

# SERVER HPC DEL DIPARTIMENTO DI MATEMATICA E FISICA DELL'UNIVERSITA' DEGLI STUDI DELLA CAMPANIA LUIGI VANVITELLI

## REGOLAMENTO PER L'ACCESSO AL SERVER E ISTRUZIONI DI BASE PER L'USO 21 dicembre 2020

### 1. BREVE DESCRIZIONE DEL SERVER HPC

Il server HPC del Dipartimento di Matematica e Fisica (DMF) dell'Università della Campania Luigi Vanvitelli, è un SuperServer 7089P-TR4T di Supermicro, composto da una blade dedicata allo storage e otto blade in cui sono alloggiati CPU, RAM e acceleratori GPU. È un sistema shared-memory fisicamente separato in moduli, ma presentato al sistema operativo come un'entità unitaria, il cui hostname è *magicbox*. Le risorse computazionali sono quindi viste come un unico nodo di calcolo. È composto da

- n. 8 CPU Intel Xeon Platinum 8168 2,7Ghz, 33MuB cache memory L3, 24 core, 48 threads;
- n. 8 schede Nvidia P100 con 16GB di memoria RAM on-board;
- n. 48 banchi di memoria RAM a 2666 MHz da 32 GB per un totale di 1536GB.

Lo spazio di archiviazione è composto da due dischi SSD da 480 GB configurati in RAID 1, dedicati al sistema operativo, e da un gruppo di quattro dischi da 960 GB configurati in RAID 6, dedicati all'archiviazione dei dati.

Il sistema operativo installato è Linux CentOS 7.5.

### 2. RICHIESTA DELLE CREDENZIALI PER L'ACCESSO AL SERVER

La richiesta delle credenziali di accesso a magicbox va fatta inviando una mail al Responsabile Tecnico del Servizio di Informatica e Calcolo del DMF, Dott. Stefano Angelone (stefano.angelone@unicampania.it). L'accesso può essere di utenti singoli o di gruppi di ricerca; nel primo caso, la richiesta deve essere fatta direttamente dall'utente, nel secondo va presentata dal responsabile del gruppo o del progetto di ricerca per cui si richiede l'accesso, che deve indicare il numero di account di cui richiede l'attivazione, giustificandone il numero. Per i dottorandi, gli assegnisti, i borsisti e i tesisti, la richiesta delle credenziali va controfirmata dal relatore della tesi o dal tutor.

Nella richiesta vanno specificati, utilizzando il modulo disponibile sul sito del DMF, all'URL <https://www.matfis.unicampania.it/dipartimento/strutture-del-dipartimento/laboratori#magicbox-server-per-il-calcolo-ad-alte-prestazioni>

1. nome e cognome (per ogni singolo account);
2. ruolo, ente e dipartimento di appartenenza (per ogni singolo account);

3. email (per ogni singolo account);
4. contatto telefonico (per ogni singolo account);
5. motivazioni per cui si richiede l'uso del server (breve descrizione delle finalità del progetto scientifico per cui si richiede l'uso, con indicazione del nome del progetto, del responsabile scientifico e dell'ente finanziatore);
6. periodo per il quale è previsto l'uso dell'attrezzatura;
7. stima del tempo di uso (tempo per singolo run e tempo totale).

Vanno inoltre dichiarati

8. l'impegno a rispettare i termini e le condizioni di uso del server stabiliti nel presente documento;
9. l'impegno a introdurre nei lavori scientifici per i quali è stato utilizzato il server, anche solo per indagini preliminari, un acknowledgment del tipo "This work has been performed by using the computing resources operated by the Department of Mathematics and Physics of the University of Campania "Luigi Vanvitelli", Caserta, Italy, within the VALERE Program."

La richiesta sarà vagliata da un apposito Comitato di Gestione dell'attrezzatura, con il parere vincolante del Responsabile Scientifico. In caso di un numero di richieste non sostenibile, sarà data priorità alle richieste per attività in collaborazione con gruppi del DMF.

In caso di approvazione della richiesta da parte del Comitato di Gestione, saranno generate le credenziali di accesso e la username sarà comunicata al richiedente via email. **La password, da utilizzare solo per il primo accesso, come spiegato nel paragrafo 3, deve essere ritirata personalmente dal richiedente** presso l'ufficio del Servizio di Informatica e Calcolo (DMF, Viale A. Lincoln 5, 81100 Caserta) nell'orario di apertura al pubblico; in caso di impossibilità a recarsi presso l'ufficio suddetto, **il richiedente può ottenere la password anche telefonando al Responsabile del Servizio di Informatica e Calcolo al numero e nell'orario che saranno forniti al momento della comunicazione della username.**

**Le credenziali sono personali e devono essere utilizzate esclusivamente dall'utente a cui sono state assegnate, nel pieno rispetto delle regole stabilite nel presente documento, pena la disattivazione del corrispondente account.**

### 3. ACCESSO

#### 3A. ACCESSO CON SSH E PASSWORD (SOLO PER IL PRIMO ACCESSO)

Il primo accesso al server avverrà mediante protocollo ssh con password, come di seguito specificato:

- a) dall'esterno verso un front-end denominato *magicgate*: **ssh -p 1752 usernamemagicgate@193.206.101.248**
- b) dal front-end *magicgate* verso il server *magicbox*: **ssh usernamemagicbox@10.224.90.72**

Su ciascuna macchina la password si può cambiare con il comando *passwd*. Comunque, per motivi di sicurezza, l'utente dovrà generare la coppia di chiavi ssh nel modo specificato nel paragrafo 3B e, a partire dal secondo accesso, dovrà utilizzare la coppia di chiavi SSH. Il Responsabile Tecnico del Servizio di Informatica e Calcolo provvederà alla disattivazione dell'accesso con password dopo il primo accesso dell'utente.

### **3B. ACCESSO CON COPPIE DI CHIAVI SSH (RICHIESTO A PARTIRE DAL SECONDO ACCESSO)**

L'utente dovrà collegarsi al server utilizzando **due coppie di chiavi ssh diverse, ciascuna con passphrase**, rispettivamente per i seguenti accessi:

- c)** da una macchina esterna (ad es. il proprio PC) a magicgate;
- d)** da magicgate a magicbox.

Per generare, installare e utilizzare la **coppia c)**, si può procedere come di seguito specificato.

#### **c.1) Sistemi linux e macintosh, dalla finestra terminale (xterm):**

##### **Generazione della coppia di chiavi**

```
[username@myhost~]$ ssh-keygen -t rsa
Generating public/private rsa key pair.
Enter file in which to save the key (/home/username/.ssh/id_rsa):
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:
.....
The key's randomart image is:
.....
```

##### **Copia della chiave pubblica su magicgate**

```
ssh-copy-id -i ~/.ssh/id_rsa.pub -p 1752 usernamemagicgate@193.206.101.248
```

### Accesso a magicgate

```
ssh -i .ssh/id_rsa -p 1752 usernamemagicgate@193.206.101.248
```

### c.2) Sistemi windows, ad esempio attraverso l'app PowerShell

L'app, disponibile in Windows 10 dal 2016 è stata utilizzata su pc con sistema operativo Windows 10 Home Edition e Pro

#### Generazione della coppia di chiavi

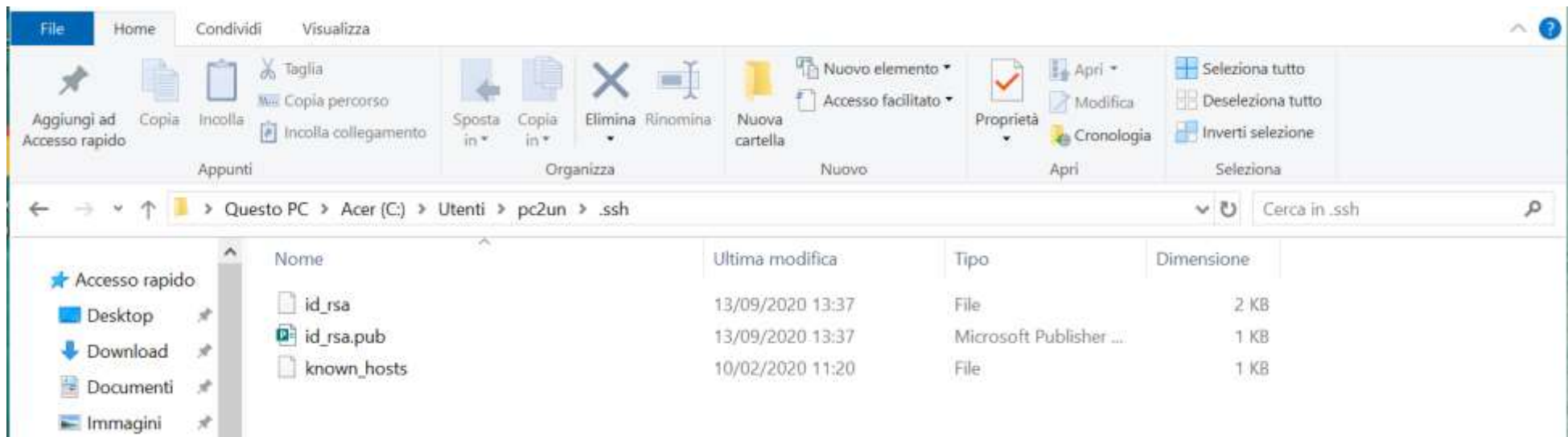
```
PS C:\Users\username> ssh-keygen.exe
Generating public/private rsa key pair.
Enter file in which to save the key (C:\Users\username/.ssh/id_rsa):
Enter passphrase (empty for no passphrase):
Enter same passphrase again:
Your identification has been saved in C:\Users\username/.ssh/id_rsa.
Your public key has been saved in C:\Users\username/.ssh/id_rsa.pub.
The key fingerprint is:
.....
The key's randomart image is:
.....
```

#### Copia della chiave pubblica su magicgate

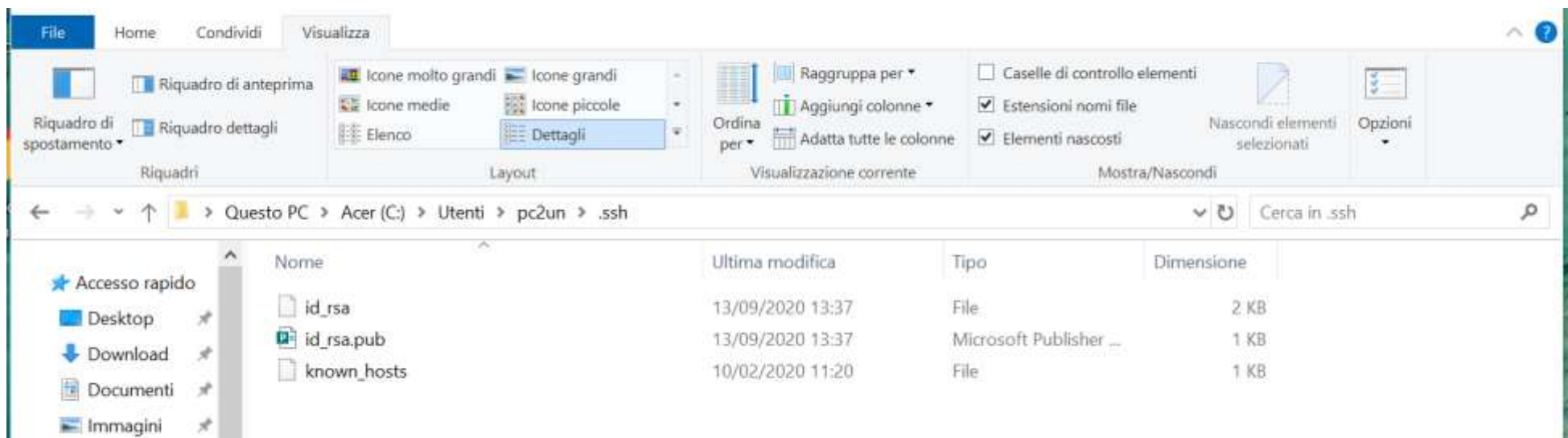
La coppia di chiavi è salvata nella cartella C:\Users\*username*\.ssh raggiungibile attraverso il percorso

*Questo PC > Disco (C:) > Utenti > username > .ssh*

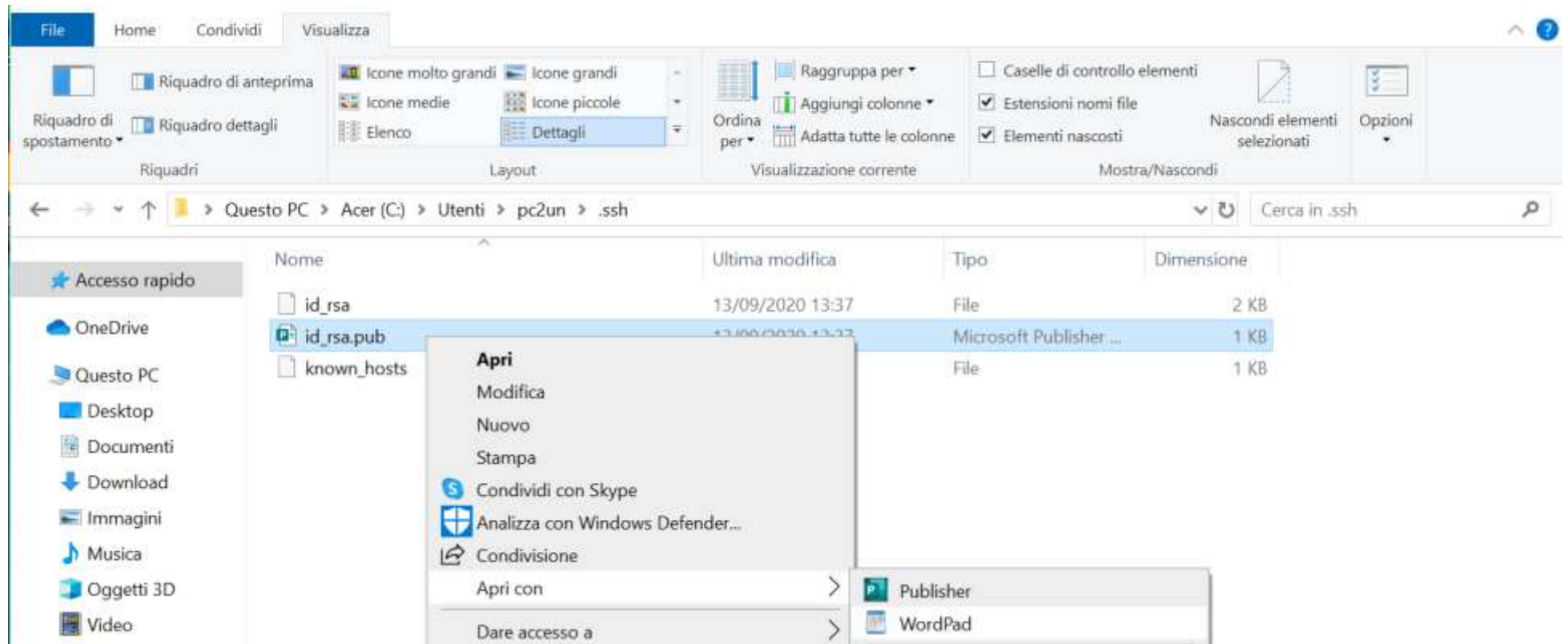
Il procedimento, su pc con sistema operativo Windows 10 Home Edition e Pro, è illustrato di seguito, dove *Disco (C:)* è sostituito con *Acer (C:)* e *username* è sostituito da *pc2un*.



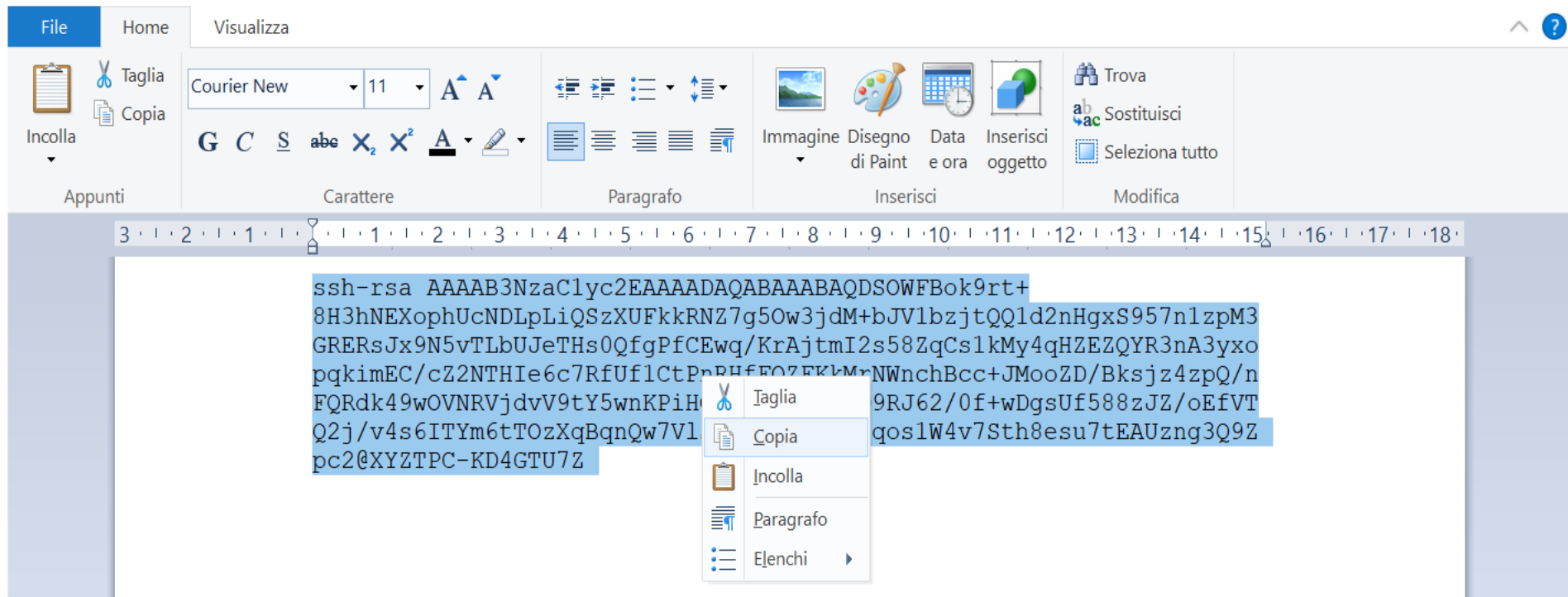
La cartella `.ssh` potrebbe non essere visibile, in quanto cartella nascosta; in tal caso basta selezionare il tab *Visualizza* dalla barra dei menu e spuntare le caselle di controllo *Estensioni nomi file* ed *Elementi nascosti*:



Al suo interno si trova il file *id\_rsa.pub* (chiave pubblica), che per la sua estensione *.pub* viene automaticamente associato al programma Microsoft Publisher; selezionare tale file e, con il *tasto destro* del mouse, selezionare *Apri con* e poi *WordPad* (non selezionare *Publisher*):



Selezionare e copiare negli *appunti* tutto il testo contenuto:



In PowerShell non esiste la funzione `ssh-copy-id` (disponibile invece in ambiente linux e macintosh) e quindi è necessario copiare manualmente la chiave pubblica nel file `~/.ssh/authorized_keys` del server magicgate, se il file non esiste, crearlo. Sempre con l'app PowerShell, collegarsi a magicgate come indicato successivamente, aprire con l'editor preferito il file `~/.ssh/authorized_keys`, incollare nel file il contenuto degli *appunti* e uscire.

### Accesso a magicgate

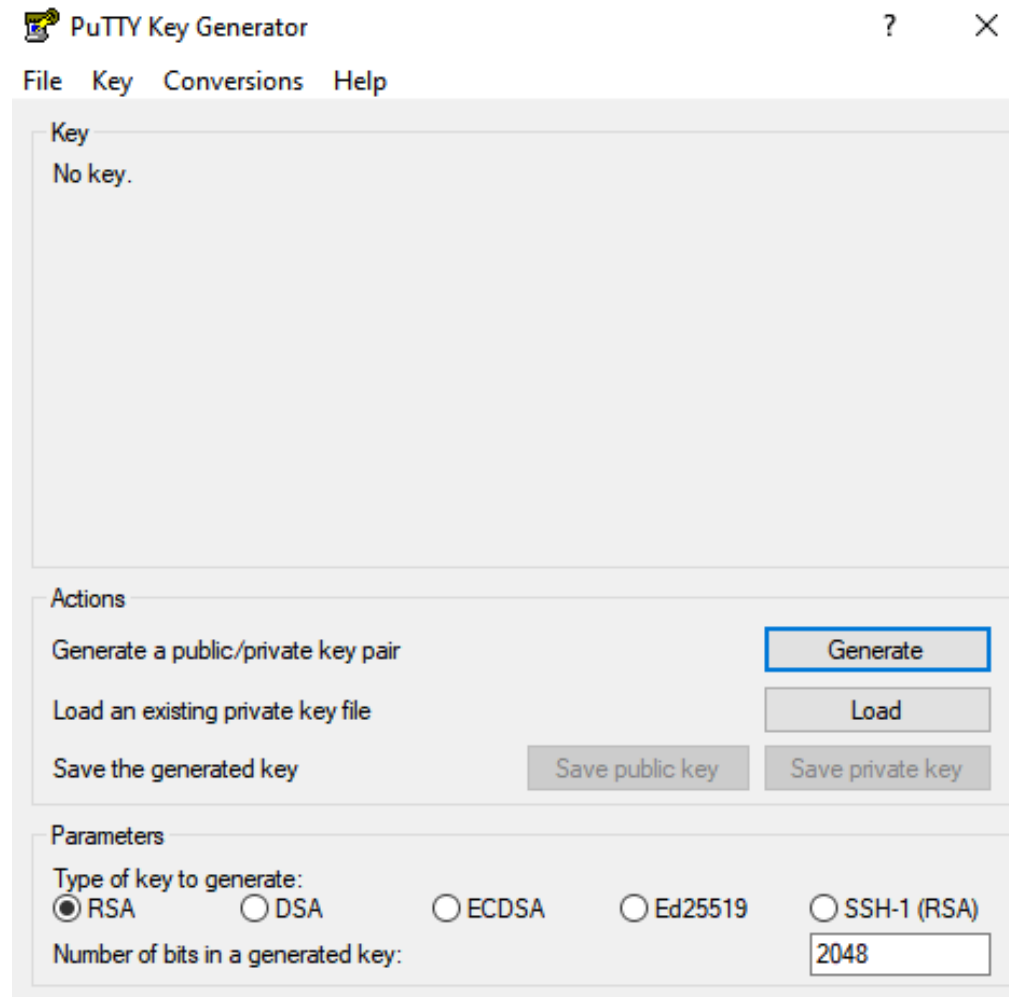
```
PS C:\Users\username> ssh -p 1752 username@193.206.101.248
```

### c.3) Sistemi windows, attraverso il programma Putty

Dal sito [www.putty.org](http://www.putty.org) scaricare il programma putty.exe, da [www.puttygen.com](http://www.puttygen.com) scaricare il programma puttygen.exe; sono entrambi eseguibili con un doppio click di mouse e testati su pc con sistema operativo Windows 10 Home Edition e Pro.

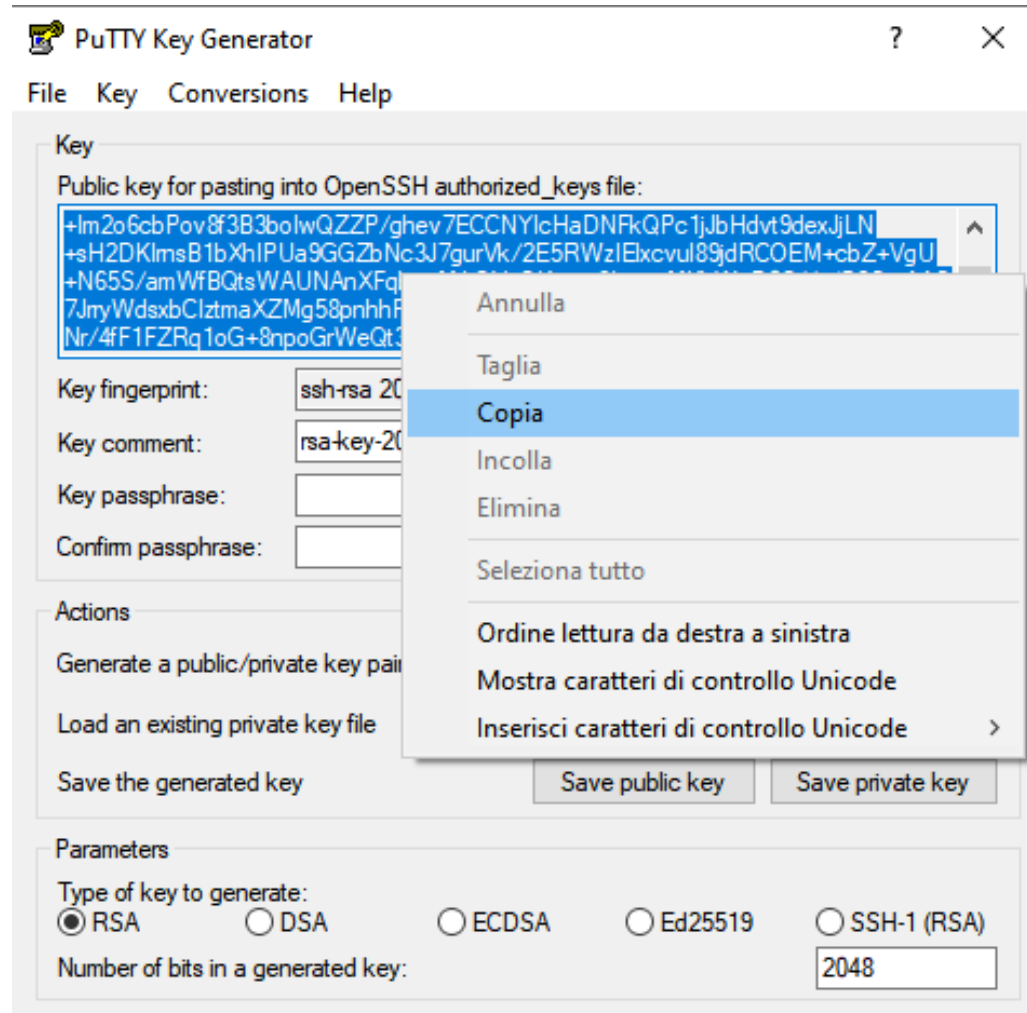
#### Generazione della coppia di chiavi

Lanciando puttygen.exe apparirà la seguente scheda:



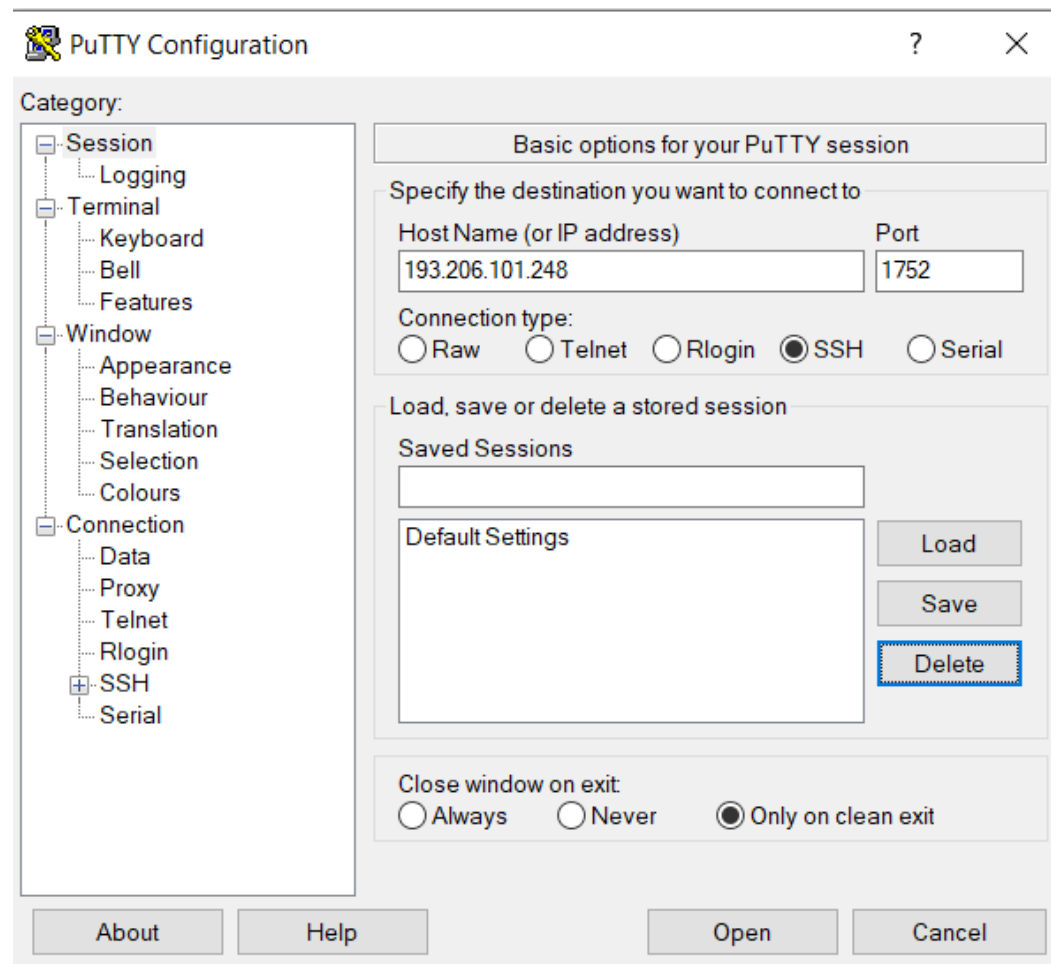


Cliccare sul tasto *Generate*, muovere il mouse nell'area *Key*, copiarne il contenuto, compilare i campi *passphrase*, e infine salvare le chiavi, pubblica e privata in una cartella ben custodita.



## Copia della chiave pubblica su magicgate

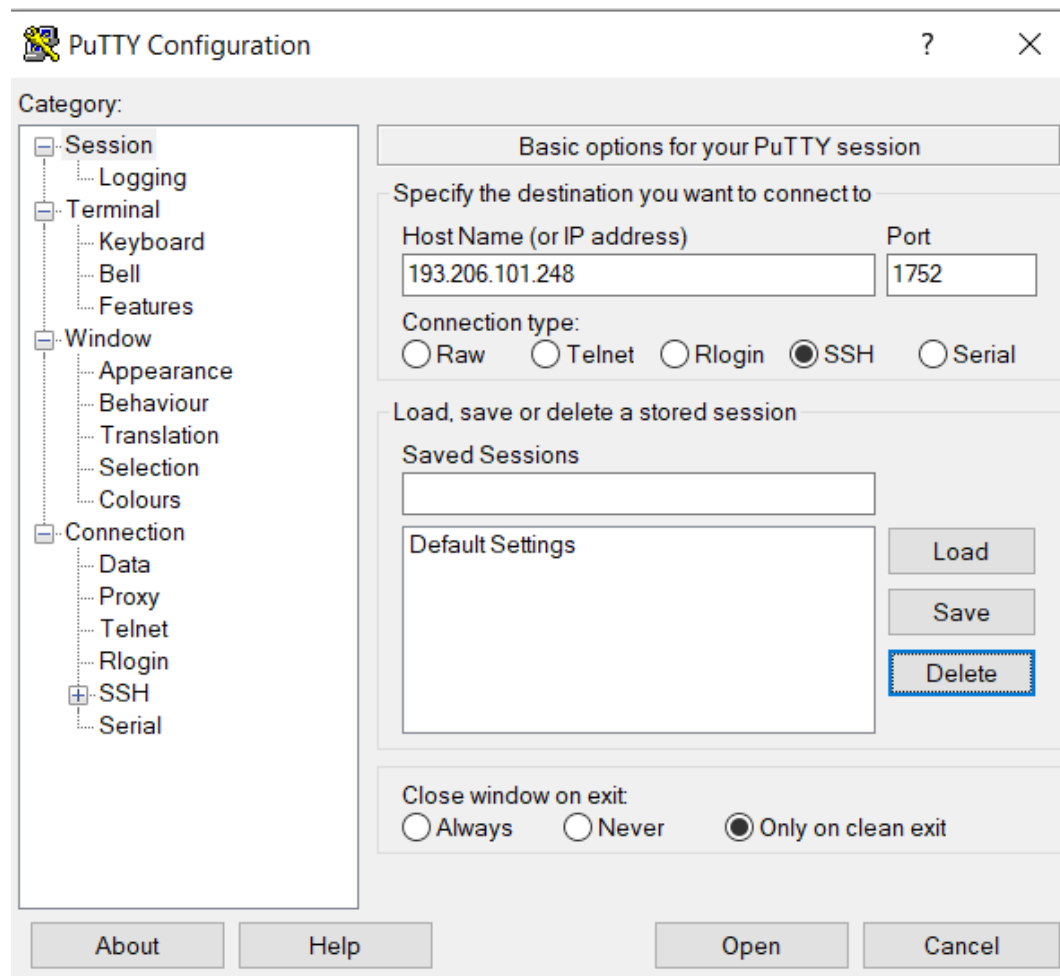
Lanciare il programma putty.exe e collegarsi a magicgate con password (solo questa volta), come indicato:



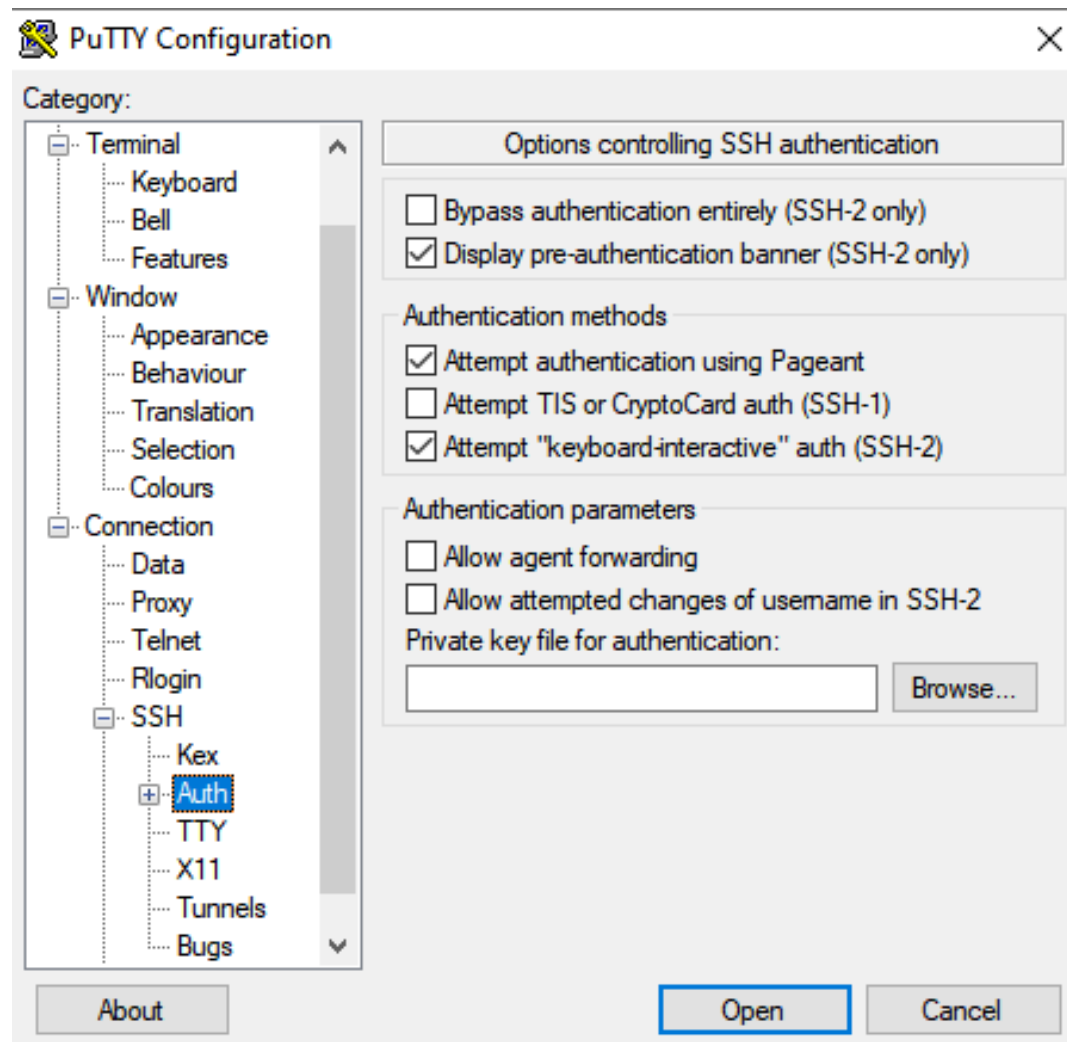
Aprire con l'editor preferito il file `~/.ssh/authorized_keys`, se il file non esiste crearlo, incollare nel file il contenuto degli *appunti* e uscire.

## Accesso a magicgate

Lanciare putty.exe come indicato:



Selezionare *SSH* -> *Auth*, caricare la chiave privata nel campo *Private key file for authentication*, premere sul pulsante *Open*:



Per generare la **coppia d)** si può procedere come specificato in c.1), generando la coppia di chiavi su magicgate. Ovviamente il nome delle chiavi non può essere quello di default (id\_rsa), ma deve essere diverso, ad esempio key\_mbox e key\_mbox.pub.

#### Accesso a magicbox

```
ssh -i .ssh/key_mbox usernamemagicbox@magicbox
```

#### 4. SOFTWARE INSTALLATO E RELATIVI MODULI

Il sistema magicbox è dotato di compilatori C/C++/Fortran della suite GNU, del CUDA Toolkit per il calcolo parallelo su GPU Nvidia, nonché di implementazioni delle API per il calcolo parallelo MPI e OpenMP. Sono installate alcune librerie per la risoluzione di problemi di algebra lineare (BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, MUMPS, SuiteSparse, SuperLU, SuperLU\_DIST), per il partizionamento di grafi e mesh di discretizzazione e per il riordinamento "fill-reducing" di matrici sparse (METIS, ParMETIS), per simulazioni di dinamica molecolare (LAMMPS). Inoltre sono installati Conifer, un tool per riconoscere copy number variation in whole exome sequencing, Plink, tool con molteplici funzionalità legate a Genome Wide Association Studies, Bcl2fastq, che permette di ottenere i file fastq di input del sequenziamento a partire dai file grezzi bcl.

Ciascun utente può personalizzare il proprio ambiente di lavoro caricando le implementazioni del software suddetto di cui ha bisogno mediante il comando **module**. In particolare:

- **module avail**: visualizza tutti i moduli disponibili;
- **module load *nomemodulo***: carica il modulo *nomemodulo*;
- **module unload *nomemodulo***: rilascia il modulo *nomemodulo*;
- **module list**: visualizza i moduli caricati;
- **module purge**: rilascia i moduli caricati.

#### ESEMPIO

```
[username@magicbox ~]$ module avail
```

```
----- /opt/share/modulefiles/comps -----  
conifer/conifer-0.2.2      gcc-4.8.5/scalapack-2.1.0  gcc-6.3.1/gcc              gcc-8.2.1/lammps-3mar20  
gcc-4.8.5/blas-3.8.0      gcc-4.8.5/suitesparse-5.5.0 gcc-6.3.1/openmpi-4.0.2    gcc-8.2.1/openmpi-4.0.2  
gcc-4.8.5/lapack-3.9.0    gcc-4.8.5/superlu-5.2.0   gcc-7.3.1/blas-3.8.0      nvidia-10.2  
gcc-4.8.5/metis-5.1.0     gcc-5.3.1/blas-3.8.0      gcc-7.3.1/gcc             plink/plink-1.90  
gcc-4.8.5/mumps-5.3.1     gcc-5.3.1/gcc             gcc-7.3.1/openmpi-4.0.2  
gcc-4.8.5/openmpi-4.0.2   gcc-5.3.1/openmpi-4.0.2   gcc-8.2.1/blas-3.8.0  
gcc-4.8.5/parmetis-4.0.3 gcc-6.3.1/blas-3.8.0      gcc-8.2.1/gcc
```

Per bcl2fastq non è necessario caricare alcun modulo, può essere eseguito direttamente dalla shell secondo le modalità indicate nel paragrafo 5. Si noti che nvidia-10.2 è compatibile con le suite di compilatori gcc 4.8.5, 5.3.1, 6.3.1 e 7.3.1, ma non con gcc 8.2.1.

## 5. SOTTOMISSIONE DI JOB E RELATIVE CODE

Per eseguire i propri job, gli utenti devono sottometerli a una coda, specificando obbligatoriamente la durata del job in esecuzione. **Non devono mai essere lanciati programmi direttamente da linea di comando**, rischiando così di rendere inutilizzabile il nodo di login o altre risorse condivise. Bisogna passare **sempre** attraverso le code di esecuzione dello scheduler. Lo scheduler utilizzato da magicbox è *slurm* 18.08.5.

Le code per sottomettere i job sono associate ai gruppi di utenti con un valore di priorità e un limite di tempo:

- **qmagic0** (docenti, staff - TimeLimit 24h),
- **qmagic1** (docenti, staff, assegnisti, borsisti - TimeLimit 20h),
- **qmagic2** (docenti, staff, guest0, guest1, guest2 - TimeLimit 10h),
- **qmagicLT** (docenti, staff, assegnisti, borsisti - TimeLimit 30gg ovvero 720:00:00),

elencate secondo priorità decrescente,

- **debug** (coda di default - TimeLimit 5h).

L'abilitazione di un utente all'uso della coda qmagicLT (per job di lunga durata) dipende dalle motivazioni per cui è stato richiesto l'uso del server, dal periodo di uso e dalla stima del tempo di uso (per singolo run e totale), che sono fornite all'atto della richiesta delle credenziali. Tale abilitazione è sottoposta al giudizio del Comitato di Gestione.

Con il comando **sinfo** sono visualizzabili tutte le informazioni sulle partizioni: disponibilità, tempo limite, nodi, stato e lista nodi.

Con **squeue** si hanno informazioni sui job in esecuzione (jobid, coda). Un job può essere cancellato con il comando **scancel n\_job**.

Un job può essere sottomesso

- in modalità *interactive* con il comando **srun**,  
**srun --ntasks=1 --cpus-per-task=1 --partition=partition\_name --mem-per-cpu=1024M --mem-bind=local --time=hh:mm:ss executable\_name**  
(si veda <https://slurm.schedmd.com/srun.html>)
- in modalità *batch* con **sbatch**,  
**sbatch --ntasks=1 --cpus-per-task=1 --partition=partition\_name --mem-per-cpu=1024M --mem-bind=local --time=hh:mm:ss script\_name.sh**  
(si veda <https://slurm.schedmd.com/sbatch.html>)

in cui *script\_name.sh* è uno script del tipo:

```
#!/bin/bash
##
-----
srun ./executable_name

e
```

**--cpus-per-task** è il numero di core richiesti, **--partition** (oppure **-p**) la coda scelta, **--mem-per-cpu** la memoria per CPU (K, M, G; 1024 MB per default; in alternativa è possibile specificare **--mem=mem** per richiedere una precisa quantità di memoria), **--mem-bind=local** garantisce che la memoria allocata sia il più possibile vicina alle cpu allocate per il job, **--time** il tempo limite per eseguire il job. Se time supera TimeLimit il job è posto nello stato PENDING (PD), se time è omesso il job resta in esecuzione per un tempo minore o uguale a TimeLimit, superato il quale risulterà CANCELLED; non è necessario, ma è possibile specificare **--nodes** (oppure **-N**) che indica il numero di nodi, (1 nel caso di magicbox).

#### **E' importante ricordare che:**

- il numero totale di cpu (core) a disposizione è 192;
- in automatico viene assegnata una cpu per ogni task;
- se si ha bisogno di un maggior numero di cpu è possibile specificare il numero di cpu per task; ad esempio, si può specificare "--cpus-per-task=24" insieme a "--cores-per-socket=24" per poter sfruttare appieno uno degli 8 Intel Xeon.

**L'uso di 192 cpu (ed eventualmente l'uso di tutte le gpu), su qualunque coda, è fortemente sconsigliato e renderebbe inutilizzabile il server da parte di altri utenti (in particolare l'uso esclusivo sulla coda *qmagicLT* lo renderebbe inutilizzabile per 30gg.); in tal caso bisogna contattare il responsabile del comitato di gestione, prof. Gerardo Toraldo e l'amministratore di sistema dott. Stefano Angelone indicando le motivazioni dell'uso esclusivo del server il cui permesso sarà opportunamente valutato. In assenza dell'autorizzazione tutti i processi interessati saranno annullati.**

**srun** con l'opzione **--overcommit** permette di allocare più di un processo per core; senza questa opzione srun alloca un task per ogni cpu.

Tutte le istruzioni relative alla modalità batch (opzioni ed esecuzione) possono essere inserite direttamente in uno script, come nel seguente esempio:

```
#!/bin/bash
##
# script.sh
```

```

##
#SBATCH --job-name=job_name           # nome simbolico assegnato al job, diverso dall'eseguibile
#SBATCH --output=slurm-%j.out        # nome del file di output: slurm-job_ID.out
#SBATCH --partition=partition_name
#SBATCH --ntasks=1
#SBATCH --time=hh:mm:ss
#SBATCH --mem-per-cpu=1024M          # default, può non essere specificato
#SBATCH --mem-bind=local
#SBATCH --cpus-per-task=ncpus        # numero di core richiesti
srun ./executable_name

```

Lo script precedente si può eseguire con il comando  
**sbatch script.sh**

## 6. ISTRUZIONI DI BASE PER L'USO DI MATLAB SU MAGICBOX

Di seguito sono specificati la versione di MATLAB installata su magicbox, i relativi toolbox, i compilatori C/C++/Fortran compatibili e le modalità per la sottomissione di job che usano MATLAB.

```

-----
MATLAB Version: 9.7.0.1216025 (R2019b) Update 1
MATLAB License Number: 40766392
Operating System: Linux 3.10.0-862.el7.x86_64 #1 SMP Fri Apr 20 16:44:24 UTC 2018 x86_64
Java Version: Java 1.8.0_202-b08 with Oracle Corporation Java HotSpot(TM) 64-Bit Server VM mixed mode
-----

```

MATLAB	Version 9.7	(R2019b)
Simulink	Version 10.0	(R2019b)
Bioinformatics Toolbox	Version 4.13	(R2019b)
Computer Vision Toolbox	Version 9.1	(R2019b)
Curve Fitting Toolbox	Version 3.5.10	(R2019b)
Database Toolbox	Version 9.2	(R2019b)
Econometrics Toolbox	Version 5.3	(R2019b)



Financial Toolbox	Version 5.14	(R2019b)
GPU Coder	Version 1.4	(R2019b)
Global Optimization Toolbox	Version 4.2	(R2019b)
Image Acquisition Toolbox	Version 6.1	(R2019b)
Image Processing Toolbox	Version 11.0	(R2019b)
MATLAB Coder	Version 4.3	(R2019b)
MATLAB Compiler	Version 7.1	(R2019b)
MATLAB Compiler SDK	Version 6.7	(R2019b)
MATLAB Report Generator	Version 5.7	(R2019b)
Mapping Toolbox	Version 4.9	(R2019b)
Optimization Toolbox	Version 8.4	(R2019b)
Parallel Computing Toolbox	Version 7.1	(R2019b)
Partial Differential Equation Toolbox	Version 3.3	(R2019b)
Statistics and Machine Learning Toolbox	Version 11.6	(R2019b)
Symbolic Math Toolbox	Version 8.4	(R2019b)
Wavelet Toolbox	Version 5.3	(R2019b)

```

>> mex -setup -v C++
... Executing command 'g++ -dumpversion' ...Yes ('4.8.5').
>> mex -setup -v C
... Executing command 'gcc -dumpversion' ...Yes ('4.8.5').
>> mex -setup -v fortran
... Executing command 'gfortran -dumpversion' ...Yes ('4.8.5').
>> mex -setup -v C++
... Executing command 'g++ -dumpversion' ...Yes ('5.3.1').
>> mex -setup -v C
... Executing command 'gcc -dumpversion' ...Yes ('5.3.1').
>> mex -setup -v fortran
... Executing command 'gfortran -dumpversion' ...Yes ('5.3.1').
>> mex -setup -v C++
... Executing command 'g++ -dumpversion' ...Yes ('6.3.1').
>> mex -setup -v C
... Executing command 'gcc -dumpversion' ...Yes ('6.3.1').
>> mex -setup -v fortran

```

```

... Executing command 'gfortran -dumpversion' ...Yes ('6.3.1').
>> mex -setup -v C++
... Executing command 'g++ -dumpversion' ...Yes ('7').
>> mex -setup -v C
... Executing command 'gcc -dumpversion' ...Yes ('7').
>> mex -setup -v fortran
... Executing command 'gfortran -dumpversion | awk -F '.' '$1>=6' ' ...Yes ('7').
Found installed compiler 'gfortran'.
MEX configured to use 'gfortran' for FORTRAN language compilation.
>> mex -setup -v C++
... Executing command 'g++ -dumpversion' ...Yes ('8').
>> mex -setup -v C
... Executing command 'gcc -dumpversion' ...Yes ('8').
>> mex -setup -v fortran
... Executing command 'gfortran -dumpversion | awk -F '.' '$1>=6' ' ...Yes ('8').
Found installed compiler 'gfortran'.
MEX configured to use 'gfortran' for FORTRAN language compilation.

```

I job che usano MATLAB possono essere sottomessi con le seguenti istruzioni.

### **MATLAB, job in modalità *interactive***

```

srun --partition=partition_name --pty --nodes=1 --ntasks=1 --cpus-per-task=1 --mem-per-cpu=1024M --mem-bind=local --time=hh:mm:ss matlab
-nodisplay -nosplash -nojvm

```

### **MATLAB, job in modalità *batch* con recupero risultati**

```

#!/bin/bash
##
# matlab_script.sh
#SBATCH --job-name=job_name           # nome simbolico assegnato al job
#SBATCH --output=slurm-%j.out         # nome del file di output: slurm-job_ID.out
#SBATCH --partition=partition_name    # nome della coda scelta
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks=1
#SBATCH --cpus-per-task=ncpus         # numero di core richiesti

```

```
#SBATCH --mem-per-cpu=1024M          # default
#SBATCH --mem-bind=local
#SBATCH --time=hh:mm:ss
matlab -nodisplay -nosplash -nojvm -r provamatlab    # omettere l'estensione .m del file provamatlab.m
```

Esecuzione dello script:

```
sbatch matlab_script.sh
```

**NOTA:** nel caso in cui lo script MATLAB debba generare dei plot da salvare ed esportare su altro computer, non va inserita la specifica “-nojvm” (no Java Virtual Machine); si raccomanda, nel caso, di gestire opportunamente l'eventuale generazione di figure e la loro visualizzazione, ad esempio impostando ad ‘off’ la visibilità delle figure generate tramite il comando “f = figure('visible','off')”.