

Cygnus 利用の手引き

計算物理 春の学校 2024
GPU コンピューティング入門 & ハンズオン

はじめに

計算物理 春の学校 2024 の2日目 (3/12) に行われる、「GPU コンピューティング入門 & ハンズオン」では、実習パートで筑波大学計算科学研究センターのスーパーコンピュータ Cygnus を使用します。当日までに本利用の手引きをよく読み、すぐにCygnusを使用できるよう、準備をお願いします。

目次

- ▶ Cygnus の概要 ... p.3
- ▶ ログイン方法 ... p.4
- ▶ 計算の主な流れ ... p.5
- ▶ ジョブスクリプトの書き方 ... p.6
- ▶ バッチリクエストの投入・管理方法 ... p.7
- ▶ 注意事項 ... p.8

Cygnusの概要

- ▶ ピーク性能: 2.5 PFLOPS (倍精度)
- ▶ ノード数: 81 = 32 Albireo (GPU + FPGA) nodes + 49 Deneb (GPU only) nodes
- ▶ ノード構成
 - ▶ メモリ: 192 GiB DDR4-2666, 32 GiB × 4 GPU
 - ▶ CPU: Intel Xeon Gold (SKL) × 2 sockets
 - ▶ GPU: NVIDIA V100 × 4 (PCIe)
 - ▶ FPGA: Intel Stratix10 × 2
- ▶ ファイルシステム: Lustre, RAID6, 2.5 PB
- ▶ 詳しくは <https://www.ccs.tsukuba.ac.jp/supercomputer/>



ログイン方法

▶ ssh 構成ファイルの設定

- ▶ <ホームディレクトリ>/`.ssh/config`
に右の設定を追加 (無ければ新規作成)

▶ ssh 接続する場合

- ▶ ターミナルを起動
- ▶ `ssh cygnus`

(構成ファイルなしの場合: `ssh -l <ユーザ名> -i <秘密鍵のファイル名> cygnus.ccs.tsukuba.ac.jp`)

- ▶ 秘密鍵のパスワードを入力

▶ VS Code で接続する場合

- ▶ VS Code を起動
- ▶ Remote Development 拡張機能をインストール
- ▶ コマンドパレット → Remote-SSH: Connect to Host... → cygnus
- ▶ 秘密鍵のパスワードを入力

Host cygnus

HostName cygnus.ccs.tsukuba.ac.jp

User <ユーザ名>

Port 22

IdentityFile <秘密鍵のファイル名>

ユーザ名: 世話人から各自に通達

秘密鍵のパスワード: 鍵生成時に各自設定済

計算の主な流れ

!!! 計算コードをログインノードで直接実行してはいけません !!!

1. Cygnus にログイン
2. 作業ディレクトリ (/work/EDU5/<ユーザ名>) へ移動
3. コードを準備
 - I. ターミナル上で編集: vim や emacs 等のエディタを使用
 - II. VS Code 上で編集: 接続方法は p.4 参照
4. ジョブスクリプトを準備: 書き方は p.6 参照
5. バッチリクエストを投入: 投入方法は p.7 参照
6. 実行されるのを待つ
7. 結果を確認

ログイン後の初期ディレクトリは通常 /home/EDU5/<ユーザ名>です。左記ディレクトリに移動することを忘れずに!!!

Cygnus上でコードやスクリプトを編集できるようにしておいてください。

ジョブスクリプトの書き方

- ▶ 以下のようなスクリプトを適当なファイル名 (例えば、my_job.sh) で保存

```
#!/bin/sh
#PBS -A EDU5                # グループ名 (今回の実習用、変更不要)
#PBS -q edu-b               # バッチキュー名 (今回の実習用、変更不要)
#PBS -l elapstim_req=0:05:00 # 経過時間制限値 (実行に必要な十分な時間を設定)
#PBS -N my_job              # リクエスト名 (好きなものをつける)

module load python/3.8 cuda/12.3.0 # 必要なモジュールの読み込み

cd ${PBS_O_WORKDIR} # リクエストを投入 (qsub) したディレクトリに移動

<run_your_code> # コードの実行
```

バッチリクエストの投入・管理方法

!!! 実習当日までリクエストを投入することはできません !!!

- ▶ ターミナル上で以下のコマンドを使用
 - ▶ リクエストの投入: `qsub <ジョブスクリプト名>`
 - ▶ リクエスト一覧の表示: `qstat`
 - ▶ リクエストの実行開始予定時間の確認: `sstat`
 - ▶ リクエストの削除: `qdel <リクエストID>`
- ▶ リクエスト終了の確認: `qstat` で表示されなくなる、出力のファイルが作られる
- ▶ サンプルジョブスクリプト
 - ▶ `/work/EDU5/hohno0223/hello_world.sh`

**サンプルジョブスクリプトを各自
コピーして、授業当日に各コマン
ドの使い方を確認**

注意事項

- ▶ 当日までに以下を確認しておいてください
 - ▶ Cygnus へのログイン方法
 - ▶ テキストエディタの使い方
 - ▶ バッチリクエスト関係のコマンドの使い方
 - ▶ その他、事前準備に関する指示
- ▶ 当日の注意点
 - ▶ 分からないことがあれば、手を挙げて質問してください
(数名のチューターが対応します)
 - ▶ **バッチリクエストの投入は一度に1つまでにしてください**
(`qstat` で自分のリクエストがキューにないことを確認してから `qsub`)