全部で15ノードあります。共用の計算資源であることに留意して教育・研究にご活用ください

窓口サーバへの接続方法

- 学内ネットワークからの接続
  パスワード認証または公開鍵認証によるSSH接続
- 学外ネットワークからの接続
  公開鍵認証によるSSH接続
- 情報メディア基盤センターを利用するユーザ名と
  パスワードがあれば，誰でもログインし利用できます
- 本資料では Windows PC からTeraTermとWinSCPを
  用いて公開鍵認証で接続する例を説明します
- その他の接続方法はこちらを参照
  https://hpcportal.imc.tut.ac.jp/wiki/SSHClient/

TeraTermによる鍵生成と公開鍵の登録

1. TeraTermを起動し"新しい接続"ウインドウ右上の×印をクリックして閉じる
2. 設定 → SSH鍵生成
3. RSA, ビット数2048で"生成"をクリック
4. パスフレーズを設定して公開鍵，秘密鍵を保存

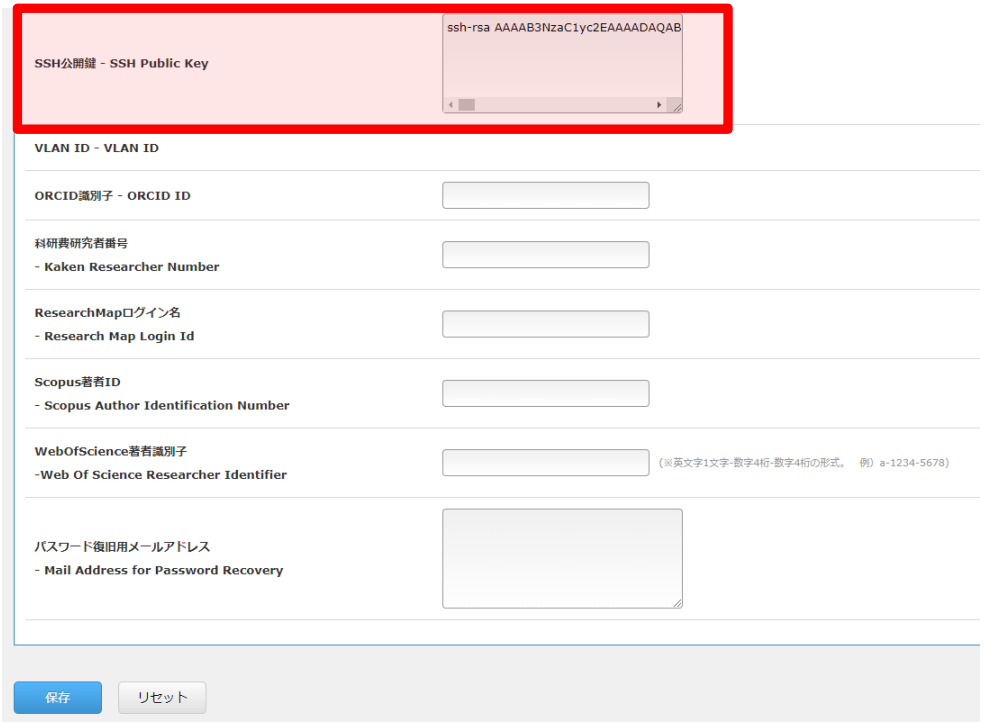


TeraTermによる鍵生成

5. 以下のサイトの「プロファイルメンテナンス」→「SSH公開鍵 - SSH Public Key」に公開鍵の内容を（コピーアンドペーストで）登録
   https://imc.tut.ac.jp/config/

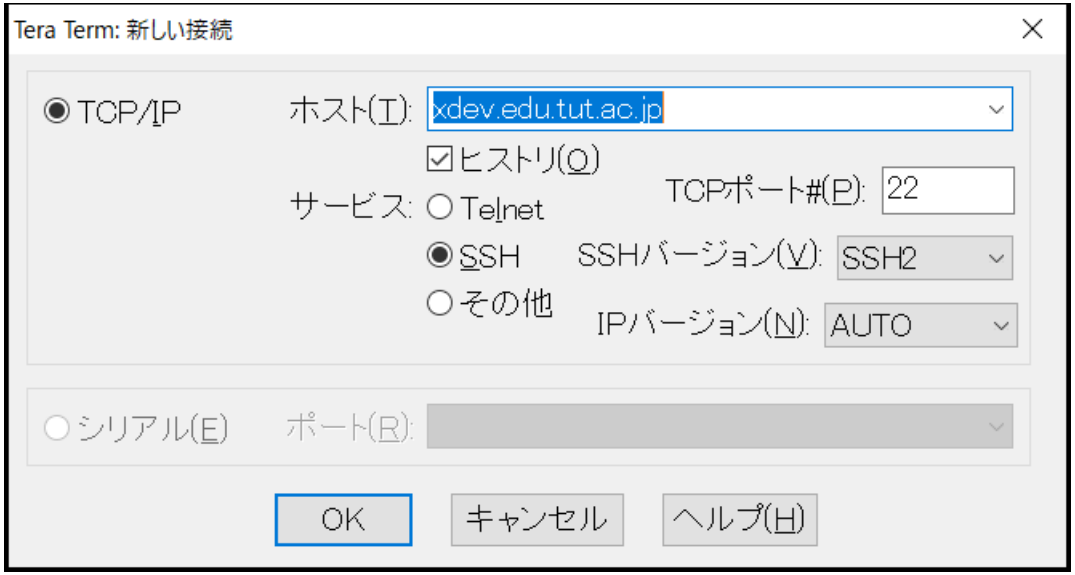
豊橋技科大以外の利用者は
https://hpcportal.imc.tut.ac.jp/
より"プロファイル変更"

秘密鍵は他人に知られないよう十分注意してください



TeraTermによるログイン

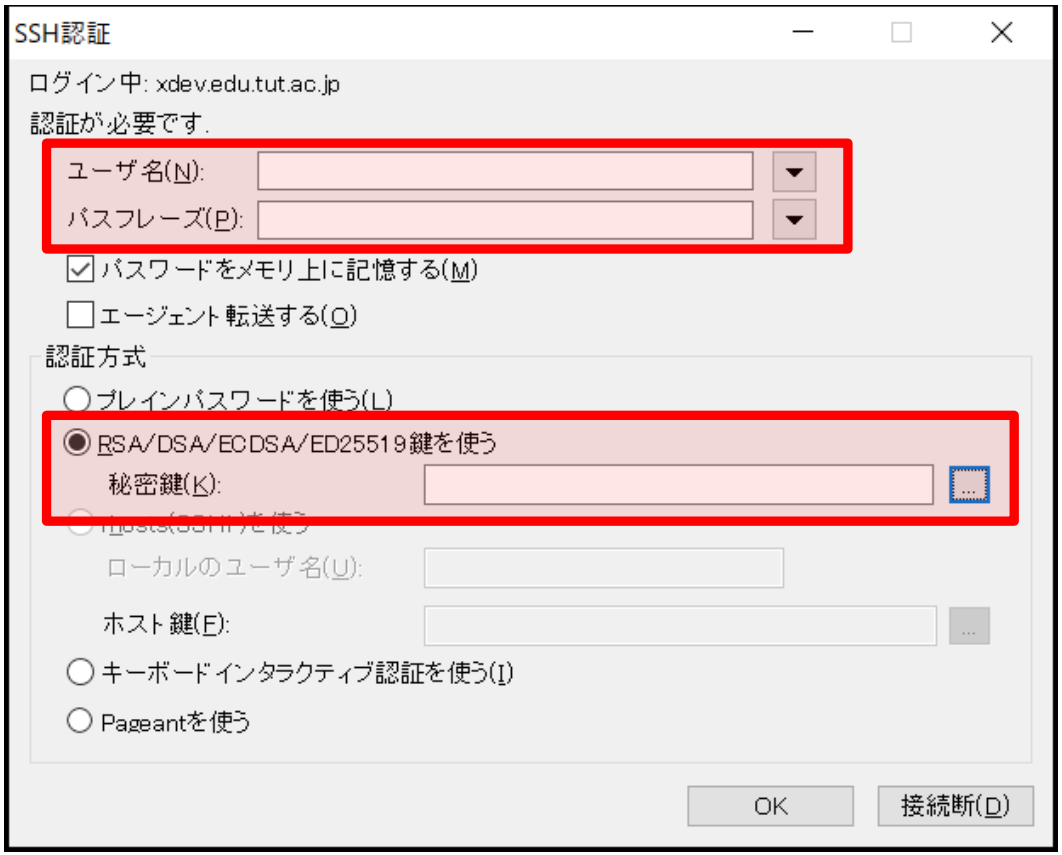
1. TeraTermを起動　または　ファイル → 新しい接続
2. ホストに `xdev.edu.tut.ac.jp` を指定
   （豊橋技科大以外の利用者は `lark.imc.tut.ac.jp`）
   サービスはSSH，TCPポート#は22でOKをクリック



3. 初回のログインでは警告が表示されるが“続行”

TeraTermによるログイン

4. ユーザ名，パスフレーズを入力，秘密鍵を指定
   → “OK”をクリックしてログイン



■ ユーザ名
情報メディア基盤センターから発行されたユーザ名を入力

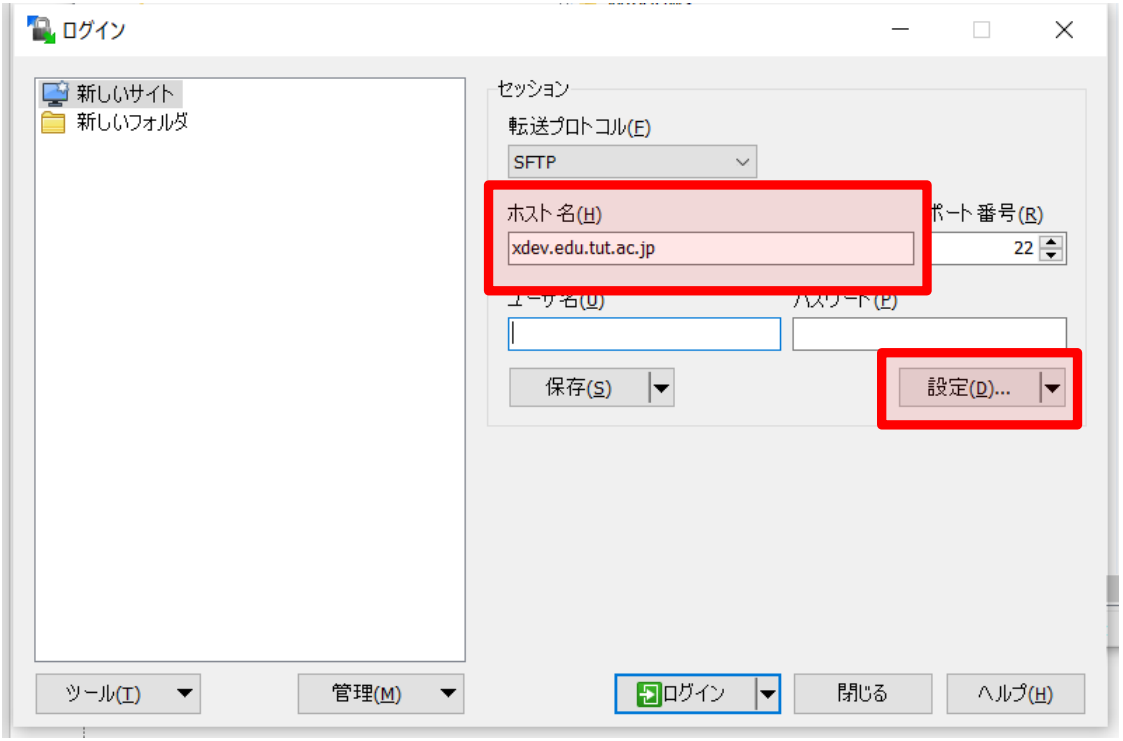
■ パスフレーズ
秘密鍵のパスフレーズ

■ 認証方式
“RSA/DSA/ECDSA/ED25519鍵を使う”から秘密鍵のファイルを指定

学内ネットワークからは“プレインパスワードを使う”でもログインできます

WinSCPによるファイル転送

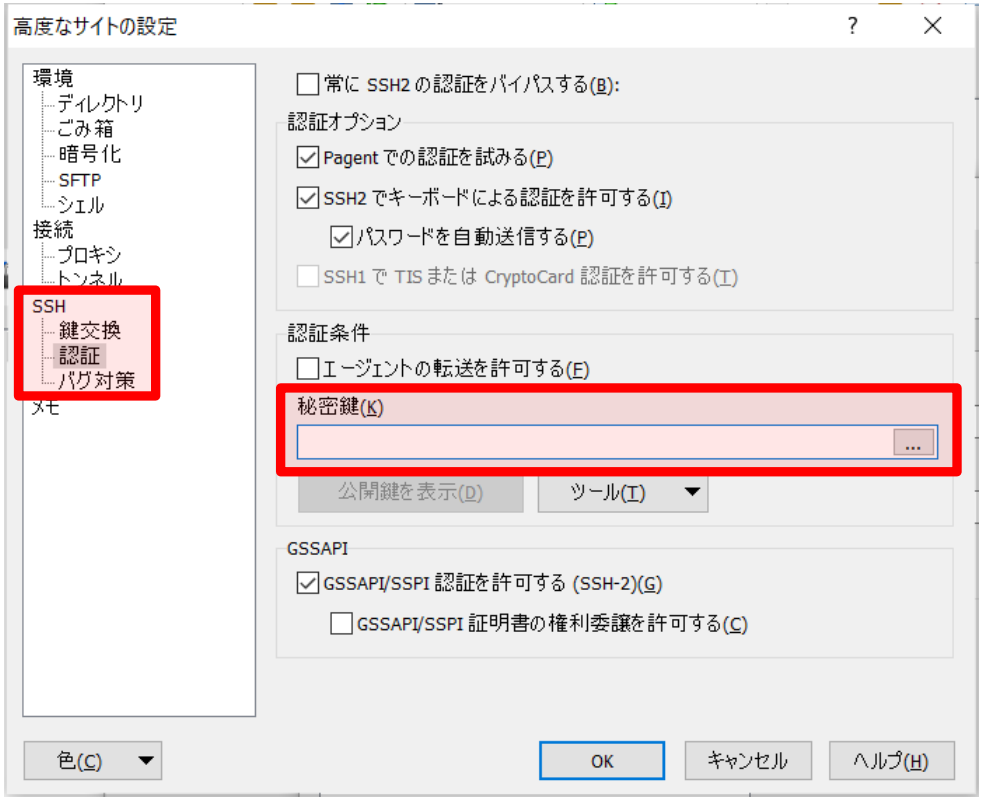
1. WinSCPを起動
2. 新しいサイト → ホスト名に `xdev.edu.tut.ac.jp` (`lark.imc.tut.ac.jp`) を入力
   ユーザ名，パスワードは空欄でよい
3. “設定”を
   クリック



WinSCPによるファイル転送

4. SSH → 認証 から秘密鍵を指定
5. OK → ログイン でWindows PCと
   ファイルのやりとりができます

ログインの前に
“保存”をクリックして
ログイン情報を登録
しておくと便利です



Linuxのコマンド

- TeraTermなどでログインしてからは
  Linuxのコマンドで操作します

コマンド	説明
`ls [ファイル/ディレクトリ]`	ファイル/ディレクトリ情報の表示
`cd [ディレクトリ]`	ディレクトリの移動
`cd ..`	一つ上のディレクトリに移動
`cd ~`	ホームディレクトリに移動
`mkdir [ディレクトリ]`	ディレクトリの作成
`rmdir [ディレクトリ]`	ディレクトリの削除 ※ 中身が空になっている必要あり
`mv [変更前ディレクトリ] [変更後ディレクトリ]`	ディレクトリ名の変更
`vi [ファイル名]`	ファイルの編集 ※ Escape → :q! → Enter で終了
`emacs [ファイル名]`	ファイルの編集 ※ Ctrl＋x → Ctrl＋c で終了

Linuxのコマンド

コマンド	説明
`ls [ファイル or ディレクトリ]`	ファイルまたはディレクトリ情報の表示
`less [ファイル]`	ファイルの表示 ※ space, b, カーソルキーで操作，q で終了
`cp [ファイル] [ディレクトリ]`	ファイルを指定したディレクトリにコピー
`cp [ファイル1] [ファイル2]`	ファイル1と同内容のファイル2を生成
`mv [ファイル] [ディレクトリ]`	ファイルを指定したディレクトリに移動
`mv [変更前ファイル] [変更後ファイル]`	ファイル名の変更
`rm [ファイル]`	ファイルの削除
`cat *.f90 > temp.f90`	ファイルの出力 この場合，拡張子がf90のすべてのファイルを temp.f90に出力する
`grep “temp” *.f90`	ファイル中の文字列の検索 この場合，拡張子がf90のすべてのファイルを対象として“temp”を含む行を表示
`logout`	ログアウト　※ Ctrl + d でも可

Emacsの操作

コマンド	説明
Ctrl+x → Ctrl+s	上書き保存
Ctrl+x → Ctrl+w	別名で保存
Ctrl+x → Ctrl+c	Emacsの終了
Ctrl+x → u	元に戻す
Ctrl+r	前方検索
Ctrl+s	後方検索
Meta (Escape) → <	冒頭へ移動
Meta (Escape) → >	末尾へ移動
Meta (Escape) → gg → Enter	指定した行番号へ移動
Ctrl+space	領域選択
Ctrl+w	指定した領域を切り取り
Meta (Escape) → w	指定した領域をコピー
Ctrl+y	貼り付け

module コマンド

- コンパイラや研究用アプリケーションを使用するために module コマンドが用意されています
- 窓口サーバで利用できます
- 利用可能なモジュールを表示
  ```
  $ module avail
  ```
- ロードしたモジュールを表示
  ```
  $ module list
  ```
- module コマンドによる設定を解除
  ```
  $ module unload
  ```

module コマンド

- Intelコンパイラを利用する場合
  `$ module load intel/2022.1.2`
- Intel MPIを利用する場合
  `$ module load intelmpi.intel/2022.1.2`
- GNUコンパイラを利用する場合
  `$ module load gcc-7.3.1`
- OpenMPIを利用する場合
  `$ module load openmpi.intel-4.0.1`
- MPI環境は競合するためどちらかのみロードすること
- 計算サーバでは利用可能なモジュールが異なります
  `source /etc/profile` としてから `module avail` で確認してください

C言語プログラムのコンパイル

- Intelコンパイラ
  - 逐次実行
    ```
    icx -o temp.x temp.c
    ```
  - OpenMP並列
    ```
    icx -qopenmp -o temp.x temp.c
    ```
  - MPI並列 (Intel MPI)
    ```
    mpiicc -cc=icx -o temp.x temp.c
    ```
  - MPI/OpenMPハイブリッド並列 (Intel MPI)
    ```
    mpiicc -cc=icx -qopenmp -o temp.x temp.c
    ```
- GNUコンパイラ
  - 逐次実行
    ```
    gcc -o temp.x temp.c
    ```
  - OpenMP並列
    ```
    gcc -fopenmp -o temp.x temp.c
    ```
  - MPI並列 (OpenMPI)
    ```
    env OMPI_CC=gcc mpicc -o temp.x temp.c
    ```

C++プログラムのコンパイル

- Intelコンパイラ
  - 逐次実行
    ```
    icpx -o temp.x temp.cpp
    ```
  - OpenMP並列
    ```
    icpx -qopenmp -o temp.x temp.cpp
    ```
  - MPI並列 (Intel MPI)
    ```
    mpiicpc -cxx=icpx -o temp.x temp.cpp
    ```
  - MPI/OpenMPハイブリッド並列 (Intel MPI)
    ```
    mpiicpc -cxx=icpx -qopenmp -o temp.x temp.cpp
    ```
- GNUコンパイラ
  - 逐次実行
    ```
    g++ -o temp.x temp.cpp
    ```
  - OpenMP並列
    ```
    g++ -fopenmp -o temp.x temp.cpp
    ```
  - MPI並列 (OpenMPI)
    ```
    env OMPI_CXX=g++ mpicxx -o temp.x temp.cpp
    ```

Fortranプログラムのコンパイル

- Intelコンパイラ
  - 逐次実行
    ```
    ifx -o temp.x temp.f90
    ```
  - OpenMP並列
    ```
    ifx -qopenmp -o temp.x temp.f90
    ```
  - MPI並列 (Intel MPI)
    ```
    mpiifort -fc=ifx -o temp.x temp.f90
    ```
  - MPI/OpenMPハイブリッド並列 (Intel MPI)
    ```
    mpiifort -fc=ifx -qopenmp -o temp.x temp.f90
    ```
- GNUコンパイラ
  - 逐次実行
    ```
    gfortran -o temp.x temp.f90
    ```
  - OpenMP並列
    ```
    gfortran -fopenmp -o temp.x temp.f90
    ```
  - MPI並列 (OpenMPI)
    ```
    env OMPI_FC=gfortran mpif90 -o temp.x temp.f90
    ```

コンパイラオプション

- `icx --help | less` などと入力して確認できます
- 代表的なオプションは以下の通り

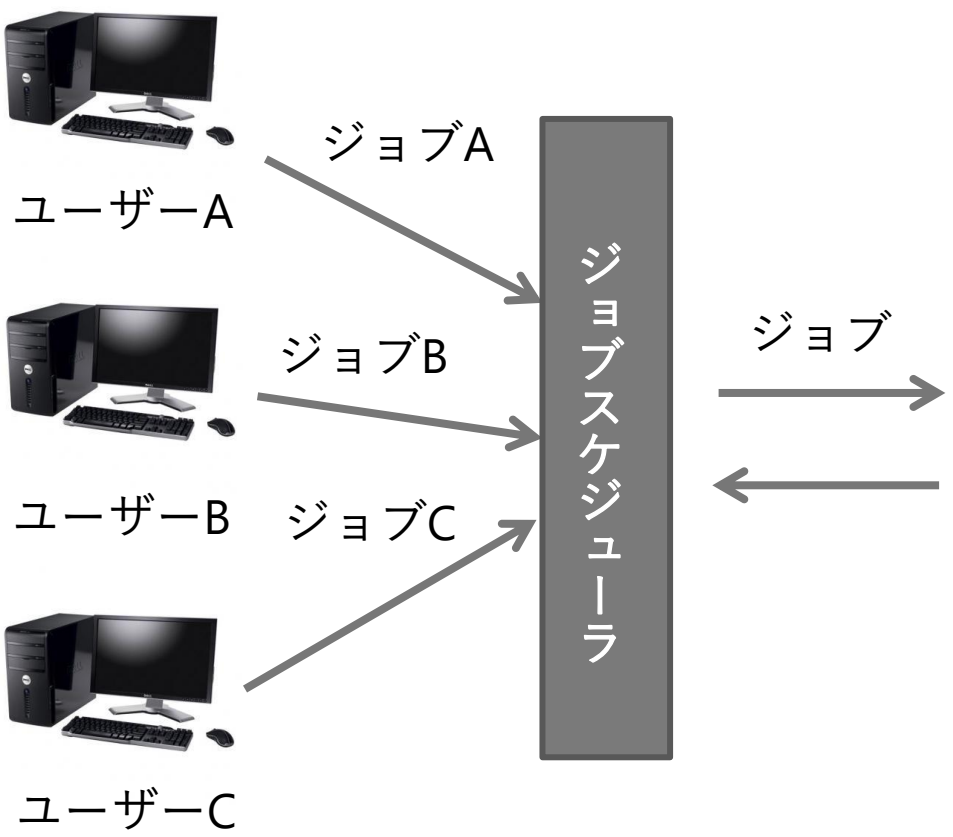
オプション	説明
`-o`	実行ファイル名を指定
`-O0, -O1, -O2, -O3`	コンパイラによる最適化によりプログラムを高速化 -O0は最適化しない，-O3が最速
`-qopenmp (Intel compiler)` `-fopenmp (GNU compiler)`	OpenMPによる並列化
`-traceback -g (Intel)` `-fbacktrace -g (GNU)`	デバッグ用オプション　デバッグ情報を生成し，実行時にエラーが起きたときファイル名や行番号を表示する
`-check all (Intel)` `-fcheck=all (GNU)`	デバッグ用オプション　実行時にチェックを行いエラーや警告を出力する
`-mkl or –qmkl (Intel)`	Intel Math Kernel Library (MKL) を使用する BLAS, LAPACKなどのライブラリを利用可能
`-static`	静的リンクによりライブラリがインストールされていない環境でもバイナリを実行できるようにする。MPIとの併用不可

GPU使用プログラムのコンパイル

- 計算サーバでコンパイルできます
  ※ 窓口サーバではできません
- 窓口サーバにて
  ```
  qsub -I -q gEduq -l select=1:ncpus=1:ngpus=1
  -v DOCKER_IMAGE=prg-env:latest -- bash
  ```
  と入力すると，計算サーバにて対話処理ができます
- ここでは1CPUコアと1GPUの使用を宣言しています
  詳細は以下のページの「インタラクティブジョブ」を参照
  https://hpcportal.imc.tut.ac.jp/wiki/HowToSubmitJob
- 数値計算ライブラリとしてcuBLASを利用する場合の
  C言語ソースコードのコンパイル
  ```
  nvcc -ccbin gcc -I/usr/include -lcublas [ソースファイル名]
  ```

ジョブスケジューラ

- 複数のユーザが共同で計算資源を利用
  → ジョブスケジューラ PBS による管理
- 計算やシミュレーションを行う際には必ず使用すること



計算サーバ
全15ノード
xsnd00～xsnd14

ジョブスケジューラの利用方法

- 事前にジョブを実行するためのスクリプトファイル (bash, cshなど) を用意
- ジョブ投入
  `$ qsub [実行スクリプトファイル名]`
- ジョブの状態，ジョブID表示
  `$ qstat -a`
- ジョブの詳細を表示
  `$ qstat -f | less`
- ジョブの削除
  `$ qdel [ジョブID]`
- ジョブが実行されると標準出力と標準エラー出力が別々のファイルに出力されます

ジョブスケジューラの利用方法

- qsubコマンドのオプション

オプション	使用例	意味
-q	-q wEduq	ジョブを投入するキューを指定
-v	-v DOCKER_IMAGE=<image>	指定したDockerイメージ上でジョブを実行
-v	-v SINGULARITY_IMAGE=<image>	指定したSingularityイメージ上でジョブを実行
-l	-l mem=1g	使用するCPUコア数，メモリ上限などを設定
-o	-o filename	標準出力の内容を指定されたファイルに出力
-e	-e filename	標準エラー出力の内容を指定されたファイルに出力
-j oe		標準エラー出力を標準出力にマージ

- これらは実行スクリプトファイル内の指示文でも指定できます

利用可能なキュー

- 以下のキューは全員が利用できます

キュー	ノード数 最大/標準	CPUコア数 最大/標準	メモリ 最大/標準	GPU数 最大/標準	経過時間 上限	備考
wEduq	4/1	4/1	32GiB/6GiB	0/0	8時間	教育用
gEduq	2/1	4/1	32GiB/6GiB	2/1	8時間	教育用 GPU使用

- これらのキューではインタラクティブジョブにより対話処理を実行できます

利用可能なキュー

- 計算機利用申込により以下のキューも利用できます

キュー	ノード数 最大/標準	CPUコア数 最大/標準	メモリ 最大/標準	GPU数 最大/標準	経過時間 上限	備考
wSrchq	1/1	16/1	160GiB/8GiB	0/0	336時間	小規模
wLrchq	13/1	364/1	2496GiB/6GiB	0/0	336時間	大規模
wLiotq	2/1	96/1	256GiB/8GiB	0/0	336時間	IoT·AI 基盤システム
gSrchq	1/1	16/4	160GiB/32GiB	2/1	336時間	小規模 GPU使用
gLrchq	13/1	364/1	2496GiB/6GiB	26/1	336時間	大規模 GPU使用
gLiotq	2/1	96/1	256GiB/8GiB	2/1	336時間	IoT·AI 基盤システム GPU使用

- これらはインタラクティブジョブは不可（バッチジョブのみ）

コンテナイメージ

- ジョブ投入時のコマンドオプションまたは
  実行スクリプトの指示文でコンテナイメージを
  指定する必要があります
- コンテナ上でジョブが実行されます
- Dockerコンテナを使用する場合のオプション
  `-v DOCKER_IMAGE=<イメージ名>`
- Singularityコンテナを使用する場合のオプション
  `-v SINGULARITY_IMAGE=<イメージ名>`
- 指定可能なイメージ名を表示
  `$ showimages`

実行スクリプトファイルの例：逐次プログラム

```
#!/bin/bash
#PBS -q wEduq   ← 教育用のキュー，GPU使用なし
#PBS -l select=1:ncpus=1   ← 1 ノード 1 CPUコア使用
#PBS -v DOCKER_IMAGE=prg-env:latest
(空行)
ulimit -c 0
source /etc/profile
. /common/intel-2022/compiler/latest/env/vars.sh
. /common/intel-2022/mkl/latest/env/vars.sh
cd $PBS_O_WORKDIR
./test.x
```

Intelコンパイラ，
Intel MKLを
有効にする

- 上記をtest.bashとして保存し，$ qsub test.bash で test.xを実行できます

実行スクリプトファイルの例：OpenMP並列

```
#!/bin/bash
#PBS -q wEduq
#PBS -l select=1:ncpus=4 ← 1 ノード 4 CPUコア使用
#PBS -v DOCKER_IMAGE=prg-env:latest
(空行)
ulimit -c 0
source /etc/profile
. /common/intel-2022/compiler/latest/env/vars.sh
. /common/intel-2022/mkl/latest/env/vars.sh
export OMP_NUM_THREADS=4 ← OpenMPによる 4 スレッド並列
cd $PBS_O_WORKDIR
./test.x
```

実行スクリプトファイルの例：MPI並列

```
#!/bin/bash
#PBS -q wEduq
#PBS -l select=1:ncpus=4:mpiprocs=4
#PBS -v DOCKER_IMAGE=mpi-env:latest
(空行)
ulimit -c 0
source /etc/profile
. /common/intel-2022/compiler/latest/env/vars.sh
. /common/intel-2022/mpi/latest/env/vars.sh
. /common/intel-2022/mkl/latest/env/vars.sh
cd $PBS_O_WORKDIR
export OMP_NUM_THREADS=1
mpirun -np 4 test.x
```

1ノード，
4 CPUコア，4 MPIプロセス

MPI環境の
コンテナイメージを指定

Intel MPIを
有効化

← 4 MPIプロセスでプログラムを実行

実行スクリプトファイルの例：MPIによるノード間並列

```
#!/bin/bash
#PBS -q wEduq
#PBS -l select=4:ncpus=1:mpiprocs=1
#PBS -v DOCKER_IMAGE=mpi-env:latest,DOCKER_
OPTIONS="--network=overlaynw"
(空行)
ulimit -c 0
source /etc/profile
. /common/intel-2022/compiler/latest/env/vars.sh
. /common/intel-2022/mpi/latest/env/vars.sh
. /common/intel-2022/mkl/latest/env/vars.sh
export I_MPI_HYDRA_BOOTSTRAP=ssh  ← ノード間の通信設定
export OMP_NUM_THREADS=1
cd $PBS_O_WORKDIR
mpirun -np 4 test.x  ← 4 MPIプロセスでプログラムを実行
```

4ノード，
1ノードあたり1 CPUコア，
1ノードあたり1 MPIプロセス

MPIによるノード間並列の設定

実行スクリプトファイルの例：MPI/OpenMPハイブリッド並列

```
#!/bin/bash
#PBS -q wEduq
#PBS -l select=1:ncpus=4:mpiprocs=2
#PBS -v DOCKER_IMAGE=mpi-env
(空行)
ulimit -c 0
source /etc/profile
. /common/intel-2022/compiler/latest/env/vars.sh
. /common/intel-2022/mpi/latest/env/vars.sh
. /common/intel-2022/mkl/latest/env/vars.sh
export OMP_NUM_THREADS=2
cd $PBS_O_WORKDIR
mpirun -np 2 test.x
```

1ノード，
1ノードあたり4 CPUコア，
1ノードあたり2 MPIプロセス

MPI環境の
コンテナイメージを指定

← OpenMPにより1プロセスあたり
2 スレッド並列

← 2 MPIプロセスでプログラムを実行

実行スクリプトファイルの例：GPUの利用

```
#!/bin/bash
#PBS -q gEduq  ← GPUを使用できるキューを指定
#PBS -l select=1:ncpus=1:ngpus=1 ← 1 ノード 1 CPUコア 1 GPU
#PBS -v DOCKER_IMAGE=prg-env:latest
(空行)
ulimit -c 0
source /etc/profile
cd $PBS_O_WORKDIR
./test.x
```

実行スクリプトファイルの例：計算資源の設定

```
#!/bin/bash
#PBS -q wLrchq
#PBS -l walltime=96:00:00
#PBS -l select=1:vnode=xsnd06:ncpus=4:mem=48G
#PBS -v DOCKER_IMAGE=prg-env:latest
```

← 経過時間の上限

xsnd06の4コア，
48GBメモリ確保

- wEduq, gEduq では 計算サーバ（vnode）として xsnd00～xsnd14 を指定できる。その他のキューでは xsnd02～xsnd14 を指定
- あらかじめ計算時間，必要なメモリ量を見積って効率よく利用しましょう

注意事項

- プログラムがエラーで終了した際に生成されるcoreファイルに注意してください
- coreファイルによりユーザに割り当てられた容量（通常は5GB）をオーバーし，作業が継続できなくなる場合があります
- すでに生成されたcoreファイルは削除してください
- “ulimit -c 0”のコマンドによりcoreファイルを生成しないようにできます
- 容量オーバーにより作業が継続できなくなった場合は情報メディア基盤センター（supports@imc.tut.ac.jp）までお知らせください

謝辞について

- HPCクラスタを使用して得た成果を論文，学会等で発表する際には謝辞（Acknowledgment）に記載をお願い致します

- 例
  本研究で行った計算は豊橋技術科学大学情報メディア基盤センターのHPCクラスタを利用して行いました。

- Example
  The authors would like to thank Information and Media Center (IMC) at Toyohashi University of Technology for providing computer resources (HPC cluster).