Reedbush Quick Start Guide

東京大学 情報基盤センター

2018年9月21日 改版

目次

1. 目次

- 2. Cygwinインストール(1)
- 3. Cygwinインストール(2)
- 4. 公開鍵の作成
- 5. 利用支援ポータルへのアクセス
- 6. パスワード変更(初回の場合)
- 7. パスワード変更成功画面
- 8. 利用支援ポータルへの再ログイン
- 9. 言語の変更
- 10.公開鍵の登録(1)
- 11.公開鍵の登録(2)
- 12.公開鍵の登録(3)

13.公開鍵の登録(4) 14.ログイン 15.利用可能ディレクトリ 16.プログラムの作成 17.コンパイルと実行 18.バッチスクリプトの作成 19.バッチスクリプト例(1) 20.バッチスクリプト例(2) 21.バッチジョブの実行 22.バッチジョブの削除 23.アプリケーション

※UNIX/Macから利用される方は「4.公開鍵の作成」からお読みください

Cygwinインストール(1)

- Cygwinをインストールします。
 - <u>http://cygwin.com/index.html</u>からsetup-x86_64.exe (32bit版の場合は、 setup-x86.exe)をダウンロードして、実 行します。
 - パッケージの選択画面で、X11の「Default」をクリックし、 「Install」に変更します。

X11の「Default」をクリックします

Cygwin Setup - Select Packag	es /	VV I	П	00	
elect Packages Select packages to install					E
Search Diear	/			○ Keep (0)	Curr 🕞 Exp 🛛 Yiew Category
Category Current	New	Bin?	Src?	Size	Package ^
🗉 Sugar 🚯 Default					
🗉 System 🚯 Default					
🗉 Tcl 🚯 Default					
🖽 Text 🚱 Default					
🖽 Utils 🚯 Default					
🗉 Video 🖓 🖉 fault					
🗉 Web 💔 Default					
🖃 X11 🚱 Default					
	Skip	nja	nfa	248k	adobe-source-code-pro-fonts: Ad
	Skip	nja	nfo	479k	adobe-source-sans-pro-fonts: Ad
	Skip	nja	nfa	198k	adobe-source-serif-pro-fonts: Ad-
	Skip	nja	nía	29k	aewm++: A minimal window manae
	Skip	nja	nía	52k	aewm++-goodies: Utilities to comp
	Skip	nja	nfa	72k	alef-fonts: Multi-lingual screen for
	Skip	nja	nfa	12k	appres: X.Org application resource
	Skip	nja	nfa	843k	arimo-fonts: Noto fonts
	🚯 Skip	nja	nfa	138k	artwiz-aleczapka-fonts: Improved
0189-1	€ Keen	nin		คณ	st-mill-mma AT-SPI/D-Rum ragis
Hide obsolete packages					,
				< 戻る(B)) (たへ(N)) キャンセル

「Install」に変わり、各パッケージ がインストール対象になります

			Keep (0)	Curr CEp View Category
New	Bin?	Src?	Size	Package
1.017-2	\times		248k	adobe-source-code-pro-fonts: Ad
1.050-2	\times		479k	adobe-source-sans-pro-fonts: Ad
1.017-1	\times		198k	adobe-source-serif-pro-fonts: Ad
1.1.2-2	\times		29k	aewm++: A minimal window manag
1.0-2	\times		52k	aewm++-goodies: Utilities to comp
49 1.0-2	\times		72k	alef-fonts: Multi-lingual screen for
49 1.0.4-1	X		12k	appres: X.Org application resource
🚱 20160601-1git 165832a	\times		843k	arimo-fonts: Noto fonts
1.3-2	\times		138k	artwiz-aleczapka-fonts: Improved
@Keen	nío.		616	st-oni?-core AT-SPI/D-Ruo read
	New © 1017-2 © 1050-2 © 1017-1 © 112-2 © 10-2 ©	New Bin? \$\overline{0}\$1017-2 \$\vee{2}\$ \$\overline{0}\$1050-2 \$\overline{0}\$ \$\overline{0}\$1050-2 \$\overline{0}\$ \$\overline{0}\$112-2 \$\overline{0}\$ \$\overline{0}\$10-2 \$\overline{0}\$ \$\overline\$\$100000000000000000000000000000000	New Bin? Sec? \$\overline{1}1017-2 \$\overline{2}\$ \$\overline{1}0567-2 \$\overline{1}0567-2 \$\overline{1}017-1 \$\overline{1}017-1	New Bin? Src? Size \$\overline{1}1017-2 \$\overline{2}\$ \$\overline{2}48\$

Cygwinインストール(2)

OpenSSHを検索して、クリックして、「Skip」から、 インストール対象に変更します。

Select packages to install		E
arch open≱sh	\leftarrow	🔿 Keep 💿 Durr 🔿 Exp 🛛 Mew Dategory
Category Current All ⊕ Default ⊞ Debug ⊕ Default El Net ⊕ Default	New	Bin? Src? Size <u>Parkage</u>
72p2-1	⊕ 72p1-1	⊠

___1. Opensshを検索

2. クリックすると、チェックボック
 スがSkipからチェックドボックスに
 変更されます。

公開鍵の作成

- CygwinのCygwin64 Terminal (Windowsの場合)、
 Terminal端末 (UNIX/Macの場合)を開きます。
- ssh-keygenコマンドを実行します。
 - ホームディレクトリ/.sshに公開鍵(id_rsa.pub)、秘密鍵 (id_rsa)が作成されます。

<pre>\$ ssh-keygen -t rsa Generating public/private rsa key pair. Enter file in which to save the key (/home/username/.ssh/id_rsa): Created directory '/home/username/.ssh'. Enter passphrase (empty for no passphrase): Enter same passphrase again: Your identification has been saved in /home/username/.ssh/id_rsa. Your public key has been saved in /home/username/.ssh/id_rsa.pub. The key fingerprint is: SHA256:NedyH2JayWknqq87pQlvaLVs3omJK2ZijB8iR9Qnwf4 username@host The key's randomart image is: +[RSA 2048]+ </pre>	 1. ssh-keygenを実行 2. Enter入力 3. パスフレーズ入力 4. パスフレーズ再入力
+[SHA256]+ \$	4

利用支援ポータルへのアクセス

- ブラウザで、以下のサイトへアクセスしてくだ さい。
 - https://reedbush-www.cc.u-tokyo.ac.jp
- 利用支援ポータルにログインします。



パスワード変更(初回の場合)

- 初回ログイン時は、パスワードの変更が必要です。
- 以下の条件で、パスワードを変更してください。
 - ・ 8文字以上であること
 - 英大文字、英小文字、特殊記号(\$,#,&,+,-など)、数字をそれぞれ1文字以上含むこと
 - ・ 辞書単語ではないもの
 - 現在のパスワードとは異なるもの

ファイル(E) 編集(E)	表示(⊻) お気	に入り(A) ツール(I) ヘルプ(H)		
	Your	password has expired, and a new one m バスワードを変更してください。	iust be chosen.	
		Select New Password Password Policy(パスワードの条件) -more than 8 characters(8文字以上) -the use of both upper-case and lower-case in numerical digits, special characters, such as -(英大文字、英小文字、数字、@, #, ダなどの特 をそれぞれ1文字以上含むこと) -no dictionary word(辞書単語ではないこと) -no old and older password(前回、前々回と同い -ドではないこと) Username z30405	etters, @,#,\$ 殊記号 ンパスワ	
		Current password	← 1. 現在の < 2. 新しし	ッパスワードを入 ッパスワードを入

パスワード変更成功画面

- パスワード変更に成功すると、以下の画面になります。
- 「ログイン画面に戻る」をクリックしてください。



また、失敗した場合は、再度ログイン画面に戻って、やり直して下さい。

利用支援ポータルへの再ログイン ・変更した新しいパスワードでログインしてください。





- 「Change Language」で表示言語を変更します。
- プルダウンメニューから「Japanese(JA_JP.UTF-8)」を選択し、「Change」をクリックします。
- ブラウザをリロードすると、メニューが日本語に変更されます。







「公開鍵アップロード」のメニューにアクセスします。

(=) (=) https://192.8	22.185.13/ 🔎 🗸 ② 証明書 🗟 🖒 🌈 Reedbush Portal 🗙 🛛 🏠 ☆ 磁
ファイル(E) 編集(E) 表	示(⊻) お気に入り(<u>A</u>) ツール(I) ヘルプ(H)
Login: testb	######################################
Change Language	Reedbush-u will be in maintenance at 2016/08/01
System Information グループ管理	9:00 am - 17:00 pm system maintenance time
利用の手引き <u>パフロードの亦更</u> 公開鍵アップロード	software version up hardware diagnotics
● ログアウト	1. 「公開鍵アップロード」をクリック

- 初回時は公開鍵が登録されていないため、「No authorized keys have been registered」と表示されます。
- 「公開鍵を追加」をクリックします。

<	s://reedbush-www ♀ 😒 証明書	B → @ Reedbush Portal ×	
ファイル(<u>E</u>) 編集(<u>E</u>) 表	長示(⊻) お気に入り(<u>A</u>) ツール(I) ^	∨レプ(圧)	
Login: testb	モジュール インデック ス	登録済み公開鍵	^
Change Language System Information グループ管理 利用の手引き パスワードの変更 公開鍵アップロード ④ ログアウト	No authorized keys have been re 公開鍵を追加	^{egistered.} 2. 「公開鍵を追加」	をクリック



• 公開鍵作成の画面が表示されます。

ノアドロル(E) 福集(E) 3	$\alpha_{\mathcal{N}}(\underline{\mathbf{x}}) = \alpha_{\mathcal{N}}(\underline{\mathbf{x}}) = \alpha_{\mathcal{N}}(\underline{\mathbf{x}}) = \alpha_{\mathcal{N}}(\underline{\mathbf{x}}) = \alpha_{\mathcal{N}}(\underline{\mathbf{x}}) = \alpha_{\mathcal{N}}(\underline{\mathbf{x}})$	1/	
Login: testa	モジュール インデック ス	公開鍵作成	
Change Language System Information グループ管理 利用の手引き パスワードの変更 公開鍵アップロード ② ログアウト	Key digits		
	作成 本 Key Listに戻る		

端末のターミナルで、作成した公開鍵(ホームディレクトリの.ssh/id_rsa.pub)をコピーします。



公開鍵の登録(3)

- この鍵を「Key digits」に貼り付けます。
 - 貼り付ける前に、改行コードが含まれていないかご確認ください。(メ モ帳などに一旦ペーストする方法があります。)
- 鍵の形式が「ssh-rsa 文字列 鍵の名前(通常はユーザ名@ホスト名)」であることを確認してください。



改行文字や全角文字が含まれていないこと、ヘッダ(ssh-rsa、ssh-dss)が付与されていることを確認してください。 RSA公開鍵は2048bit、DSA公開鍵は1024bit以上で作成してください。 12

公開鍵の登録(4)

- 「登録済み公開鍵」に登録されていることを確認します。
- 鍵の形式が間違っている場合は「No authorized keys have been registered」というメッセージが表示され ます。

← → @ https://reedb	ush-www.cc.u-tol 🔎 👻 証明書	の 習→ 🧔 Reedbush Portal	×	□ × ↑ ☆ ☆
ファイル(E) 編集(E) 表示	⊼(⊻) お気に入り(<u>A</u>) ツール(I)	ヘレプ(<u>H</u>)		
Login: testa	モジュール インデック ス	登録済み	公開鍵	^
Change Language	公開鍵を追加			
System Information	Key Name Key Digits			
クループ管理	testa@cent1 AAAAB3NzaC1	yc2EAAAABIwAAAQEAvwlne7UPdGNJ .	uvvphwtxKI6yj3dVk42Fy8MwE7VhnzMXrZzy+w==	
パスワードの変更	公開鍵を追加			
公開鍵アップロード ④ ログアウト				
				~

ログイン

- 端末のターミナルから、sshコマンドを使用して、フロントエンドにログインします。
- ログイン先:reedbush.cc.u-tokyo.ac.jp

% ssh -l username reedbush.cc.u-tokyo.ac.jp Authenticating with public key ″rsa-key-20160612″ The authenticity of host 'localhost (::1)' can't be established. RSA key fingerprint is XX:XX:XX:XX:XX:XX:XX:XX:XX:XX:XX:XX: Are you sure you want to continue connecting (yes/no)? yes	
Warning: Permanently added 'localhost' (RSA) <u>to the list of kn</u> own hosts. Passphrase for key ""rsa-key-20160612": [username@reedbush-u1]]# 2. パスフレーズを入力	

利用可能ディレクトリ

- /home/グループ名/ユーザ名
 - ログイン時は最初にここに入ります
 - ログイン用環境設定ファイルなど
 - 最大2GB
 - 計算ノードではマウントしていないため、バッチでは利用できません。
- /lustre/グループ名/ユーザ名
 - 計算用領域
 - [申請ノード数]TB(グループコース) ※4ノードのコースで申請した場合は4TB、8ノードのコースで申請した場合は 8TBとなります。
 - 1TB(パーソナルコース)
 - プログラムの作成、実行などはこちらのディレクトリを利用して
 ください。

プログラムの作成

- デフォルト開発環境
 - Intel C,C++,Fortran Compiler
 - Intel MPI
 - moduleコマンドで切り替えることができます。
- moduleコマンド
 - コンパイラ、MPIなどを切り替えることができます。
 - バッチスクリプトにおいてロードするmoduleは、コンパイル時と同様のものをロードしてください。

現在のmodule環境を表示

\$ module list

Currently Loaded Modulefiles:

1) intel/16.0.3.210 2) intel-mpi/5.1.3.210

moduleのロード(バッチジョブでは、コンパイル時と同じものをロード) \$ module load intel/16.0.3.210 intel-mpi/5.1.3.210

コンパイルと実行

- コンパイルと実行
 - シリアルジョブ(Intel Compiler)
 - icc、ifort
 - 並列計算(Intel MPI)
 - mpiicc、mpiifort

実行例 \$ mpiicc -o a.out -O2 mpiprogram.c \$ mpirun -np 2 ./a.out Hello World from Process 0 of 2 running on reedbush-u1 Hello World from Process 1 of 2 running on reedbush-u1

バッチスクリプトの作成

- Lustre領域に移動して、バッチスクリプトを作成します。
- 以下の記述が必要です。
 - #!/bin/sh
 - #PBS -q [キュー名]
 - #PBS -l select=[ノード数]:mpiprocs=[ノードあたりのmpi 数]:ompthreads=[MPIプロセスあたりのスレッド数]
 - #PBS -W group_list=[グループ名]
 - #PBS -I walltime=[wall time]
 - cd \$PBS_O_WORKDIR (カレントディレクトリで実行)
 - [moduleの初期化]
 - [プログラミング環境のロード]
 - [プログラム実行]
- オプション(こちらは必要に応じて使用してください。)
 _ #PBS -N [ジョブ名]

バッチスクリプト例(1)

- 必ず、/lustreの領域で作成・実行してください。
- 赤字の部分はrun.shというバッチスクリプトです。
- 実行時間、並列数など必要なリソースのキューを選んでください。

		-	
シングルジョブ例 	キュー名	並列数 (ノード数)	実行時間
<pre>\$ cd /lustre/group/username \$ cat ./run.sh #!/bin/sh #PBS -q u-short #PBS -l select=1:mpiprocs=1:ompthreads=1 #PBS -W group_list=mygroup #PBS -I walltime=02:00:00 cd \$PBS_O_WORKDIR . /etc/profile.d/modules.sh</pre>	u-debug	1-16	30min
	(u-interactive)	-	-
	u-interactive_1	1	30min
	u-interactive_4	2-4	10min
	u-short	8	4H
	(u-regular)	-	-
module load intel/16.0.3.210 ./a.out > ./output.log 2>&1	u-small	4-16	48H
	u-medium	17-32	48H
			l

ノードあたり244GB以上のメモリを使用した場合、 ジョブがアボートしますので、ご注意ください。

48H

24H

u-large

u-x-large

33-64

65-128

バッチスクリプト例(2)

- 赤字の部分はrun.shというバッチスクリプトです。
- 実行時間、並列数など必要なリソースのキューを選んでください。

256MPI並列ジョブ例 (8ノードx32プロセス)

\$ cd /lustre/group/username \$ cat ./run.sh #!/bin/sh #PBS -q u-short #PBS -l select=8:mpiprocs=32:ompthreads=1 #PBS -W group_list=mygroup #PBS -l walltime=02:00:00 cd \$PBS_O_WORKDIR . /etc/profile.d/modules.sh module load intel/16.0.3.210 intel-mpi/5.1.3.210 mpirun ./a.out > ./output.log 2>&1 ハイブリッド並列ジョブ例 (8ノードx2プロセスx18スレッド)

\$ cd /lustre/group/username \$ cat ./run.sh #!/bin/sh #PBS -q u-short #PBS -l select=8:mpiprocs=2:ompthreads=18 #PBS -W group_list=mygroup #PBS -l walltime=02:00:00 cd \$PBS_O_WORKDIR . /etc/profile.d/modules.sh module load intel/16.0.3.210 intel-mpi/5.1.3.210 mpirun ./a.out > ./output.log 2>&1

ノードあたり244GB以上のメモリを使用した場合、 ジョブがアボートしますので、ご注意ください。

バッチジョブの実行

• バッチスクリプトをqsubコマンドで投入します。



バッチジョブの状況はrbstatコマンドで確認できます。
 – 例

\$ rbsta	t							
JOB_ID	JOB_NAME	STATUS PR	ROJECT	QUEUE	START_DATE	ELAPSE	TOKEN	NODE
123	STDIN	RUNNING xx	XXX	u-short	06/27 19:56:41	00:00:00	0.0	1
124	STDIN	QUEUED xx	XXX	u-short	06/27 19:56:48	00:00:00	0.0	1

 – S(Status) がRUNNINGの場合は実行中、QUEUEDの場合は待機 状態です。

バッチジョブの削除

- バッチジョブの削除は、qdelコマンドを使用します。
 \$ qdel ジョブID
- 実行例

\$ rbstat								
JOB_ID	JOB_NAME	STATUS PROJE	CT QUEUE	START_DATE	ELAPSE	TOKEN	NODE	
123	STDIN	RUNNING xxxx	u-short	06/27 19:56:41	00:00:00	0.0	1	
124	STDIN	QUEUED xxxx	u-short	06/27 19:56:48	00:00:00	0.0	1	
_								
\$ qdel 124								
ć do stat								
\$ rbstat							NODE	
JOB_ID	JOB_NAME	STATUS PROJE		START_DATE	ELAPSE	IUKEN	NODE	
123	SIDIN	RUNNING XXXX	u-short	06/27 19:56:41	00.00:00) 0.0	I	

アプリケーション

- 使用可能なアプリケーションはmoduleコマンドで確認できます。
- 使用するアプリケーションをロードしてください。

\$ module avail				
/lustre/app/modulefiles/compiler				
intel/16.0.3.210(default) pgi/16.5				
/lustre/app/modulefiles/mpi				
hpcx/1.6.392/gnuhpcx/3.3-1.0.0.0/intel_ucxmvapich2/2.2rc1/intelopenmpi/1.4.5/intelhpcx/1.6.392/intelintel-mpi/5.1.3.210(default)mvapich2/2.2rc1/pgiopenmpi/1.8.3/gnuhpcx/3.3-1.0.0.0/gnumpt/2.14openmpi/1.10.2/gnuopenmpi/1.10.2/intelhpcx/3.3-1.0.0.0/gnu_ucxmvapich2/2.1.ddn1.3/gnuopenmpi/1.10.2/intelhpcx/3.3-1.0.0.0/intelmvapich2/2.2rc1/gnuopenmpi/1.10.2/pgi				
/lustre/app/modulefiles/lib				
boost/1.61mt-metis/0.4.4openjdk/1.8.0.91-0.b14 revocap_coupler/2.1superlu_mt/3.1gsl/2.1netcdf-c/4.4.0parallel-netcdf/1.7.0revocap_refiner/1.1.01xabclib/1.03massivethreads/0.95netcdf-cxx/4.3.0parmetis/4.0.3scotch/6.0.4metis/4.0.3netcdf-fortran/4.4.4petsc/3.7.1superlu/5.2.0metis/5.1.0opencv/3.1.0ppohAT/1.0.0superlu_dist/5.1.0				
/lustre/app/modulefiles/application				
abinit-mp/7.0 bwa/0.7.13 gatk/3.5 openfoam/3.0.1 samtools/1.3.1 akaikkr/cpa2002v009c feram/0.24.02 gromacs/5.1.2 openfoam/3.0.1-mpt spark/1.6.1 alps/2.1.1-r6176 frontflow_blue/8.1 kmr/1.8.1 openmx/3.8 xtapp/150401 bioperl/1.6.924 frontflow_blue/8.1_gnu modylas/1.0.4 phase0/2015.01 bioruby/1.5.0 frontistr/4.4 ncbi-blast/2.3.0 r/3.2.5				
\$ module load opentoam/3.0.1				



2016年06月30日	初版	
2016年07月01日	改版	 P.10 公開鍵の貼り付けの際に改行コードに気を付ける旨追記 Safariではなく、FirefoxもしくはInternet Explorerでの使用を推奨 P.13 グループコースのディスク容量について修正 P.17 キュー設定の実行時間を試験運用期間設定に変更 試験運用期間の設定である旨追記 P.17 #PBS -W group_list=mygroupを修正 P.18 #PBS -W group_list=mygroupを修正
2016年07月04日	改版	P.10 Safariが利用できるようになったため、Safari非推奨を削除
2016年09月01日	改版	P.6~8 初回ログイン時のパスワード変更を挿入 P.19 キュー設定の実行時間を本運用期間設定に変更 P.23 モジュールコマンドの出力を更新
2016年09月26日	改版	P.18 #PBS -I select行修正
2017年04月28日	改版	P.12 公開鍵の注意事項追記 P.14 ログインホスト先の修正 P.15 グループコースのLustre容量修正
2018年09月21日	改版	P.19 u-debugの最大ノード数変更