# 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
  - $\triangleright$  GPU: NVIDIA V100  $\times$  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 cuda/11.6.2 python/3.8 # 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)