

**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  
25 gennaio 2024**

**1. BREVE DESCRIZIONE DEL SERVER HPC *MagicBox2***

Il server HPC del Dipartimento di Matematica e Fisica (DMF) dell'Università della Campania Luigi Vanvitelli, è un SuperServer Supermicro modello 2024U-TRT, con 2 CPU AMD 7313 16 core, una memoria DDR4-3200 Reg. ecc 32 GB – q.16 per un totale di 512GB, una capacità disco da 960 GB SSD e una Scheda Nvidia A100-40GB on board.

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

La richiesta delle credenziali di accesso a magicbox2 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, <https://www.matfis.unicampania.it/dipartimento/strutture-del-dipartimento/servizio-informatica-e-calcolo> nome e cognome (per ogni singolo account);

1. ruolo, ente e dipartimento di appartenenza (per ogni singolo account);
2. email (per ogni singolo account);
3. contatto telefonico (per ogni singolo account);
4. 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);
5. periodo per il quale è previsto l'uso dell'attrezzatura;
6. stima del tempo di uso (tempo per singolo run e tempo totale).

Vanno inoltre dichiarati

7. l'impegno a rispettare i termini e le condizioni di uso del server stabiliti nel presente documento;

8. 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.

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

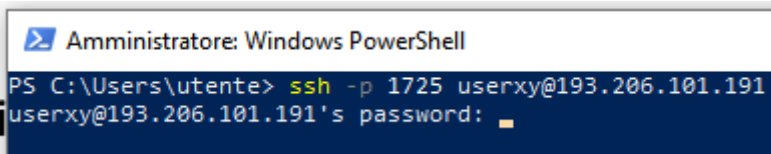
Il primo accesso al server, dall'esterno verso magicbox2 avverrà mediante protocollo ssh con password, come di seguito specificato:

```
ssh -p 1725 usernamemagicbox2@193.206.101.191
```

La password si può cambiare con il comando *passwd*, è **obbligatorio cambiarla al primo accesso**; il Responsabile Tecnico si riserva di sospendere l'account se il cambio password non avviene entro 3 giorni.

a) 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



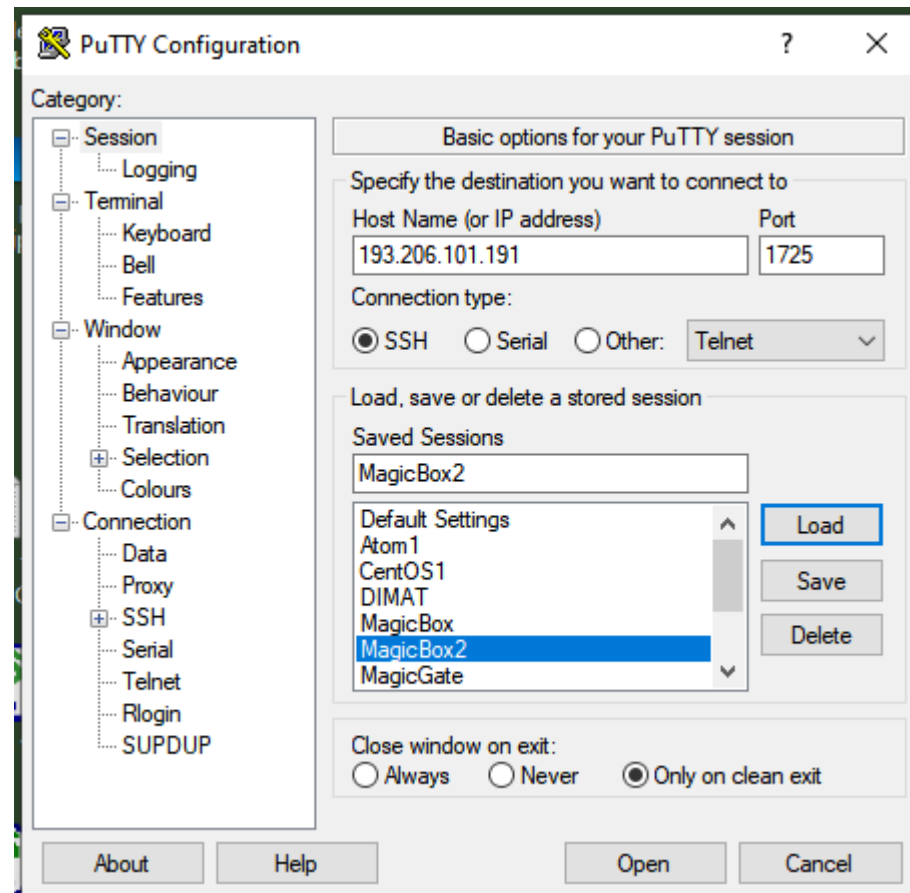
```
Amministratore: Windows PowerShell
PS C:\Users\utente> ssh -p 1725 userxy@193.206.101.191
userxy@193.206.101.191's password: █
```

## b) Sistemi windows, attraverso il programma Putty

Dal sito [www.putty.org](http://www.putty.org) scaricare il programma putty.exe, eseguibile con un doppio click di mouse e testato su pc con sistema operativo Windows 10 Home Edition e Pro.

### Accesso a magicbox

Lanciare putty.exe come indicato, premere il tasto *Open*:



#### 4. SOFTWARE INSTALLATO E RELATIVI MODULI

Il sistema magicbox2 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. Altri software, R ver 3.6.0 linguaggio di programmazione statistica e R-Studio 1.4.1106 front-end grafico per R, ROOT 6.22 per l'analisi scientifica di petabyte di dati e Geant4 versioni 10.6, 10.7 per la simulazione di particelle attraverso la materia. Altri programmi di uso generale, Grace, Gnuplot, l'editor Joe. E' installato MATLAB, piattaforma di programmazione, calcolo numerico, sviluppo di algoritmi e creazione di modelli.

Per bcl2fastq non è necessario caricare alcun modulo, può essere eseguito direttamente dalla shell secondo le modalità indicate nel paragrafo 5.

Molti software e relativi moduli sono in fase di installazione.

#### 5. SOTTOMISSIONE DI JOB E RELATIVE CODE

Per eseguire i propri job, gli utenti devono sottometterli 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:

- **qmagicLT** ( TimeLimit 30gg ovvero 720:00:00h),
- **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 32;
- 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 una cpu.

**L'uso di 32 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.**

**L'amministratore di sistema, il dott. Angelone si riserva di annullare senza alcun preavviso tutti i processi che senza controllo comportano l'esaurimento dello spazio disco, e procedere all'eliminazione dei contenuti dalle cartelle coinvolte.**

**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 MAGICBOX2

Di seguito sono specificati la versione di MATLAB installata su magicbox2, i relativi toolbox, e le modalità per la sottomissione di job che usano MATLAB.

```
< M A T L A B ( R ) >
Copyright 1984-2023 The MathWorks, Inc.
R2023b Update 5 (23.2.0.2459199) 64-bit (glnxa64)
November 28, 2023

To get started, type doc.
For product information, visit www.mathworks.com.

>> ver
-----
MATLAB Version: 23.2.0.2459199 (R2023b) Update 5
MATLAB License Number: 40766392
Operating System: Linux 3.10.0-1160.102.1.el7.x86_64 #1 SMP Tue Oct 17 15:42:21 UTC 2023 x86_64
Java Version: Java 1.8.0_202-b08 with Oracle Corporation Java HotSpot(TM) 64-Bit Server VM mixed mode
-----
MATLAB                Version 23.2      (R2023b)
Simulink               Version 23.2      (R2023b)
5G Toolbox             Version 23.2      (R2023b)
AUTOSAR Blockset      Version 23.2      (R2023b)
Aerospace Blockset    Version 23.2      (R2023b)
Aerospace Toolbox     Version 23.2      (R2023b)
Antenna Toolbox       Version 23.2      (R2023b)
Audio Toolbox         Version 23.2      (R2023b)
Automated Driving Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Bioinformatics Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Bluetooth Toolbox     Version 23.2      (R2023b)
C2000 Microcontroller Blockset Version 23.2      (R2023b)
Communications Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Computer Vision Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Control System Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Curve Fitting Toolbox Version 23.2      (R2023b)
DDS Blockset          Version 23.2      (R2023b)
DSP HDL Toolbox       Version 23.2      (R2023b)
DSP System Toolbox    Version 23.2      (R2023b)
Database Toolbox      Version 23.2      (R2023b)
Datafeed Toolbox      Version 23.2      (R2023b)
Deep Learning HDL Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Deep Learning Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Econometrics Toolbox  Version 23.2      (R2023b)
Embedded Coder        Version 23.2      (R2023b)
Filter Design HDL Coder Version 23.2      (R2023b)
Financial Instruments Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Financial Toolbox     Version 23.2      (R2023b)
Fixed-Point Designer  Version 23.2      (R2023b)
Fuzzy Logic Toolbox   Version 23.2      (R2023b)
GPU Coder             Version 23.2      (R2023b)
Global Optimization Toolbox Version 23.2      (R2023b)
HDL Coder             Version 23.2      (R2023b)
HDL Verifier          Version 23.2      (R2023b)
Image Acquisition Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Image Processing Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Industrial Communication Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Instrument Control Toolbox Version 23.2      (R2023b)
LTE Toolbox           Version 23.2      (R2023b)
Lidar Toolbox         Version 23.2      (R2023b)
```

```
MATLAB Coder                Version 23.2      (R2023b)
MATLAB Compiler            Version 23.2      (R2023b)
MATLAB Compiler SDK        Version 23.2      (R2023b)
MATLAB Report Generator    Version 23.2      (R2023b)
MATLAB Test                Version 23.2      (R2023b)
Mapping Toolbox            Version 23.2      (R2023b)
Medical Imaging Toolbox    Version 23.2      (R2023b)
Mixed-Signal Blockset     Version 23.2      (R2023b)
Model Predictive Control Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Motor Control Blockset     Version 23.2      (R2023b)
Navigation Toolbox         Version 23.2      (R2023b)
Optimization Toolbox       Version 23.2      (R2023b)
Parallel Computing Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Partial Differential Equation Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Phased Array System Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Powertrain Blockset       Version 23.2      (R2023b)
Predictive Maintenance Toolbox Version 23.2      (R2023b)
RF Blockset               Version 23.2      (R2023b)
RF PCB Toolbox            Version 23.2      (R2023b)
RF Toolbox                Version 23.2      (R2023b)
ROS Toolbox               Version 23.2      (R2023b)
Radar Toolbox             Version 23.2      (R2023b)
Reinforcement Learning Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Requirements Toolbox      Version 23.2      (R2023b)
Risk Management Toolbox    Version 23.2      (R2023b)
Robotics System Toolbox    Version 23.2      (R2023b)
Robust Control Toolbox     Version 23.2      (R2023b)
Satellite Communications Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Sensor Fusion and Tracking Toolbox Version 23.2      (R2023b)
SerDes Toolbox            Version 23.2      (R2023b)
Signal Integrity Toolbox   Version 23.2      (R2023b)
Signal Processing Toolbox  Version 23.2      (R2023b)
```

```

SimBiology                Version 23.2      (R2023b)
SimEvents                 Version 23.2      (R2023b)
Simscape                  Version 23.2      (R2023b)
Simscape Battery         Version 23.2      (R2023b)
Simscape Driveline       Version 23.2      (R2023b)
Simscape Electrical      Version 23.2      (R2023b)
Simscape Fluids          Version 23.2      (R2023b)
Simscape Multibody       Version 23.2      (R2023b)
Simulink 3D Animation     Version 23.2      (R2023b)
Simulink Check            Version 23.2      (R2023b)
Simulink Code Inspector  Version 23.2      (R2023b)
Simulink Coder            Version 23.2      (R2023b)
Simulink Compiler        Version 23.2      (R2023b)
Simulink Control Design  Version 23.2      (R2023b)
Simulink Coverage        Version 23.2      (R2023b)
Simulink Design Optimization Version 23.2      (R2023b)
Simulink Design Verifier Version 23.2      (R2023b)
Simulink Desktop Real-Time Version 23.2      (R2023b)
Simulink Fault Analyzer  Version 23.2      (R2023b)
Simulink PLC Coder       Version 23.2      (R2023b)
Simulink Real-Time       Version 23.2      (R2023b)
Simulink Report Generator Version 23.2      (R2023b)
Simulink Test            Version 23.2      (R2023b)
SoC Blockset             Version 23.2      (R2023b)
Stateflow                Version 23.2      (R2023b)
Statistics and Machine Learning Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Symbolic Math Toolbox    Version 23.2      (R2023b)
System Composer          Version 23.2      (R2023b)
System Identification Toolbox Version 23.2      (R2023b)
Text Analytics Toolbox   Version 23.2      (R2023b)
UAV Toolbox              Version 23.2      (R2023b)
Vehicle Dynamics Blockset Version 23.2      (R2023b)
Vehicle Network Toolbox  Version 23.2      (R2023b)
Vision HDL Toolbox       Version 23.2      (R2023b)
WLAN Toolbox             Version 23.2      (R2023b)
Wavelet Toolbox          Version 23.2      (R2023b)
Wireless HDL Toolbox     Version 23.2      (R2023b)
Wireless Testbench      Version 23.2      (R2023b)
>>

```

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
```

**E' ASSOLUTAMENTE VIETATO LANCIARE MATLAB IN MODALITA' GRAFICA DA RIGA DI COMANDO ATTRAVERSO L'USO DEL TERMINALE:**

```
[username@magicbox2 ~]$ matlab
```

**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’)”.