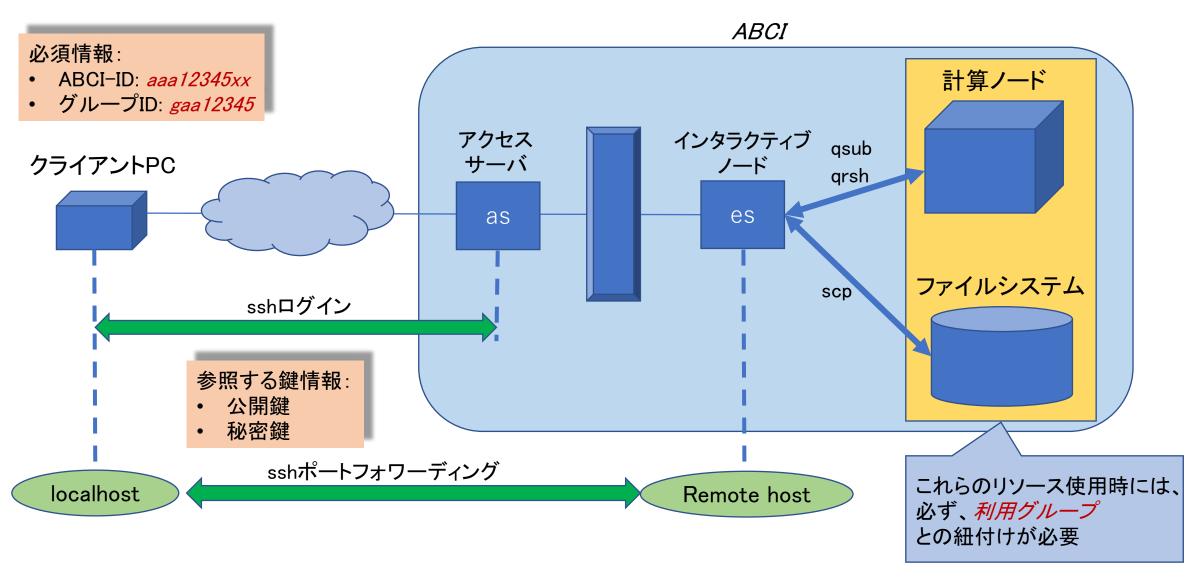
ABCI利用マニュアル (MAC編)

国立研究開発法人 產業技術総合研究所情報 · 人間工学領域招聘研究員 萩島功一2019年2月7日

目次

- ・プロトコル概念図
- ・公開鍵・秘密鍵ペアの生成、公開鍵の登録
- ABCIへのログイン(ssh)
- ・ファイルのアップロード、ダウンロード(scp)
- インタラクティブジョブ(qrsh)
- バッチジョブ(qsub)
- 仮想環境で、TensorFlowをインストール
- Singularityを利用して、TensorFlowの環境を構築
- Jupyter Notebookの利用

プロトコル概念図



公開鍵・秘密鍵ペアの生成

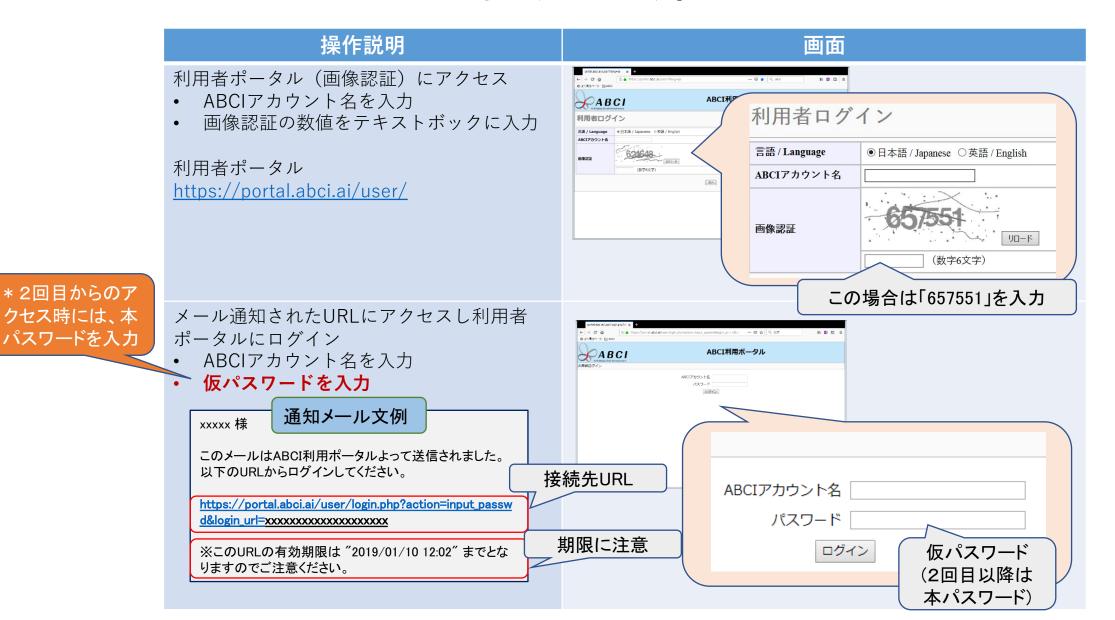
1) ターミナルを開き、公開鍵・秘密鍵のペアを生成する(ssh-rsaの例)。

```
yourpc$ install -m 0700 -d ~/.ssh
yourpc$ cd ~/.ssh
yourpc$ ssh-keygen -t rsa -b 4096 -C "xxx@yyy.co.jp" -f ~/.ssh/id_rsa
Generating public/private rsa key pair. Enter passphrase (empty for no passphrase): <-- パスフレーズを入力(任意)
Enter same passphrase again: <-- もう一度、パスフレーズを入力(任意)
Your identification has been saved in id_rsa.
Your public key has been saved in id_rsa.pub.
yourpc$ ls ~/.ssh
id_rsa id_rsa.pub
```

- * id rsa (秘密鍵)・・・ クライアントPCに配置
- * id_rsa.pub (公開鍵)・・・ ABCIに登録
- 2) ターミナルから公開鍵を参照する(ssh-rsaの例)。

```
yourpc$ cat ~/.ssh/id_rsa.pub ssh-rsa abcdefghijklmnopqrstuvwxz1234567890ABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ1234567890abcdefghijklmnopqrstuvwxyzABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ1234567890abcdefghijklmnopqrstuvwxyzABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ1234567890abcdefghijklmnopqrstuvwxyzABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ1234567890abcdefghijklmnopqrstuvwxyzABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ1234567890abcdefghijklmnopqrstuvwxyzABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ1234567890abcdefghijklmnopqrstuvwxyzABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXYZ1234567890abcdefghijklmnopqrstuvwxyzABCDEFGHIJKLMNOPQRSTUVWXgxVQ7WEhTBbCel xxx@dhcp012345.a01.yyy.co.jp
```

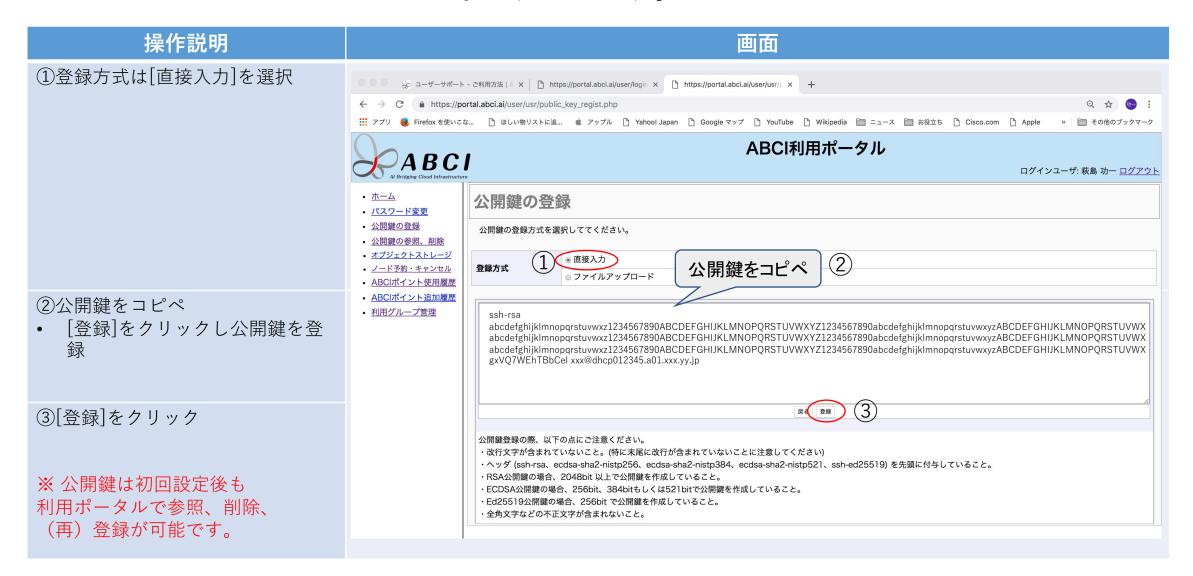
公開鍵の登録(1/3)



公開鍵の登録(2/3) (2回目以降のアクセスでは出てこない)

操作説明 画面 利用規定への同意(初回ログイン時のみ) 利用規定への同意 利用規定を読み、同意する場合は「全て 下記を参照し、同意お願いします。同意いただけない場合ABCIをご利用できませんので、ご理解お願いいたします。 を同意して次へ進む」をクリック 産総研外の利用者の方 産総研内の利用者の方 □ 同意する● 同意しない 以下のセキュリティ上の遵守項目を読み、同意いただけたら「全てを同意して次へ進む」で次に進んでください。 利用責任者、利用管理者、利用者(以後、利用者等という)は、研究所から提供されるABCI利用に関するアカウント及びアカウントのパス ワードを研究所の承諾なく第三者に開示してはならず、かつ、第三者に推測されないように適切に設定し、管理しなければなりません。 利用者等は、利用者等のデータ等がいかなる法令にも違反していないことを表明及び保証し、利用者等のデータ等の開発、内容、運用、維持 及び利用につき、責任を負います。(利用者等のデータ等のセキュリティ及びバックアップ) 利用者等は、ABCIを適正に利用し、利用者等のデータ等について、セキュリティを確保し保護すること、及び定期的に保存することを含 め、適切なセキュリティ及び保護を行うことを誓約します。 (安全保障輸出管理関係法令の遵守) 利用者等は、次の各号に該当する行為を行ってはなりません。 約款・規約及び回答書に記載されている事項に違反する行為 申請書に記載した利用目的以外にABCIを利用する行為 研究所若しくは第三者の著作権・商標権等の知的財産権を侵害する行為又はそのおそれがある行為 四 研究所若しくは第三者の財産、プライバシー若しくは肖像権を侵害する行為又はそのおそれがある行為 五 ABCIポイントを含めた研究所の電子情報を改ざん又は消去する行為 パスワード変更(初回ログイン時のみ) パスワード変更 • 仮パスワードと新しいパスワードを入力 し、「変更」をクリックすると確認ダイ 以下のフォームにパスワードをご入力の上、「変更」ボタンをクリックしてください。 アログが表示されますので「OK」をク 現在のパスワード リックします。 新しいパスワード 新しいパスワード (確認) 戻る 変更 ※ パスワードは初回設定後も利用者ポータル パスワード規約 で変更可能です。 • 15以上の文字をランダムに並べた文字列を指定してください。例えばLinux の辞書に登録されている単語は使用でき ません。文字をランダムに選ぶ方法として、パスワード作成用のソフトウェアを用いるなどして、自動的に生成する ことを推奨します。 • 現在のパスワードと異なる文字列を指定してください。 • 英小文字、英大文字、数字、特殊文字の4種類全てを含む文字列を指定してください。 使用可能な特殊文字は以下の通りです。 空白、!、"、#、\$、%、&、'、(、)、*、+、,、-、.、/、:、;、<、=、>、?、@、[、¥、]、^、_、`、 {, |, }, ~ 全角文字は使用できません。

公開鍵の登録(3/3)



ログイン(ssh)

1) ターミナルからアクセスサーバ(as.abci.ai)にログインします。

yourpc\$ ssh -L 10022:es.22 -l aaa12345xx as.abci.ai

The authenticity of host 'as.abci.ai (0.0.0.1)' can't be established.

Are you sure you want to continue connecting (yes/no)? ← yesを入力

Warning: Permanently added 'XX.XX.XX.XX' (RSA) to the list of known hosts.

Enter passphrase for key '/home/username/.ssh/id rsa': ← パスフレーズ入力

Welcome to ABCI access server. Please press any key if you disconnect this session.

Warning

上記状態で何らかのキーを入力するとSSH接続が切断されてしますので注意してください。

2) 別のターミナルで、インタラクティブノード(es)にポートフォーワーディングします。

yourpc\$ ssh -p 10022 -l aaa12345xx localhost

Are you sure you want to continue connecting (yes/no)? yes ← yesを入力

Warning: Permanently added 'localhost' (RSA) to the list of known hosts.

Enter passphrase for key '/home/username/.ssh/id rsa': ← パスフレーズ入力

[username@es1 ~]\$

ファイルのアップロード・ダウンロード(ssh)

1) ファイルのアップロード: インタラクティブノード(es)にログインし、別のターミナルからscpを実行。

```
yourpc$ scp -P 10022 local-file aaa12345xx@localhost:remote-file
# local-file: PCからアップしたいファイル、remote-file: リモートファイル名
Enter passphrase for key: +++++++ ← パスフレーズを入力
local-file
100% file-size transfer-speed transfer-time
```

2) ファイルのダウンロード: インタラクティブノード(es)にログインし、別のターミナルからscpを実行。

```
yourpc$ scp -P 10022 aaa12345xx@localhost:sample ./
# sample: PCへダウンロードしたいファイル
Enter passphrase for key: +++++++ ← パスフレーズを入力
sample 100% file-size transfer-speed transfer-time
```

インタラクティブジョブ(qrsh)

1) インタラクティブノード(es)にログインして実行。

```
[username@es1 ~]$ qrsh -g gaa12345 -l rt_F=1 -l h_rt=01:00:00 # gaa12345: グループ名, rt_F=1 : 計算資源タイプ(フルノードを1個), h_rt=01:00:00(最大1時間確保)
```

2) インタラクティブジョブの状況を参照。

[usernam job-ID	ne@es1 ~]\$ prior	qstat name	user	state	submit/start at	queue	jclass	slots ja−task−ID
151646	0.28027	QRLOGIN	aaa12345xx	r	01/21/2019 09:39:43	gpu@g0371		10

バッチジョブ(qsub)

1) インタラクティブノード(es)にログインして実行。

```
[username@es1 ~]$ qsub -g gaa12345 -l rt_C.small=1 sample.sh # gaa12345: グループ名, rt_C.small=1 : 計算資源タイプ(CPU x 5コア), sample.sh: ジョブスクリプトYour job 151645 ("sample.sh") has been submitted
```

2) バッチジョブの状況を参照。

[usernam	[username@es1 ~]\$ qstat									
job-ID	prior	name	user	state	submit/start at	queue	jclass	slots ja-task-ID		
151646	0.25586	sample.sh	aaa12345xx	r	01/20/2019 15:16:53	gpu@g0002		10		

3) バッチジョブの出力。

```
[username@es1~]$ ls -l
-rw-r--r-- 1 aaa12345xx gaa12345
-rw-r--r-- 1 aaa12345xx gaa12345
0 1月 20 15:17 sample.sh.e151646 <エラー出力ファイル>
0 1月 20 13:51 sample.sh.o151235 <正常出力ファイル>
```

Singularityを利用して、TensorFlow(GPU)の環境を構築

1) インタラクティブノード(es)にログインし、TensorFlowのDockerイメージを取得(一度、実施すればいい)。

以下のイメージを使用 (tag: -gpu-py3) https://hub.docker.com/r/tensorflow/tensorflow/

2) インタラクティブジョブ(計算ノード)で、Singularityを実行し、TensorFlowの環境を構築。

```
[username@es3~]$ qrsh -I rt_F=1 -I h_rt=01:00:00 -g gaa12345
[username@g0003~]$ module load singularity/2.6.1
[username@g0003~]$ singularity shell --nv ./tensorflow-1.12.0-gpu-py3.simg
Singularity: Invoking an interactive shell within container...

Singularity tensorflow-1.12.0-gpu-py3.simg:~> python
>>> import tensorflow as tf
>>>
# TensorFlow (GPU)が利用できるようになる
```

TensorFlowの実行例

```
. .
                                                        * hagishima — aaa10005yk@g0195:~ — ssh -p 10022 -l aaa10005yk localhost — 193×70
[aaa10005yk@es3 ~]$ qrsh -l rt_F=1 -l h_rt=01:00:00 -g gaa50069
[aaa10005yk@g0195 ~]$ module load singularity/2.6.1
[aaa10005yk@g0195 ~]$ singularity shell --nv ./tensorflow-latest-gpu-py3.simg
Singularity: Invoking an interactive shell within container...
Singularity tensorflow-latest-gpu-py3.simg:~> python
Python 3.5.2 (default, Nov 23 2017, 16:37:01)
[GCC 5.4.0 20160609] on linux
Type "help", "copyright", "credits" or "license" for more information.
>>> import tensorflow as tf
>>> mnist = tf.keras.datasets.mnist
>>> (x_train, y_train),(x_test, y_test) = mnist.load_data()
>>> x_train, x_test = x_train / 255.0, x_test / 255.0
>>> model = tf.keras.models.Sequential([
... tf.keras.lavers.Flatten(input shape=(28, 28)),
... tf.keras.layers.Dense(512, activation=tf.nn.relu),
... tf.keras.layers.Dropout(0.2),
... tf.keras.layers.Dense(10, activation=tf.nn.softmax)
...])
>>> model.compile(optimizer='adam',
                  loss='sparse_categorical_crossentropy',
...
                 metrics=['accuracy'])
>>> model.fit(x_train, y_train, epochs=5)
2019-01-31 05:41:33.601800: I tensorflow/core/platform/cpu_feature_guard.cc:141] Your CPU supports instructions that this TensorFlow binary was not compiled to use: AVX2 AVX512F FMA
2019-01-31 05:41:34.114172: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:1432] Found device 0 with properties:
name: Tesla V100-SXM2-16GB major: 7 minor: 0 memoryClockRate(GHz): 1.53
pciBusID: 0000:3d:00.0
totalMemory: 15.78GiB freeMemory: 15.37GiB
2019-01-31 05:41:34.450015: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:1432] Found device 1 with properties:
name: Tesla V100-SXM2-16GB major: 7 minor: 0 memoryClockRate(GHz): 1.53
pciBusID: 0000:3e:00.0
totalMemory: 15.78GiB freeMemory: 15.37GiB
2019-01-31 05:41:34.789030: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:1432] Found device 2 with properties:
name: Tesla V100-SXM2-16GB major: 7 minor: 0 memoryClockRate(GHz): 1.53
pciBusID: 0000:b1:00.0
totalMemory: 15.78GiB freeMemory: 15.37GiB
2019-01-31 05:41:35.138469: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:1432] Found device 3 with properties:
name: Tesla V100-SXM2-16GB major: 7 minor: 0 memoryClockRate(GHz): 1.53
pciBusID: 0000:b2:00.0
totalMemory: 15.78GiB freeMemory: 15.37GiB
2019-01-31 05:41:35.138560: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:1511] Adding visible gpu devices: 0, 1, 2, 3
2019-01-31 05:41:38.702250: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:982] Device interconnect StreamExecutor with strength 1 edge matrix:
2019-01-31 05:41:38.702304: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:988]
2019-01-31 05:41:38.702314: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:1001] 0: N Y Y Y
2019-01-31 05:41:38.702321: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:1001] 1: Y N Y Y
2019-01-31 05:41:38.702328: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:1001] 2: Y Y N Y
2019-01-31 05:41:38.702334: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:1001] 3: Y Y Y N
2019-01-31 05:41:38.703068: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:1115] Created TensorFlow device (/job:localhost/replica:0/task:0/device:GPU:0 with 14874 MB memory) -> physical GP
U (device: 0, name: Tesla V100-SXM2-16GB, pci bus id: 0000:3d:00.0, compute capability: 7.0)
2019-01-31 05:41:38.704461: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:1115] Created TensorFlow device (/job:localhost/replica:0/task:0/device:GPU:1 with 14874 MB memory) -> physical GP
U (device: 1, name: Tesla V100-SXM2-16GB, pci bus id: 0000:3e:00.0, compute capability: 7.0)
2019-01-31 05:41:38.704741: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:1115] Created TensorFlow device (/job:localhost/replica:0/task:0/device:GPU:2 with 14874 MB memory) -> physical GP
U (device: 2, name: Tesla V100-SXM2-16GB, pci bus id: 0000:b1:00.0, compute capability: 7.0)
2019-01-31 05:41:38.705017: I tensorflow/core/common_runtime/gpu/gpu_device.cc:1115] Created TensorFlow device (/job:localhost/replica:0/task:0/device:GPU:3 with 14874 MB memory) -> physical GP
U (device: 3, name: Tesla V100-SXM2-16GB, pci bus id: 0000:b2:00.0, compute capability: 7.0)
60000/60000 [===========] - 10s 171us/step - loss: 0.2208 - acc: 0.9353
Epoch 2/5
60000/60000 [============] - 4s 65us/step - loss: 0.0966 - acc: 0.9708
Epoch 3/5
60000/60000 [============] - 4s 65us/step - loss: 0.0679 - acc: 0.9785
Epoch 4/5
60000/60000 [=======================] - 4s 66us/step - loss: 0.0529 - acc: 0.9826
```

60000/60000 [==============] - 4s 66us/step - loss: 0.0418 - acc: 0.9863

<tensorflow.python.keras.callbacks.History object at 0x2b85720acef0>

10000/10000 [===========] - 0s 33us/step

>>> model.evaluate(x_test, y_test)

[0.06713192030405335, 0.9799]

>>>

参照:_index.ipynb (Google) https://www.tensorflow.org/tutorials/?hl=ja

Jupyter Notebookの利用

1) Jupyter Notebookのインストール(一度、実施すればいい)。

```
[username@es3~]$ module load python/3.6/3.6.5
[username@es3~]$ python3 -m venv~/lib/pyenv/jupyter_test
[username@es3~]$ source~/lib/pyenv/jupyter_test/bin/activate
(jupyter_test) es4 $ pip install --upgrade pip
(jupyter_test) es4 $ pip install jupyter
(jupyter_test) es4 $ deactivate
```

2) インタラクティブジョブ(grsh)で、Jupyter Notebookを起動する。

```
[username@es3~]$ qrsh -g gaa12345 -l rt_F=1 -l h_rt=01:00:00 〈 gaa12345: グループ名〉
[aaa12345xx @g0019~]$ module load python/3.6/3.6.5
# aaa12345xx: username, g0019: 割当てられた計算ノードリソース
[aaa12345xx @g0019~]$ source~/lib/pyenv/jupyter_test/bin/activate
(jupyter_test) [aaa12345xx @g0019~]$ jupyter notebook --no-browser --ip=`hostname` >> jupyter.log 2>&1 &
(jupyter_test) [aaa12345xx @g0019~]$ jupyter notebook list
Currently running servers:
http://g0004.abci.local:8888/?token=e7f0ba979d4ffd9eeb7e6debf5a326f853fc289583f92dc5 :: /fs3/home/aaa12345xx
```

3) 別ターミナルで。

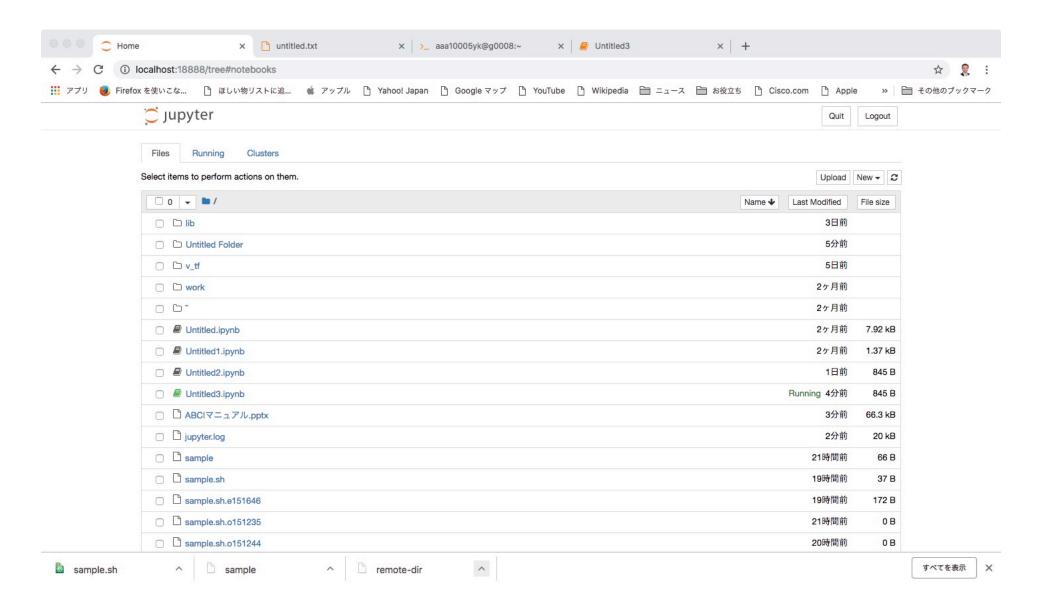
```
yourpc $ ssh -L 10022:es:22 -l aaa12345xx as.abci.ai
```

4) さらに、別のターミナルで。

```
yourpc $ ssh -L 18888:g0004:8888 -l aaa12345xx (-i ~/.ssh/id_rsa) -p 10022 localhost
# -i:秘密鍵オプションは省略可
```

5) ブラウザでアクセス(トークンは、2)をコピペ)。

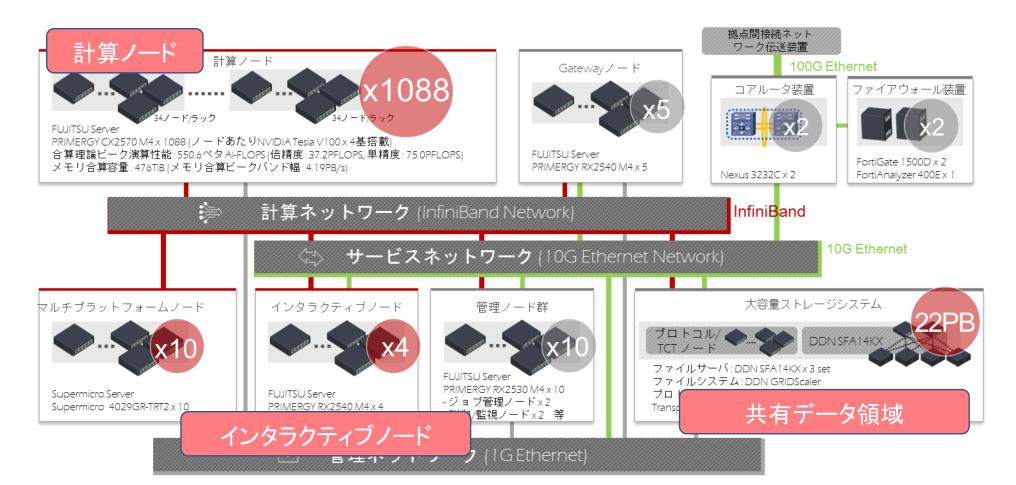
Jupyter Notebook画面例



参考

ABCIシステムの概要

- 1088台の計算ノードと22PBの大容量ストレージを高速ネットワークで接続した 高性能計算システム
- 実際の利用は、インタラクティブノードと計算ノードを操作

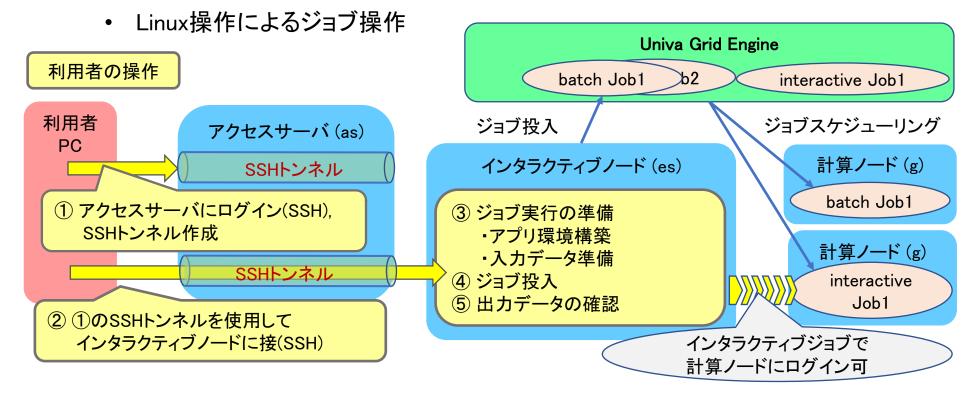


ABCIシステムの概要

- ABCIのノードの役割について
 - 計算ノード(ホスト名 g#### #は0001 ~ 1088までの4桁の数字)
 - 利用者のジョブ(プログラム)を実際に実行するサーバ群
 - ジョブスケジューラ(UGE:Univa Grid Engine)を介したジョブのみ実行可能
 - ジョブの実行方法は主に2つ
 - Spotサービス(バッチジョブ実行)UGEにジョブの実行を依頼し、UGEが確保した計算ノードで実行した結果を受け取り
 - On-demandサービス(インタラクティブジョブ実行)
 UGEが確保した計算ノードに利用者が直接ログインしプログラムを実行
 - インタラクティブノード(代表名:es,ホスト名 es1, es2, es3, es4)
 - インタラクティブノード(es)ヘログインすると、自動的にホスト名es1~es4に振り分け
 - 利用者がログインしジョブ実行などの作業を行うABCIのサーバ
 - コンパイル、アプリのインストール、ジョブ実行スクリプトの用意
 - UGE にジョブ実行依頼
 - ABCI へのデータアップロード、ダウンロード
 - アクセスサーバ (代表名:as)
 - インタラクティブノードにアクセスするため、最初にログインする操作不可の踏み台 サーバ
 - コマンド操作をおこなうとSSHセッションが切れることに注意

利用のイメージ

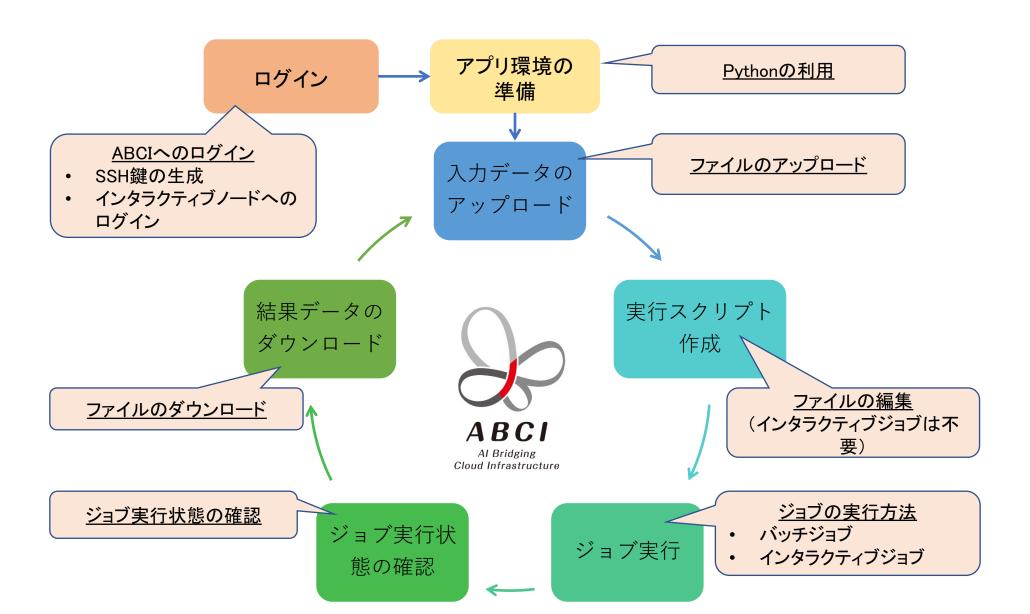
- ABCIへのログイン
 - SSH接続とSSHトンネルを使用したアクセス
- インタラクティブノードでのジョブ実行



※ インタラクティブノード利用時の注意事項

- 1. インタラクティブノード上では長時間資源(CPU、メモリ等)を占有する計算の実行は許可されておりませんが、アプリケーションのコンパイル・インストールなどの比較的低負荷の処理は可能です。
- 2. GPUを使用するアプリ環境の準備は、インタラクティブジョブとして計算ノードにログイン後、環境構築します。

利用フローと本日の講習項目



ご参考: ABCIでのオペレーション

- ABCIはLinux OSで構成されたシステム
 - ・コマンド実行による対話的な操作が主体
 - Windowsユーザはターミナルソフトが必要 ex) PuTTY (https://www.putty.org/)

```
②g0051:~

[username@es1 ~]
[username@gs1 ~]qrsh -l rt F=1 -g ABCIGROUP コマンド
[username@g0051 ~]
[username@g0051 ~]uname -n コマンド
g0051.abci.local
[username@g0051 ~]

実行結果
```

• Mac, LinuxユーザはOS添付のターミナルが利用可能

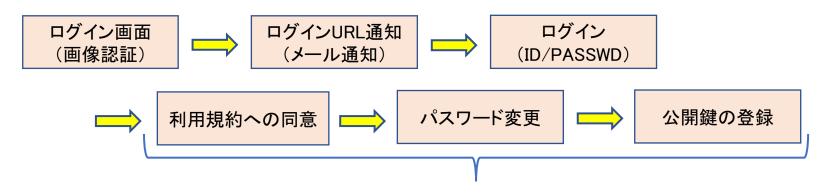
定型の操作を覚えれば利用可能

SSH鍵の生成・登録について

- SSH (Secure Shell)
 - ネットワークの通信経路を暗号化して安全に通信するプロトコル
 - 公開鍵認証を始めとする様々な認証方法をサポート
- 公開鍵認証をABCIでは採用
 - 公開/秘密鍵ファイルをあらかじめ作成し、公開鍵をABCIに登録
 - 認証は手元の秘密鍵とリモートの公開鍵をつき合わせて実施

SSH鍵の生成・登録のフロー

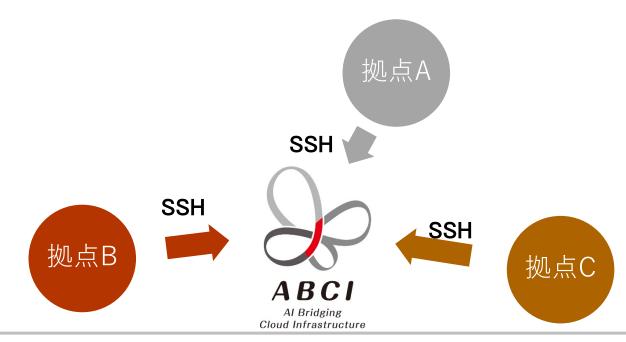
- ・SSH鍵の生成
 - SSH公開鍵/秘密鍵は、利用者の端末で作成
- ABCIへのSSH公開鍵の登録
 - SSH公開鍵の登録は利用者ポータルにて登録 https://portal.abci.ai/user/?lang=ja
 - 利用者ポータル操作の流れ



初回ログイン時は必ず実施

ご参考:複数拠点からのアクセス

- ABCIはインターネットに公開されたサービス
 - インターネットに接続できれば、どこからでも利用可能
 - 暗号化した通信経路(SSH)を使用しセキュアに通信
 - 端末が異なる場合は端末ごとに鍵ファイルの登録が必要



インターネットに接続可能かつ鍵登録済みPCあれば様々な拠点から利用可能

ジョブの実行

・ジョブの実行サービスは3つ

今回ご紹介の範囲

- Spotサービス
 - ・ジョブ実行スクリプト作成しジョブスケジューラにバッチ処理依頼
- On-demandサービス
 - ジョブスケジューラに計算ノードの確保を依頼し、計算ノードでプログラムを実行。
- Reservedサービス
 - 事前に計算ノードの予約をジョブスケジューラに依頼するサービス
- ・ジョブ実行時に指定が必須なパラメータ
 - 自分が所属するABCIグループ
 - 利用する計算リソースの量

ジョブの実行

- ジョブ計算リソース
 - ジョブが必要とする資源量を資源タイプ名と数量で指定

資源タイプ	資源タイプ名	説明	割り当て物理 CPUコア数	割り当て GPU数	メモリ (GiB)	ローカル ストレージ (GB)	資源タイプ 課金係数
Full	rt_F	ノード占有	40	4	360	1440	1.00
G.large	rt_G.large	ノード共有 GPU利用	20	4	240	720	0.90
G.small	rt_G.small	ノード共有 GPU利用	5	1	60	180	0.30
C.large	rt_C.large	ノード共有 CPUのみ利 用	20	0	120	720	0.60
C.small	rt_C.small	ノード共有 CPUのみ利 用	5	0	30	180	0.20

ABCI参考サイト

より詳細な情報については、以下を参照下さい。

- ABCIユーザサポート https://abci.ai/ja/how_to_use/user_support.html
- ABCI利用に関するFAQ https://abci.ai/ja/how_to_use/yakkan.html
- 利用の手引き https://portal.abci.ai/docs/ja/
- 利用の手引き(ポータル)
 https://portal.abci.ai/docs/portal/ja/