

Использование кластера НГУ

Общая информация

Адрес кластера в сети НГУ: 10.4.6.10.

Адрес кластера в сети Интернет: clu.nusc.ru.

Документация по использованию кластера: nusc.nsu.ru

Доступ к кластеру по паролю возможен только из сети НГУ (например, с сервера ccfit.nsu.ru). Логины в списке с отметками о сдаче практических заданий, пароль у преподавателя. При первом заходе вам предложат сменить пароль.

Чтобы заходить на кластер не из сети НГУ, можно настроить доступ к кластеру по ключу. Как это сделать, описано ниже.

Команда `scp` на кластере не работает. Копировать файлы с кластера и на кластер можно только снаружи (например, с использованием `scp` из Linux или WinSCP из Windows).

Ресурсы кластера

В состав кластера входят много узлов разных видов. Список узлов: [Аппаратное обеспечение](#). Каждому типу узла соответствует своя очередь задач. Список очередей: [Очереди задач](#).

Доступ имеется не ко всем очередям и типам узлов. Для целей спецкурса нас интересуют следующие узлы кластера:

- 2-socketные сервера HP BL2x220c G7, 12 ядер, 24 ГБ ОЗУ. Название соответствующей им очереди: **bl2x220g7q**. Процессор: Intel Xeon X5670. Страница со статистикой использования сервера здесь: [Ganglia: Gen7](#).
- 2-socketные сервера HP XL230a Gen9, 24 ядра, 192 ГБ ОЗУ. Название соответствующей им очереди: **xl230g9q**. Процессор: Intel Xeon E5-2680v3. Страница со статистикой использования сервера здесь: [Ganglia: Gen9](#).
- 4-socketный сервер с общей памятью HP DL580 G5, 16 ядер, 128 ГБ ОЗУ. Процессор: Intel Xeon 7350. Имя сервера: `vkop`. Название соответствующей ему очереди: **vkopq**. Страница со статистикой использования сервера здесь: [Ganglia: vkop](#).

Чтобы на кластере под данным аккаунтом использовать MPI, нужно сначала выполнить определённую настройку с помощью программы `mpi-selector`. Подробности здесь: [использование MPI](#).

Чтобы на кластере под данным аккаунтом использовать компиляторы Intel (`icc`, `icpc`), нужно в конец файла `~/ .bashrc` добавить команду:

```
source /opt/intel/composer_xe_2015.2.164/bin/compilervars.sh intel64
```

После этого необходимо открыть новую терминальную сессию.

Чтобы запускать программы на узле `vkop`, необходимо их там же и компилировать. Это вызвано тем, что на управляющем узле и на узле `vkop` стоят разные версии операционной системы.

Запуск задач на кластере

Команды для работы с системой очередей кластера:

- `qsub run.sh` – поставить задачу в очередь на исполнение. Здесь `run.sh` – имя скрипта запуска. В результате задача получает идентификатор (число), который выводится в консоль. Во время работы задачи её стандартные потоки вывода и ошибок перенаправляются в файлы `run.sh.o###` и `run.sh.e###`, где `###` - идентификатор задачи.
- `qdel ###` – удалить задачу с идентификатором `###` из очереди.
- `qstat` – посмотреть список задач в очереди.
- `qstat -f ###` – посмотреть подробную информацию о задаче `###`.
- `qfree` – посмотреть список свободных ресурсов кластера.

Пример скрипта для запуска программы `./myprog` на узле `vkor`:

```
#!/bin/sh
#PBS -q bl2x220g7q
#PBS -l walltime=00:01:00
#PBS -l select=1:ncpus=12
#PBS -N my_task
cd $PBS_O_WORKDIR
./myprog
```

Строки, начинающиеся с `#PBS` – это команды системы очередей. Остальные строки – обычные команды shell. Расшифровка содержимого скрипта запуска:

- `#PBS -q bl2x220g7q` – задание очереди: `bl2x220g7q` с 12-ядерными узлами
- `#PBS -l walltime=00:01:00` – задание максимального времени работы задачи: 1 минута
- `#PBS -l select=1:ncpus=12:mem=2000m` – задание требуемых ресурсов:
1 узел, 12 ядер на узел, 2000 МБ памяти на узел
- `#PBS -N my_task` – задание имени задачи: `my_task` (не обязательно)
- `cd $PBS_O_WORKDIR` – переход в рабочий каталог
- `./myprog` – запуск программы пользователя

Для пользователей существуют ограничения на число выделяемых узлов и ядер. Если превысить ограничение или запросить больше ресурсов, чем имеется в узле, то задача не запустится.

Если запросить число ядер на узел (`ncpus`) меньше, чем имеется ядер в узле, то возможна одновременная работа нескольких задач на одном узле, что может сказаться на времени работы программы.

Пример настройки доступа к кластеру по ключу

1. Зайдя на кластер, сгенерируйте пару ключей SSH, например, так:

```
$ ssh-keygen -t rsa -b 4096 -C "username@clu.nusc.ru" -f keyfilename
```

При желании введите пароль ключа (passphrase). В результате будут созданы файлы:
 - `keyfilename` – текстовый файл с секретным ключом
 - `keyfilename.pub` – текстовый файл с открытым ключом
2. Добавьте полученный открытый ключ в конец файла `~/.ssh/authorized_keys`. Осторожно, не затрите имеющееся содержимое этого файла! Иначе из-под данного аккаунта многое перестанет работать, в том числе MPI.

```
$ cp ~/.ssh/authorized_keys ~/.ssh/authorized_keys.saved  
$ cat keyfilename.pub >> ~/.ssh/authorized_keys
```
3. Скопируйте файл с секретным ключом на свою машину.
4. Из Linux-консоли можно заходить на кластер следующим образом:

```
$ ssh -i keyfilename username@clu.nusc.ru
```
5. Для входа на кластер через Putty необходимо сначала преобразовать секретный ключ в формат `ppk`:
 - a. Запустите программу `puttygen.exe`
 - b. Выберите в меню «Conversions» → «Import Key».
 - c. В открывшемся диалоговом окне выберите файл `keyfilename` с секретным ключом.
 - d. При желании введите пароль ключа (passphrase).
 - e. Нажмите кнопку “Save private key”.
 - f. В открывшемся диалоговом окне введите имя файла, можно старое `keyfilename`. В результате будет создан файл `keyfilename.ppk`Полученный файл с секретным ключом `keyfilename.ppk` можно использовать в программах Putty, WinSCP.