先進ゲノム支援 情報解析講習会

遺伝研スパコンの利用方法・UNIX基本コマンド

2022.10.20

谷沢靖洋(遺伝研·大量遺伝情報研究室)

講習の内容

- ・遺伝研スパコンの概要
- ・必要なソフトのインストール (事前準備の確認)
- ・スパコンへの接続 (事前準備の確認)
- ・基本コマンド

遺伝研スパコン概要

国際塩基配列DBのための計算基盤・ライフサイエンスのための共同計算基盤

無償で利用可能(一部課金サービスあり)

2019.3 リプレイス

合計約15,000 CPUコア

Thin計算ノード (232台, GPU搭載マシンもあり)

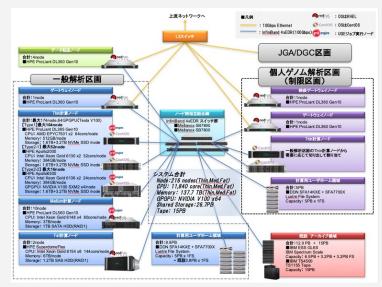
Medium計算ノード(10台, 80 CPUコア, 3TBメモリ)

Fat計算ノード (1台、144 CPUコア 12TBメモリ, 有償)

一般計算用ストレージ 17.1PBDB用ストレージ 30PB

各ユーザーの初期ディスク割り当て 1TByte 大規模利用申請により拡張可能 (2022.10現在受付停止中)

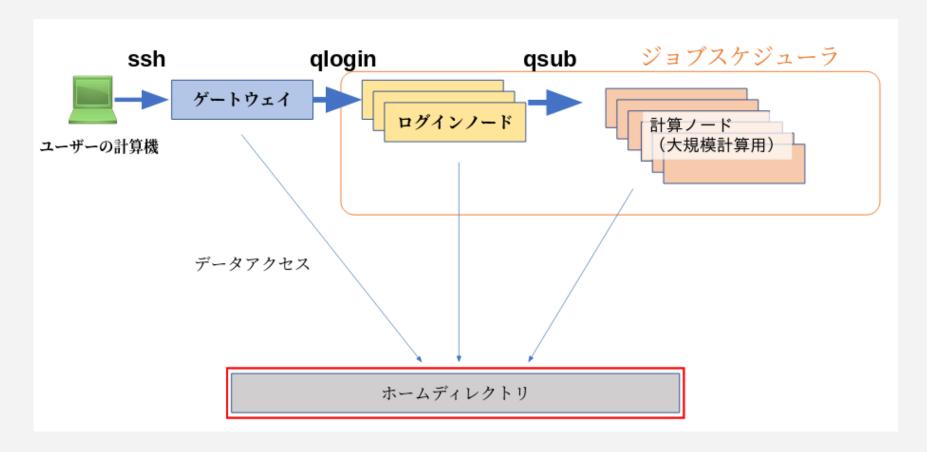
個人ゲノム解析区画 (有償)





https://sc.ddbj.nig.ac.jp/guides/overview

基本的な使い方



gwノードにログインした後、"qlogin"コマンドを用いてログインノードに移動して作業 負荷の高い計算や長時間かかる計算は "qsub" コマンドを用いてジョブを投入 ホームディレクトリ上のデータはどのノードからも参照できる

生命科学研究のためのソフトウェア・参照データ

/usr/local/biotools

2000以上の解析ツールのApptainer (Singularity) コンテナ

インストール不要で様々な解析が実行できる

/usr/local/seq

DDBJやNCBIで公開されている塩基配列ファイル、

BLASTデータベースなど

/usr/local/resources

BioProject/BioSampleのデータ

DRAに登録された生NGSデータ

講習の内容

- ・遺伝研スパコンの概要
- ・必要なソフトのインストール (事前準備の確認)
- ・スパコンへの接続 (事前準備の確認)
- 基本コマンド

本日の講習会で使うソフトウェア

- ・ターミナルソフトスパコンへの接続
- ・SFTPクライアントソフト ファイルの転送
- ・テキストエディタファイルの閲覧・編集、プログラミング

ターミナルソフト

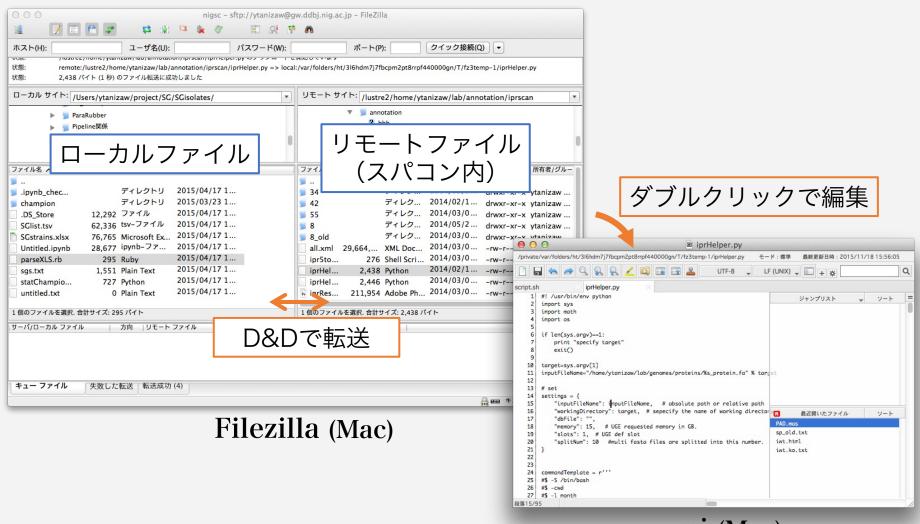
- ・ スパコンに接続するための必須ソフト
- Macでは「ターミナル(OS標準)」や「iTerm2」
- Windowsでは「PowerShell (OS標準)」「TeraTerm」など
- スパコンへの接続は SSH プロトコルを利用した安全な通信
- スパコンへの接続以外にも、コマンド操作による大量のファイルの 一段加理や 自動加理に用いることが可能
 - 一括処理や、自動処理に用いることが可能。

SFTPクライアントソフト

- ・ スパコンとの間でファイルの転送を行う
- Macでは「Filezilla」「CyberDuck」など
- Windowsでは「WinSCP」「Filezilla」など

ソフトによってはリモートファイルを直接閲覧・編集することも可能。

SFTPクライアントソフト



mi (Mac)

テキストエディタ

- ・ テキストファイルの閲覧・編集
- Macでは「テキストエディット」「mi」など
- Windowsでは「TeraPad」「EmEditor」など

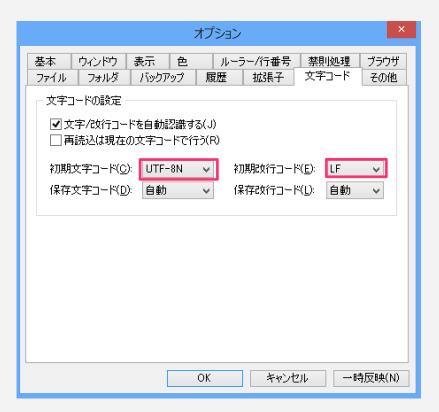
高機能のものは、キーワードの自動補完 や色分けなどプログラミングの支援機能 も持つ

```
#$ -S /bin/bash • fabfile.py
 from celeryapp import app
 from celery.exceptions import SoftTimeLimitExceeded
 app.control.time_limit('waitsum',
                       soft=30, hard=30, reply=True)
def add(x, y):
    print x, y, x + y
    return x + y + y
@app.task
def mul(x, y):
    return x * y
def waitsum(x, y, z):
        time.sleep(z)
        print x, y, z
        return x + y
     except SoftTimeLimitExceeded:
        print "timeout during execution"
def xsum(numbers):
     time.sleep(10)
    print "OK"
     return sum(numbers)
```

SublimeText (Mac or Win)

Windows での注意点

- ・ 文字コードは UTF-8 (BOMなし、UTF-8Nであること)
- ・ 改行コードは LF



BOM付きUTF-8で作成したファイル



先頭に見えているのが BOM

通常は単にUTF8といえばBOMなしのUTFを指す

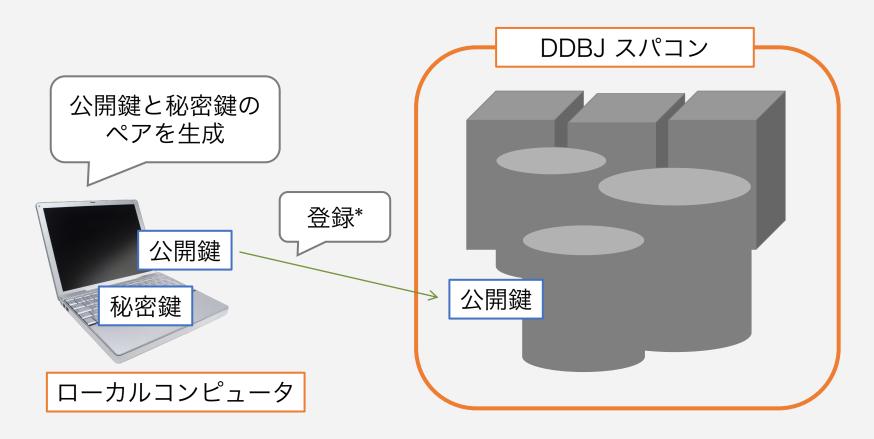
TeraPadの設定画面

講習の内容

- ・遺伝研スパコンの概要
- ・必要なソフトのインストール (事前準備の確認)
- ・スパコンへの接続 (事前準備の確認)
- 基本コマンド

鍵認証

スパコンへはパスワード認証ではなく、鍵交換による認証で接続する。

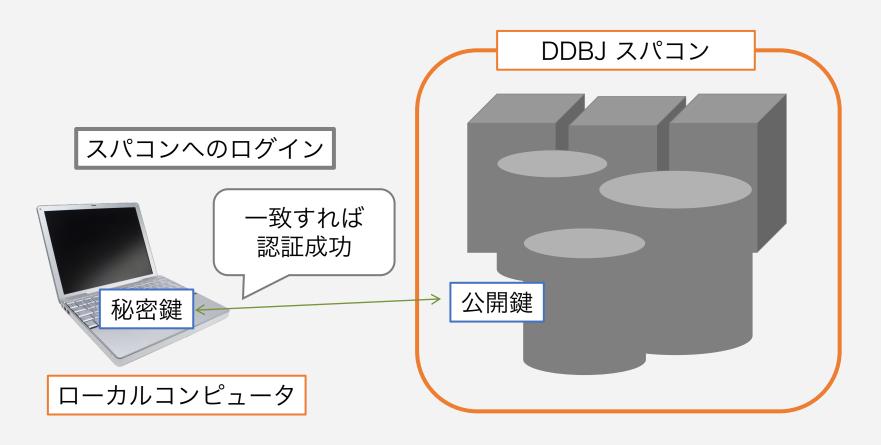


公開鍵にはパスフレーズをつけておくことを推奨

* 公開鍵の登録はスパコンアカウント申請時に行う。また、 https://sc-account.ddbj.nig.ac.jp でログインし、追加で公開鍵を登録することもできる。

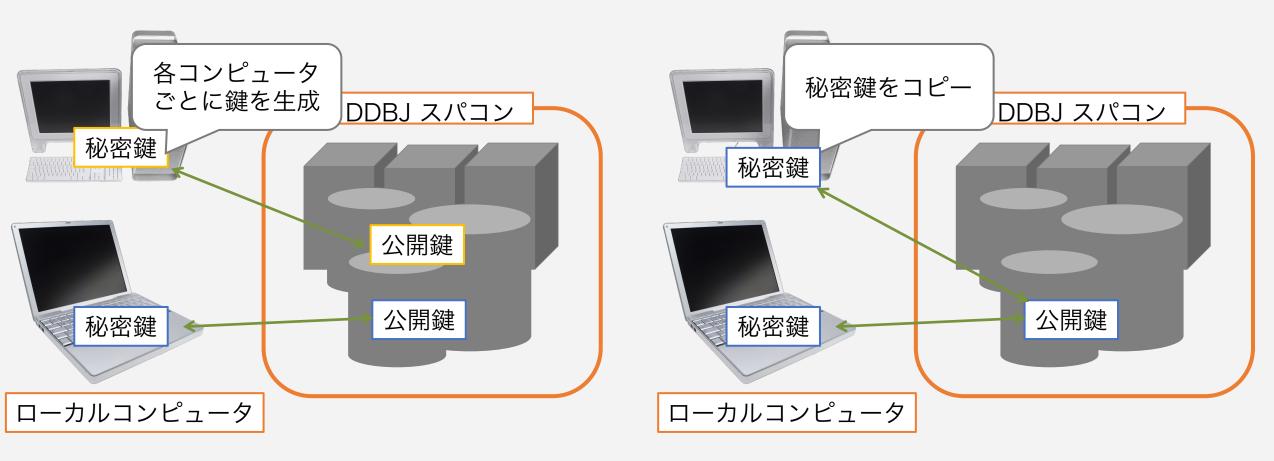
鍵認証

スパコンへはパスワード認証ではなく、鍵交換による認証で接続する。



他の端末から接続するには?

↓ それぞれのマシンで鍵ペアを生成し、公開鍵をスパコンに追加登録



最初に作った秘密鍵を別のマシンにコピーして使い回す ↑ (秘密鍵は他の人から読み取られる可能性のない場所におく必要がある)

スパコン接続に関するトラブルシューティング & 質問

- ・ パスフレーズ入力時には、入力された文字は画面には表示されません。
- ・ 秘密鍵にパスフレーズを設定しなくても良いか?

設定することを推奨するが、自動化目的などの場合、設定しないこともある

・ 秘密鍵の保存場所に注意

ホームディレクトリ以下に保存することを推奨 外付けドライブ等だとうまくいかない可能性あり

・ アカウント名=ユーザー名、ホスト名=サーバー名 と考えてください。

使用するソフトによって使われる言葉が異なることがありますが、上記は同じ意味で使われています。 アカウント名は登録証に記載された名称、スパコン接続の場合、ホスト名は gw.ddbj.nig.ac.jp です。

スパコン接続に関するトラブルシューティング & 質問

・ 公開鍵を保存するときは、先頭の"ssh-rsa"も含めてコピー&ペースト (最後の xxxxxx@xxxxxxという部分まで)

```
PS C:\flagsum Secretarian Continues of the se
```

公開鍵はメール等でおくっても良いか?

OK. 公開鍵から秘密鍵を生成することはできない (逆に秘密鍵から公開鍵を作成することはできるので、秘密鍵をメールやネットワーク経由で送ることは推奨されない)

講習の内容

- ・遺伝研スパコンの概要
- ・必要なソフトのインストール (事前準備の確認)
- ・スパコンへの接続 (事前準備の確認)
- ・基本コマンド

遺伝研スパコンはLinuxで動いている

Linux & UNIX

UNIX … 1960年代にAT&Tベル研究所で作られたサーバー用OS (商用)

MacOSはUNIXをベースにしている

Linux … Linus Torvalds氏によって作られたUNIX互換のOS (オープンソース)

RedHat系、Debian系などさまざまな系統 (ディストリビューション)がある

Windows Subsystem for Linux (WSL)をインストールするとWindows上でLinux環境を動作させることができる。

スパコンではRedHat系のCent OS 7が使われている

遺伝研スパコンは共用の計算資源

ゲートウェイノードは、ログインやファイル転送専用。計算処理はログインノードで行うか、 バッチジョブを投入して行うこと。

CPUやネットワーク帯域を独占しない

意図せず多数のCPUを使って計算を行うと他のユーザーのジョブに影響を与えることがある 外部サーバーへの通信が短時間に集中すると、相手方サーバーへの通信が遮断されてしまう ことがある。