



このコンテンツは公開から3年以上経過しており内容が古い可能性があります  
最新情報については[サービス別資料](#)もしくはサービスのドキュメントをご確認ください

## [AWS Black Belt Online Seminar]

# AWS ParallelCluster ではじめるクラウドHPC

サービスカットシリーズ

Specialist Solutions Architect, HPC  
Daisuke Miyamoto  
2020/04/08

AWS 公式 Webinar  
<https://amzn.to/JPWebinar>



過去資料  
<https://amzn.to/JPArchive>



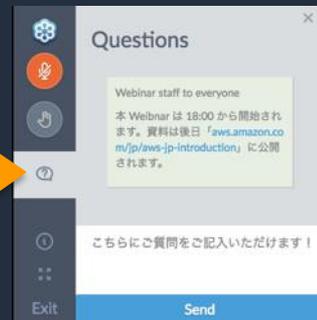
# AWS Black Belt Online Seminar とは

「サービス別」「ソリューション別」「業種別」のそれぞれのテーマに分かれて、アマゾンウェブ サービス ジャパン株式会社が主催するオンラインセミナーシリーズです。

## 質問を投げることができます！

- 書き込んだ質問は、主催者にしか見えません
- 今後のロードマップに関するご質問はお答えできませんのでご了承下さい

- ① 吹き出しをクリック
- ② 質問を入力
- ③ Sendをクリック



Twitter ハッシュタグは以下をご利用ください  
#awsblackbelt

# 内容についての注意点

- 本資料では2020年04月08日時点のサービス内容および価格についてご説明しています。最新の情報はAWS公式ウェブサイト(<http://aws.amazon.com>)にてご確認ください。
- 資料作成には十分注意しておりますが、資料内の価格とAWS公式ウェブサイト記載の価格に相違があった場合、AWS公式ウェブサイトの価格を優先とさせていただきます。
- 価格は税抜表記となっております。日本居住者のお客様には別途消費税をご請求させていただきます。
- AWS does not offer binding price quotes. AWS pricing is publicly available and is subject to change in accordance with the AWS Customer Agreement available at <http://aws.amazon.com/agreement/>. Any pricing information included in this document is provided only as an estimate of usage charges for AWS services based on certain information that you have provided. Monthly charges will be based on your actual use of AWS services, and may vary from the estimates provided.

# 本セミナーの概要

## □ 本セミナーで学習できること

- ❖ HPC環境をクラウド化するメリット
- ❖ AWS 上で簡単にHPC クラスタを構築できるソフトウェアである AWS ParallelCluster の概要
- ❖ 様々な要望に答えることが可能な AWS ParallelCluster のカスタマイズ方法

## □ 対象者

- ❖ これから HPC 環境を AWS 上で構築したいと考えている方
- ❖ AWS ParallelCluster について詳しく知りたい方
- ❖ 次の AWS のサービスの概要レベルの知識が前提になります

Amazon VPC / Amazon EC2 / Amazon S3 などのAWS基礎サービス

# 自己紹介

## □ 名前

宮本 大輔 (みやもと だいすけ)

## □ 所属

アマゾン ウェブ サービス ジャパン 株式会社  
技術統括本部  
Specialist Solutions Architect, HPC



## □ 好きな AWS サービス

- ❖ AWS ParallelCluster
- ❖ Amazon FSx for Lustre
- ❖ AWS Snowball シリーズ



# 本日の流れ

- HPC on AWS
- AWS ParallelCluster とは
- AWS ParallelCluster の使い方
- Demo
- AWS ParallelCluster の設定
  - 基本編
  - パフォーマンス編
  - ネットワーク構成編
  - オペレーション編
- AWS ParallelCluster と他のサービスの連携
- AWS ParallelCluster の活用事例

# HPC on AWS

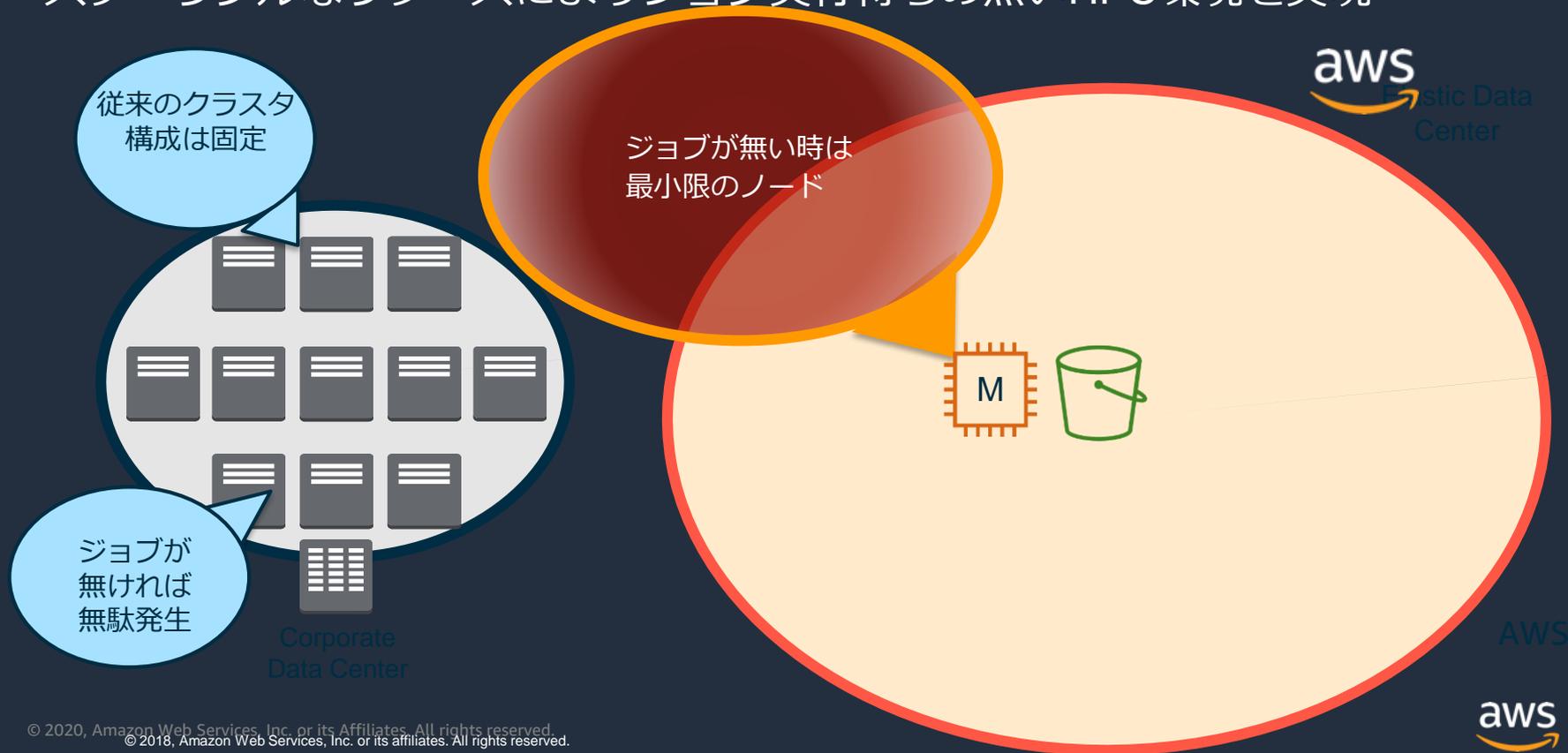


# これまでの HPC クラスタの課題

- サーバ台数が限られており、需要が増加する時期には長大なキュー待ち時間が発生する
- 同じ環境を複数メンバーで共有するため、アプリケーションによってはリソースが無駄になることも
- サーバ台数が多く、ハードウェアの保守・管理が煩雑

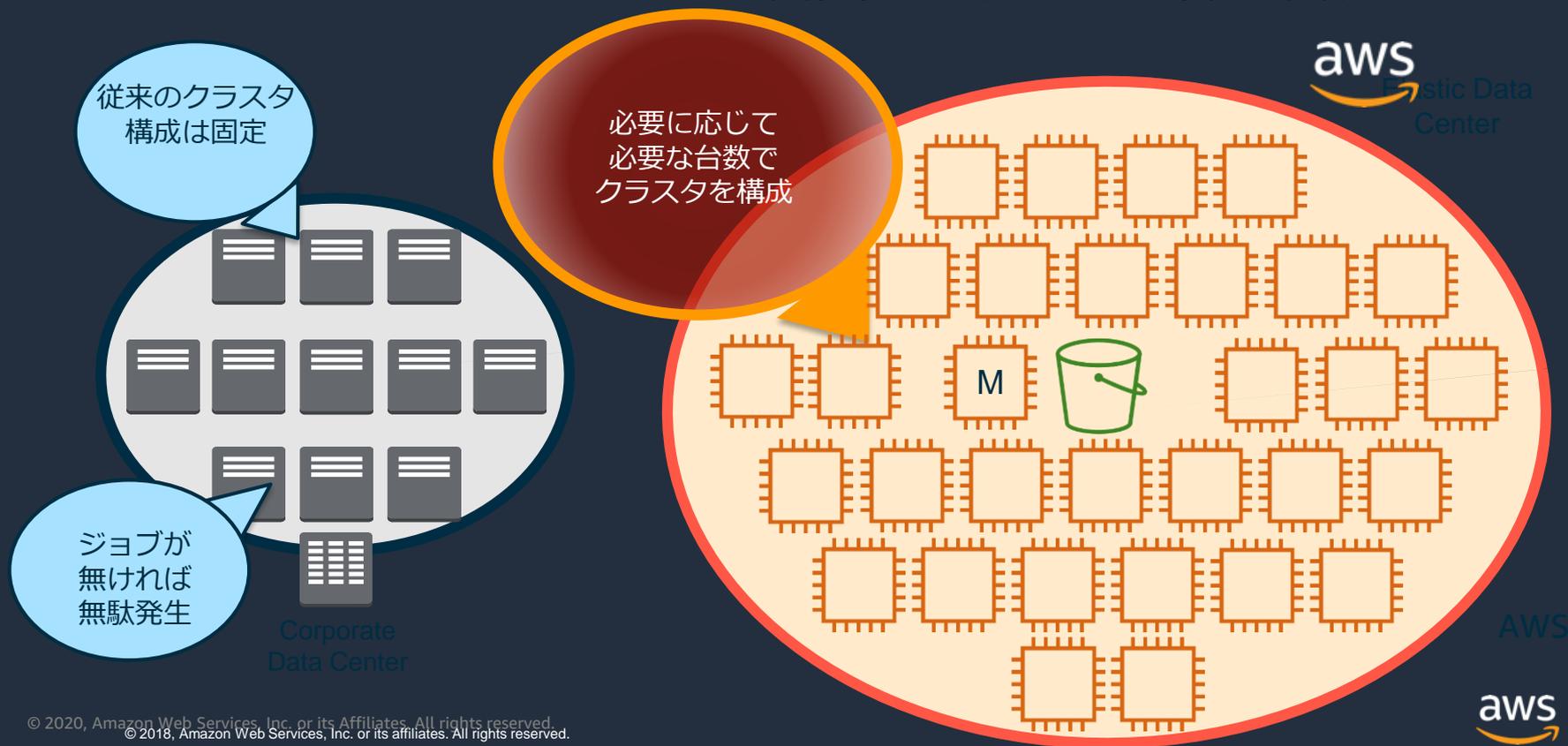
# AWSなら、必要な時に必要なだけ利用可能

スケーラブルなリソースによりジョブ実行待ちの無いHPC環境を実現



# AWSなら、必要な時に必要なだけ利用可能

スケーラブルなリソースによりジョブ実行待ちの無いHPC環境を実現



# AWSなら、必要な時に必要なだけ利用可能

スケーラブルなリソースによりジョブ実行待ちの無いHPC環境を実現



従来のクラスタ  
構成は固定



ジョブが  
無ければ  
無駄発生

Corporate  
Data Center

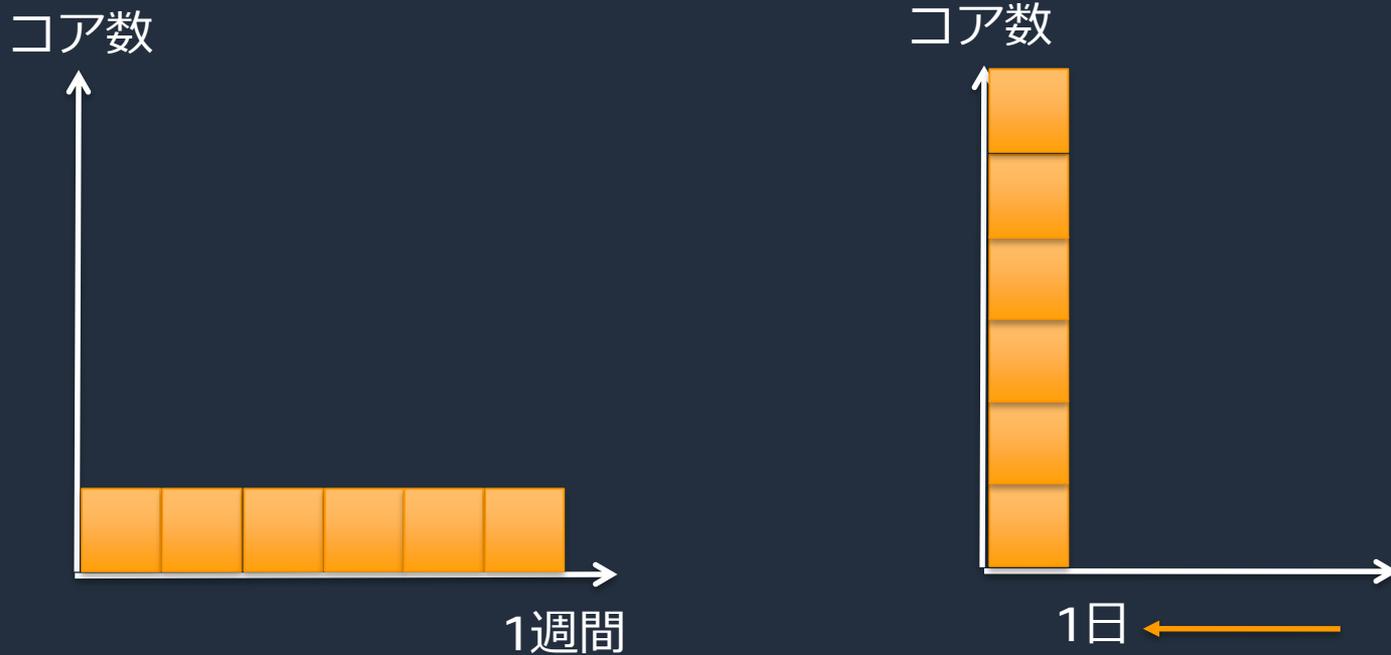
処理が終了すると  
インスタンスを終了  
課金停止



AWS



# スケーラビリティの活用による計算時間短縮

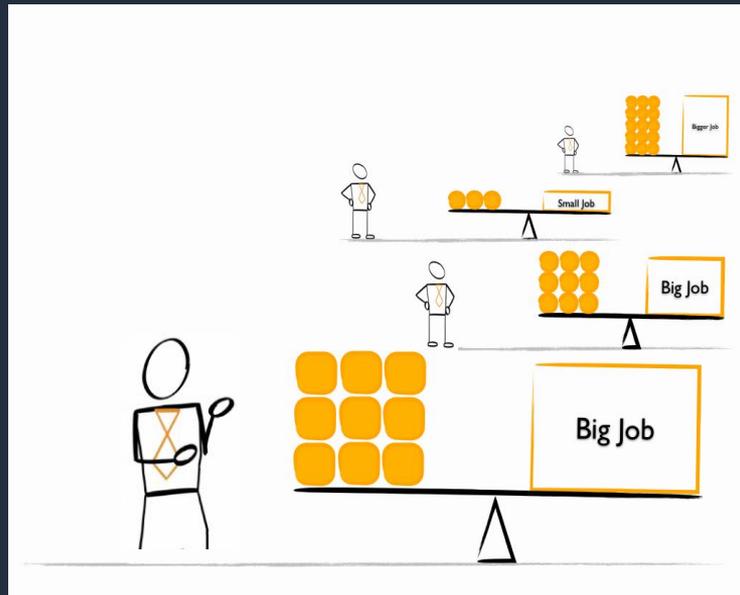


従来は手持ちの限られたリソースで、逐次処理していたジョブも  
AWSなら必要な台数、インスタンスを起動して、一斉処理  
しかも費用は「時間×台数」なのでどちらも同じ

# アプリケーションに合わせた構成のクラスタを構築可能

ユーザやタスク単位で専用のクラスタを構築できるため  
要件や規模に合わせて、最適構成のクラスタを作成可能

- CPUコア/メモリ
- ストレージ
- アクセラレータ
- ネットワーク
- インストールするソフトウェア



**One size does not fit all!**

# 計算機管理の手間を抑える

- ・ ハードウェア保守
- ・ ネットワーク管理/保守
- ・ 電源管理
- ・ 空調管理
- ・ 設置場所の費用/運用

計算機の規模が大きくなればなるほど  
大変に、、、



競争優位につながらない物理的管理は全てAWSにお任せ  
他社と差別化可能な部分に集中

# EC2 購入オプション

## オンデマンドインスタンス

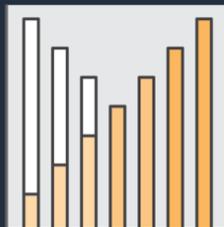
長期コミット無し、使用分への支払い(秒単位/時間単位)。Amazon EC2の定価



スパイクするようなワークロード

## リザーブドインスタンス (Savings Plans)

1年/3年の長期コミットをする代わりに大幅なディスカウント価格



一定の負荷の見通しがあるワークロード

## スポットインスタンス

Amazon EC2の空きキャパシティを活用し、**最大90%値引き**。中断が発生することがある



中断に強く、かつ様々なインスタンスタイプを活用できるワークロード

HPC 等では特にスポットインスタンスを活用することでコストパフォーマンスの良い計算が可能

# 従来のHPC環境



```
ssh -i /Users/username/.ssh/id_rsa -o StrictHostKeyChecking=no user@server
```

```
user@server:~$ cat /etc/passwd
```

```
root:x:0:0:root:/root:/bin/bash
```

```
bin:x:1:1:bin:/bin:/usr/sbin/nologin
```

```
daemon:x:2:2:daemon:/sbin:/usr/sbin/nologin
```

```
adm:x:3:3:adm:/var/adm:/usr/sbin/nologin
```

```
lp:x:4:lp:/var/spool/lpd:/usr/sbin/nologin
```

```
sync:x:5:0:sync:/sbin:/bin/sync
```

```
mail:x:6:6:mail:/var/mail:/usr/sbin/nologin
```

```
news:x:7:7:news:/var/spool/news:/usr/sbin/nologin
```

```
uucp:x:8:9:uucp:/var/spool/uucp:/usr/sbin/nologin
```

```
proxy:x:13:13:proxy:/bin:/usr/sbin/nologin
```

```
www-data:x:33:33:www-data:/var/www:/usr/sbin/nologin
```

```
www:x:34:34:www:/var/www:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwrun:x:35:35:wwwrun:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwww:x:36:36:wwwwww:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwwwwww:x:37:37:wwwwwwwww:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwwwwwwwww:x:38:38:wwwwwwwwwwww:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwwwwwwwwwwww:x:39:39:wwwwwwwwwwwwwww:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwwwwwwwwwwwwwww:x:40:40:wwwwwwwwwwwwwwwwww:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:x:41:41:wwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:x:42:42:wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:x:43:43:wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:x:44:44:wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:x:45:45:wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:x:46:46:wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:x:47:47:wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:x:48:48:wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:x:49:49:wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:/usr/sbin/nologin
```

```
wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:x:50:50:wwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwwww:/usr/sbin/nologin
```

sshアクセス

Internet VPN  
or  
専用線



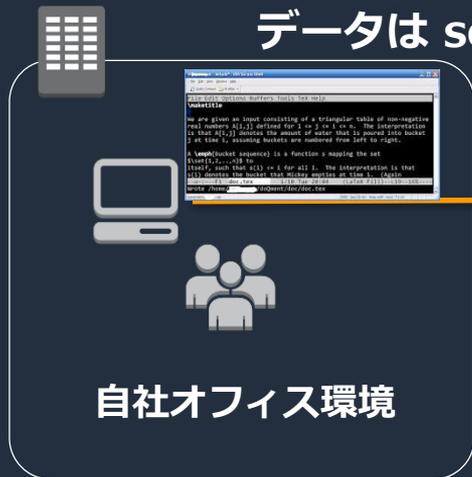
## 社内サーバールーム or データセンター環境



計算ノード

# AWSでも基本的なシステム構成は同じ

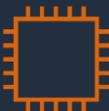
ssh端末で操作。  
データは scpで転送



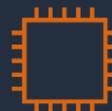
Internet  
VPN / 専用線  
SSH/SCP



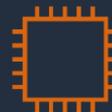
AWS クラウド環境



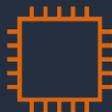
ログイン  
ノード



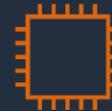
ライセンス  
サーバ



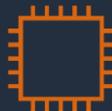
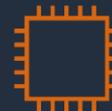
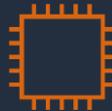
マスターサーバ



マスターサーバ  
NFSサーバ



計算ノード



# AWS における HPC 関連サービス

多様な HPC ワークロードに対応するための数多くのサービス

## コンピューート

### Amazon EC2



用途に応じて多様なインスタンスを利用可能な仮想サーバサービス



NVIDIA Tesla V100 搭載



Xilinx Virtex UltraScale+ 搭載



100 Gbps のネットワーク帯域

スポットインスタンスの活用で大幅なコスト減も可能

## ネットワーク

### Placement Group

EC2インスタンスの基盤上の配置を制御してネットワークを高速化

### Enhanced Networking

SR-IOVによるCPU負荷が低くパフォーマンスの高いネットワーク仮想化

### Elastic Fabric Adapter

libfabric 対応のアダプタにより MPI 利用のアプリケーション等を高速化

## ストレージ

### FSx for Lustre



S3連携可能な高速な分散ストレージをフルマネージドで提供

## 管理自動化

### AWS Batch



スケーラブルなバッチコンピューティングジョブをフルマネージドで管理

### AWS ParallelCluster

AWS上に HPC クラスタを構築  
AWS BatchやSGEに対応

## 可視化

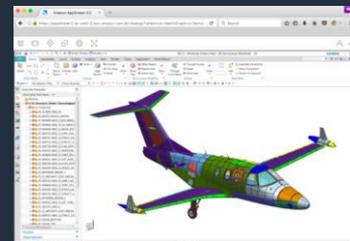
### NICE-DCV

GPUアクセラレーションに対応し、インタラクティブなアプリケーションに適したデスクトップ仮想化

### Amazon AppStream 2.0



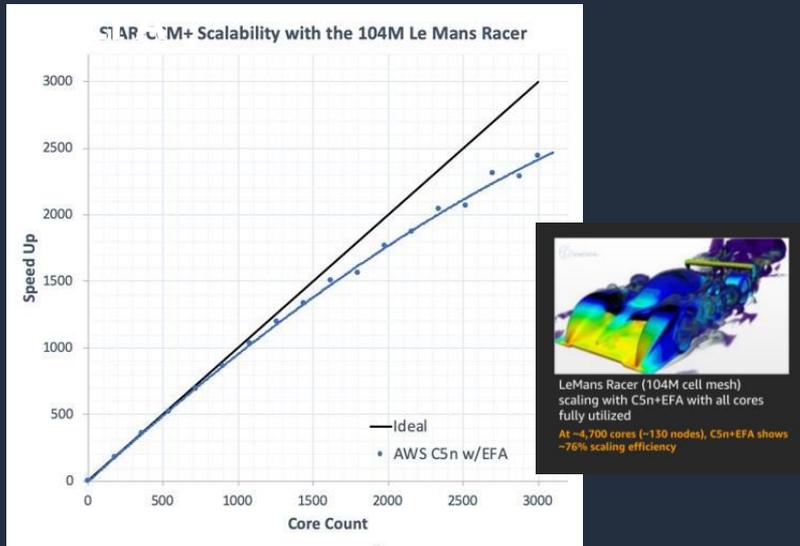
フルマネージドのアプリケーションストリーミングサービス



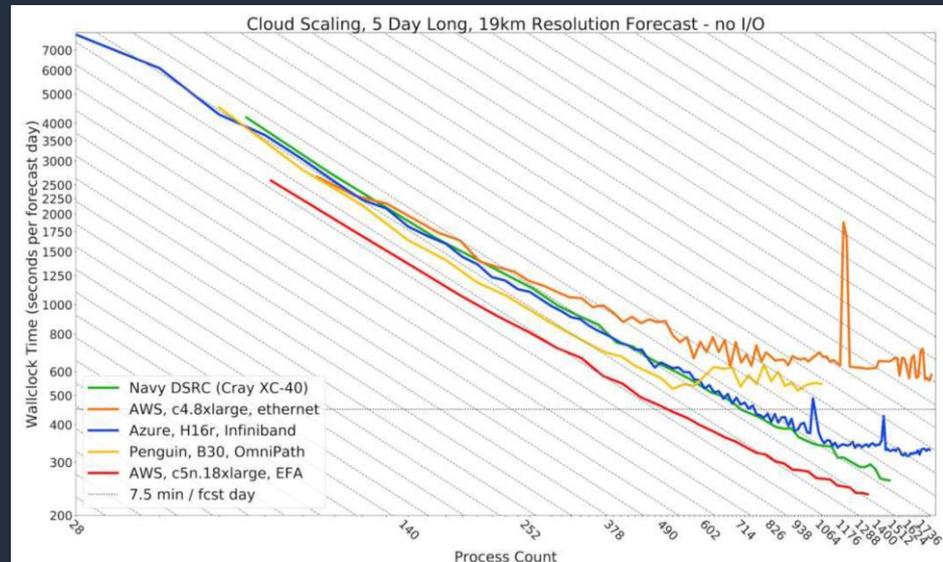
# 密結合ワークロードでのパフォーマンス

大量の MPI 通信が発生するような密結合ワークロードも、専用のネットワークアダプタであるElastic Fabric Adapter の登場により高いパフォーマンスを発揮

## Star-CCM+ with



## U.S. Navy Research 高解像気象シミュレーション



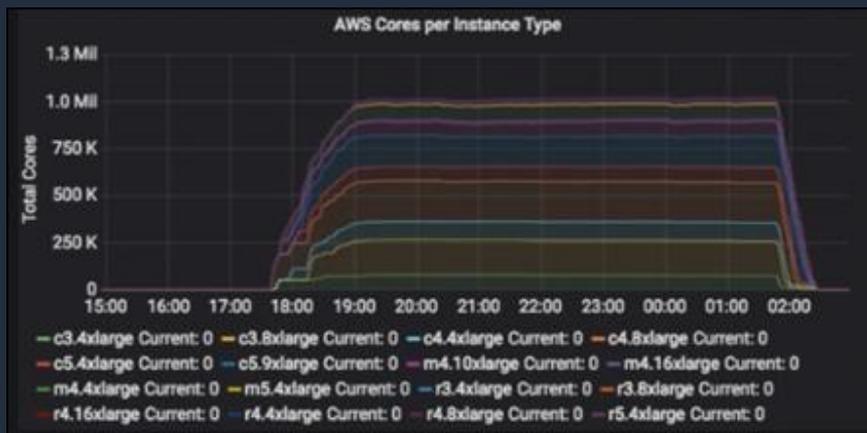
<https://aws.amazon.com/blogs/compute/running-simcenter-star-ccm->

<https://www.slideshare.net/insideHPC/navgem-on-the-cloud-computational-evaluation-of-cloud-hpc-with-a-global-atmospheric-model>

# High Throughput Computing での活用例

## Western Digital®

230,000,000 Job による処理  
ピーク時には 100 万 vCPU 使用  
20 日かかっていた処理が 8 時間で

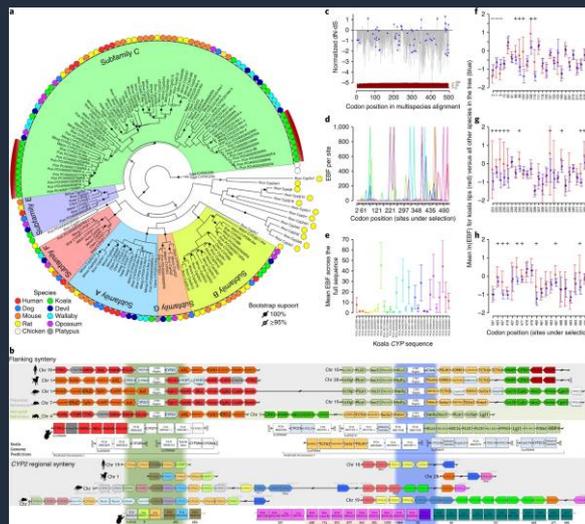


<https://aws.amazon.com/jp/blogs/news/western-digital-hdd-simulation-at-cloud-scale-2-5-million-hpc-tasks-40k-ec2-spot-instances/>



AUSTRALIAN MUSEUM

3.24 billion base pairs のシーケンス  
Amazon EC2 Spot を 300万コア・時間  
使用



<https://www.nature.com/articles/s41588-018-0153-5>

<https://aws.amazon.com/jp/blogs/aws/saving-koalas-using-genomics-research-and-cloud-computing/>

# re:Invent 2019 Keynote: Monday Night Live

re:Inventing High Performance Computing Infrastructure



Peter DeSantis, VP of AWS Global Infrastructure and Customer Support

<https://www.youtube.com/watch?v=GPUWATKe15E>

# re:Invent 2019 Keynote: Monday Night Live

キーノートでのメインテーマの一つが HPC

## RE:INVENT SUPERCOMPUTER

- ✓ BUILD HIGH SPEED, LOW LATENCY, LARGE CAPACITY DATA CENTER PLACEMENT GROUP NETWORK
- ✓ MOVE ALL VIRTUALIZATION TO OPTIMIZED AWS (CHIPS AND HARDWARE)
- ✓ DEVELOP HARDWARE-OPTIMIZED, KERNEL BYPASS NETWORKING STACK
- ✓ INTEGRATE WITH EXISTING HPC LIBRARIES AND APPLICATIONS

## HPC customers



Formula One Rob Smedley もゲスト登壇し  
AWS 上で行ったダウンフォース影響を解析するための  
CFDシミュレーションについて紹介

参考: <https://monoist.atmarkit.co.jp/mn/articles/1912/06/news085.html>

# HPC Wire Awards 2019 @ SC19

## Best HPC Cloud Platform

- Readers' Choice: Amazon Web Services

## Best Use of HPC in the Cloud

- Readers' Choice: Using AWS, the Ocean Conservancy performed over 75 50-year ocean simulations to understand stressors on the ocean and the intricate and potentially catastrophic effects climate change is having on our underwater ecosystems.
- Editors' Choice: Aстера Labs used Six Nines and a **100% AWS cloud-based EDA workflow** to design the industry's first PCIe 5.0 retimer.

## Best Use of HPC in Manufacturing

- Editors' Choice: Western Digital created **a million-vCPU AWS cluster** using Univa software to simulate crucial elements of upcoming head designs for its next-generation hard disk drives.

## Best Use of HPC in Financial Services

- Editors' Choice: W.R. Hambrecht developed and refined a machine learning-based investment assessment system, running on AWS infrastructure, that the company says has improved its rate of picking successful start-ups by 3X.

## Top 5 New Products or Technologies to Watch

- Elastic Fabric Adapter from AWS



# まとめ: HPC on AWS

- クラウドのスケーラビリティを活用し、必要な時に必要な量の必要なタイプの計算リソースを確保することが可能
- HPC の基本となる構成はオンプレミス環境と同様
- 豊富な HPC 関連サービスがあり、既に様々な業種のお客様が AWS 上で HPC ワークロードを実施中



re:Invent 2019 等での HPC 関連サービスアップデートについてはこちらをご参照ください  
<https://www.slideshare.net/DaisukeMiyamoto6/hpc-on-aws-2019>

# AWS ParallelCluster とは



# Why AWS ParallelCluster ?

- 実際に AWS 上に Auto-Scale するクラスタ環境を作成するのは大変
  - EC2 以外にもストレージなど、AWS の他のサービスも利用したい
- HPC アプリケーションの知識に加えて AWS やインフラの知識も必要**



## **AWS ParallelCluster で解決**

- 数コマンド操作で Auto-Scale するクラスタ環境をセットアップ
- EFA や FSx for Lustre など AWS の様々なサービスと連携
- 研究者が自分専用のクラスタ環境を作成することも可能

# AWS ParallelCluster とは

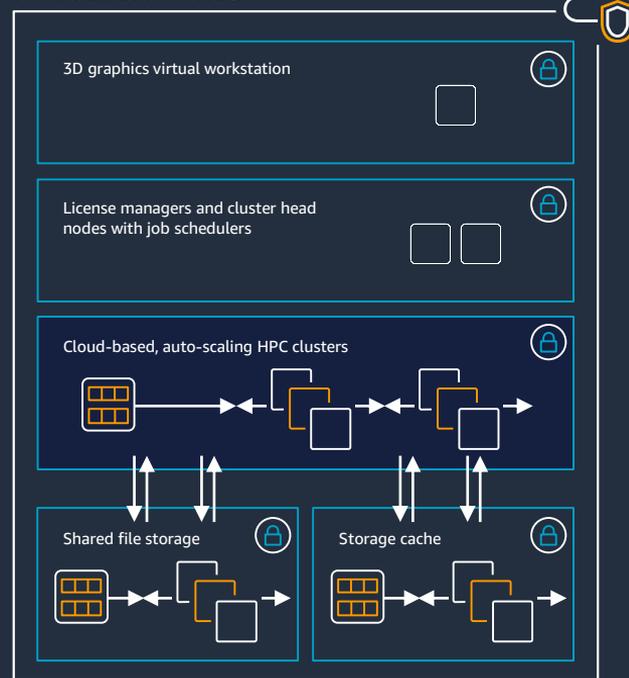
数コマンド操作でジョブ投入に応じて自動でスケールするクラスタを  
AWS 上に構築可能な AWS 公式のオープンソースソフトウェア

## AWS ParallelCluster の特徴

- 既存のHPC向けジョブスケジューラと Auto-Scaling を連携した環境を作成  
SGE / Torque / Slurm に対応
- MPI/NCCL 環境がセットアップ済みで、すぐに利用可能
- 使用するOSやネットワーク環境、ストレージ構成などを柔軟にカスタマイズ可能
- オープンソースソースのプロジェクトであり、誰でもソースコードを入手可能

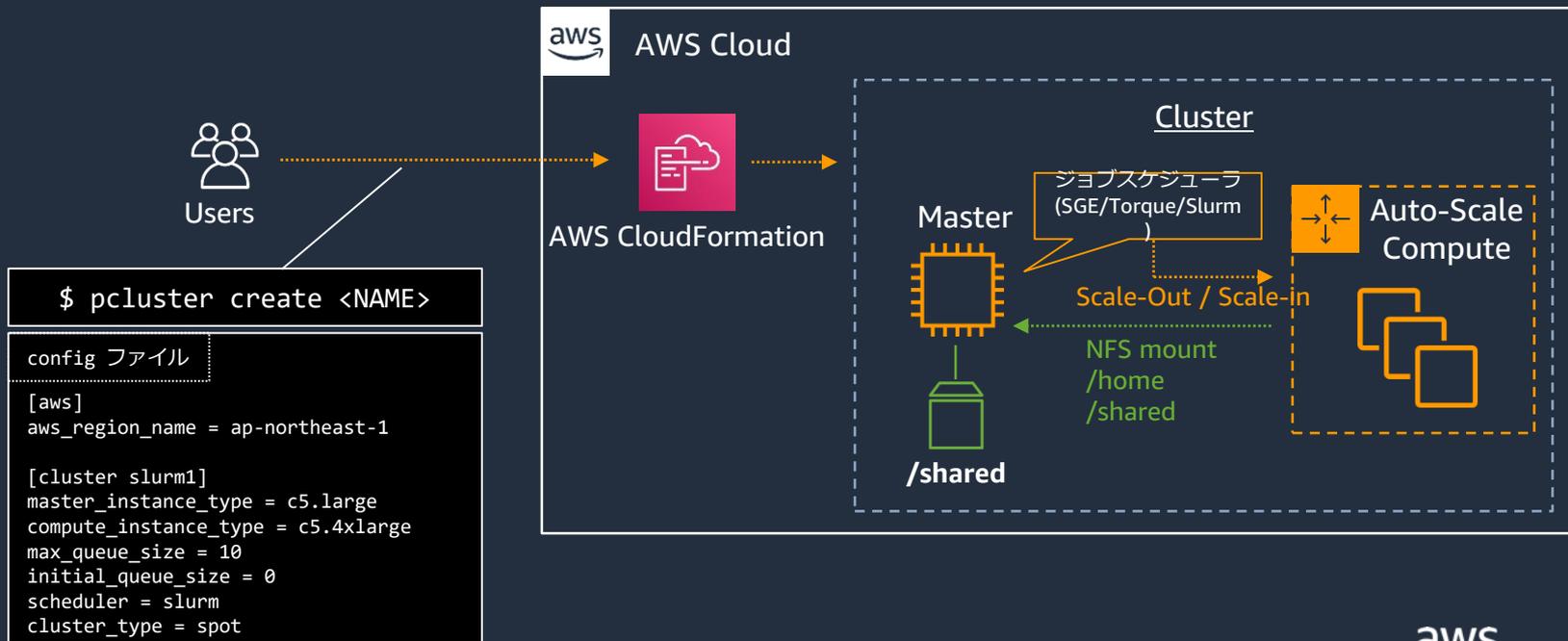
<https://github.com/aws/aws-parallelcluster>

HPC stack on AWS



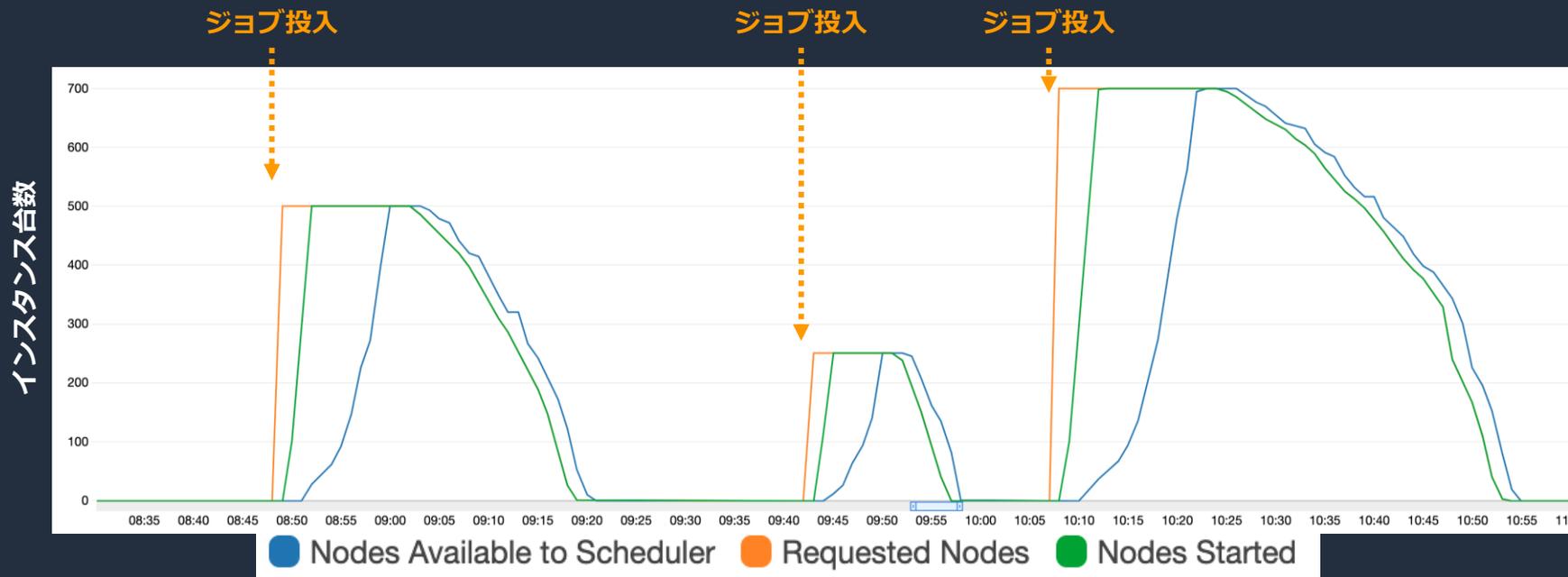
# AWS ParallelCluster の利用イメージ

まずは自分のPC等に ParallelCluster ソフトウェアをインストール  
config ファイルを記述し、pcluster create コマンドを実行することで、  
ジョブ投入に応じて Auto-Scale するクラスタ環境が自動的に作成される



# AWS ParallelCluster によるスケーリング (参考例)

ParallelCluster により、Compute Node が 0 台から数百台規模まで需要に応じてスケーリングするクラスタ環境を作成することが可能



# AWS ParallelCluster の価格と利用可能リージョン

- AWS ParallelCluster の利用自体は**無料**（オープンソースとして提供）
  - AWS ParallelCluster によって使用されるサービスには課金が発生
- 利用可能リージョン（2020年2月13日現在）
  - 米国東部（バージニア北部、オハイオ） 米国西部（北カルフォルニア、オレゴン）
  - アジアパシフィック（**東京**、シドニー、シンガポール、ソウル、ムンバイ、香港）
  - カナダ（中部）
  - 中国（北京、寧夏）
  - 欧州（フランクフルト、アイルランド、ロンドン、パリ、ストックホルム）
  - 南米（サンパウロ）
  - AWS GovCloud（米国東部、米国西部）

# AWS ParallelCluster と AWS Batch の使い分け



## AWS ParallelCluster

- **SGE/Torque/Slurm** 等の利用者に馴染みのあるジョブスケジューラを利用可能
- 単一のジョブが大量の CPU core を使用する密結合ワークロードに向いている
- **Pros:** 既存の HPC クラスタからの移行が容易
- **Cons:** 単一の AZ、単一のインスタンスタイプでの利用となるため、可用性確保には工夫が必要



## AWS Batch

- **フルマネージド**の独自ジョブスケジューラ
- 少数の CPU core を使用するジョブを大量に実行する疎結合・High Throughput Computing ワークロードに向いている
- **Pros:** フルマネージドサービスでありコンテナさえ用意すれば計算基盤の管理は不要
- **Pros:** 複数 AZ や複数インスタンスタイプの利用が可能であり、可用性を確保しやすい
- **Cons:** コンテナ化やスケジューラ対応が必要

# その他、関連サービスとの使い分け

1分程度でジョブが完了するワークロードの場合

- AWS Lambda / AWS Step Functions  
- S3 Batch

機械学習用途でモデル作成やエンドポイントへのデプロイまで同一のインターフェイスで行いたい場合

- Amazon SageMaker 

MapReduce で処理が簡単に記述できる場合

- Amazon EMR 

# Why AWS ParallelCluster ? (再掲)

- 実際に AWS 上に Auto-Scale するクラスタ環境を作成するのは大変
  - EC2 以外にもストレージなど、AWS の他のサービスも利用したい
- HPC アプリケーションの知識に加えて AWS やインフラの知識も必要**



## **AWS ParallelCluster で解決**

- 数コマンド操作で Auto-Scale するクラスタ環境をセットアップ
- EFA や FSx for Lustre など AWS の様々なサービスと連携
- 研究者が自分専用のクラスタ環境を作成することも可能

# AWS ParallelCluster の使い方

# AWS ParallelCluster 利用の準備

- AWS ParallelCluster のインストール
  - `$ sudo pip install aws-parallelcluster`
  - これにより、pcluster コマンドが利用可能に
  - IAM アクセスキー等の設定も行う
    - テスト時は Administrator 権限を付与した IAM User の使用を推奨 (最小IAM権限については後述)
    - Cloud9 を利用することで権限設定が容易に
- クラスタへの SSH 接続用に EC2 KeyPair を作成
  - [https://docs.aws.amazon.com/ja\\_jp/AWSEC2/latest/UserGuide/ec2-key-pairs.html#having-ec2-create-your-key-pair](https://docs.aws.amazon.com/ja_jp/AWSEC2/latest/UserGuide/ec2-key-pairs.html#having-ec2-create-your-key-pair)

# クラスタの設定 (config) の作成

```
$ pcluster configure
Allowed values for AWS Region ID:
1. ap-northeast-1
2. ap-northeast-2
~~~ 中略 ~~~
AWS Region ID [us-east-1]:
Allowed values for Scheduler:
1. sge
2. torque
3. slurm
4. awsbatch
Scheduler [sge]:
Allowed values for Operating System:
1. alinux
4. centos7
6. ubuntu1804
Operating System [centos7]:
Minimum cluster size (instances) [0]:
Maximum cluster size (instances) [1000]:
Master instance type [c5.9xlarge]:
Compute instance type [c5n.18xlarge]:
```

`pcluster configure` を実行することで、対話的な初期設定が可能  
最終的に、  
`~/.parallelcluster/config` に設定が出力される

## 設定可能な項目

- リージョン
- キーペア
- OS
- スケジューラ
- インスタンスタイプ・最大起動数
- VPC/Subnet

[https://docs.aws.amazon.com/ja\\_jp/parallelcluster/latest/ug/commands.html](https://docs.aws.amazon.com/ja_jp/parallelcluster/latest/ug/commands.html)

# クラスタの作成・状態確認・ログイン

```
$ pcluster create mycluster
Beginning cluster creation for cluster:
myclusterCreating
stack named: parallelcluster-mycluster
Status: CREATE_COMPLETE
MasterServer: RUNNING
MasterPublicIP: 3.215.21.118
ClusterUser: centos
MasterPrivateIP: 10.0.15.151
$ pcluster ssh mycluster -i mykey.pem
[centos@ip-10-0-15-151 ~]$
```

`pcluster create <CLUSTER_NAME>`

- クラスタを作成を開始する
- 作成には5分から10分程度必要

`pcluster ssh <CLUSTER_NAME>`

- SSH を用いてクラスタに接続
- コマンドの最後に `-i` などのSSH オプションを指定可能

[https://docs.aws.amazon.com/ja\\_jp/parallelcluster/latest/ug/commands.html](https://docs.aws.amazon.com/ja_jp/parallelcluster/latest/ug/commands.html)

# その他の pcluster コマンド

- `pcluster delete <CLUSTER_NAME>`
  - クラスターの削除
- `pcluster list`
  - クラスタ一覧の取得
- `pcluster status <CLUSTER_NAME>`
  - クラスタ情報の取得
- `pcluster update <CLUSTER_NAME>`
  - クラスタバージョンのアップデート
- `pcluster dcv connect <CLUSTER_NAME>`
  - NICE-DCV を有効化したクラスタで、有効期限付き接続情報の発行

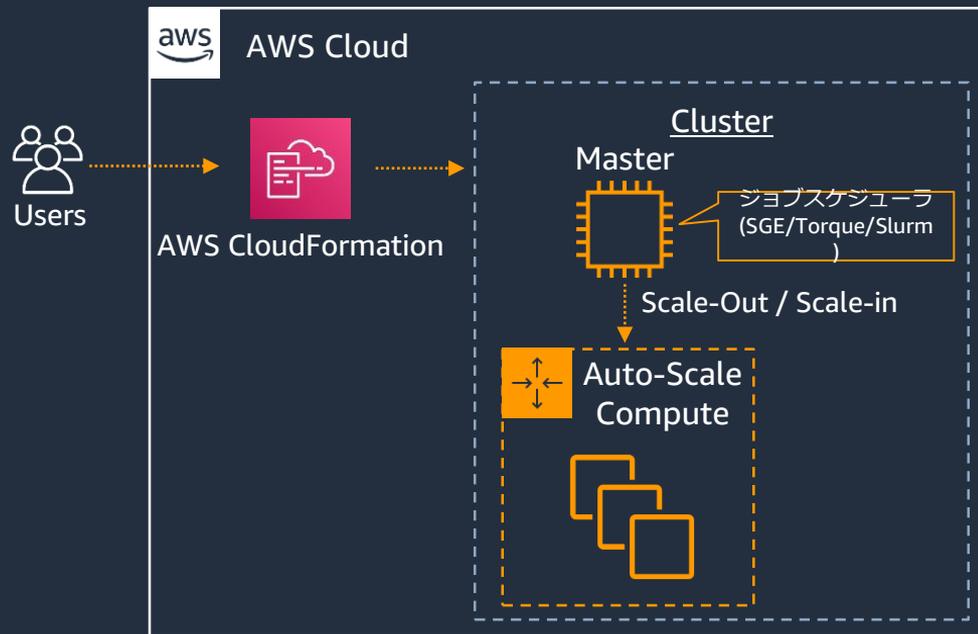
[https://docs.aws.amazon.com/ja\\_jp/parallelcluster/latest/ug/commands.html](https://docs.aws.amazon.com/ja_jp/parallelcluster/latest/ug/commands.html)

# Demo



# デモの流れ

- ParallelCluster のインストール
- pcluster configure (初期設定)
- pcluster create (クラスタ作成)
- ssh ログイン
- ジョブ投入
- Compute Node 起動の確認
- クラスタ削除





# AWS ParallelCluster の設定

## 基本編

# AWS ParallelCluster のクラスタ構成のオプション

ParallelCluster の詳細設定は、[~/.parallelcluster/config](#) ファイルで行う  
\$ pcluster configure コマンドで生成される他、直接エディタで編集も可能

- Master/Compute のインスタンスタイプ・購入方法の変更
- ストレージ設定
- ネットワーク設定
- 起動スクリプト
- タグ
- etc.. 様々な設定が可能

**アプリケーションや要件にあったクラスタを作成可能！**

※ 一部の設定項目はジョブスケジューラに SGE/Torque/Slurm を指定した場合と、AWS Batch を指定した場合で挙動が異なる。特に説明のない場合は SGE/Torque/Slurm を前提として紹介する

# config ファイルの読み方

```
[aws]
aws_region_name = ap-northeast-1

[global]
cluster_template = mycluster .....

[cluster mycluster] ← .....
master_instance_type = c5.large
compute_instance_type = c5.4xlarge
cluster_type = spot
ebs_settings = shared .....
vpc_settings = public .....

[vpc public] ← .....
master_subnet_id = subnet-*****
vpc_id = vpc-*****

[ebs shared] ← .....
volume_type = gp2
volume_size = 400
```

- [aws] や、[cluster]といったセクションによって区切られている
- [cluster mycluster] といった形式でセクションに名前をつけることができ、他のセクションから参照される
  - 左図の矢印を参照

# クラスタ設定の基本

config ファイルの記述で以下の項目を設定可能

- Master/Compute のインスタンスタイプ
- 使用するインスタンス台数の最小/最大値
- ジョブスケジューラ
- OS
- On-demand / Spot

```
[cluster default]
vpc_settings = public
key_name = private
master_instance_type = c5.large
compute_instance_type = c5.4xlarge
initial_queue_size = 0
max_queue_size = 10
maintain_initial_size = false
scheduler = slurm
base_os = centos7
cluster_type = spot
```

<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/cluster-definition.html>

# Master/Compute のインスタンスタイプ変更

- master\_instance\_type / compute\_instance\_type で設定可能
- GPU や FPGA を搭載したインスタンスタイプも選択可能



- 計算には直接関わらないが、クラスタ規模が大きい場合は、Master のサイジングも重要
  - デフォルト構成では、各Compute ノードは Master のストレージを NFS マウントしているため、十分な Master にもネットワーク帯域と EBS最適化スループットが必要

```
[cluster default]
vpc_settings = public
key_name = private
master_instance_type = c5.large
compute_instance_type = c5.4xlarge
initial_queue_size = 0
max_queue_size = 10
maintain_initial_size = false
scheduler = slurm
base_os = centos7
cluster_type = spot
```

<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/cluster-definition.html>

# スケーリング台数設定

## スケーリング時の最小・最大台数の指定

- `initial_queue_size` : クラスタ作成時の初期インスタンス台数
- `max_queue_size` : 最大インスタンス台数
- `maintain_initial_size` :
  - `true` : 常に `initial_queue_size` 以上の台数を確保する
  - `false` : ジョブのない場合は0台までスケールイン
- 参考: [scaling] セクションの `scaledown_idletime` を指定することで、スケールインまでの待ち時間を指定可能

```
[cluster default]
vpc_settings = public
key_name = private
master_instance_type = c5.large
compute_instance_type = c5.4xlarge
initial_queue_size = 0
max_queue_size = 10
maintain_initial_size = false
scheduler = slurm
base_os = centos7
cluster_type = spot
```

<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/cluster-definition.html>

# ジョブスケジューラを選択

- scheduler 設定により、利用するジョブスケジューラを選択可能
- 指定可能な値は以下（デフォルトは sge ）
  - SGE: sge
  - Torque: torque
  - Slurm: slurm
  - AWS Batch: batch
- スケジューラのバージョンは、ParallelClusterのバージョンによって異なる

```
[cluster default]
vpc_settings = public
key_name = private
master_instance_type = c5.large
compute_instance_type = c5.4xlarge
initial_queue_size = 0
max_queue_size = 10
maintain_initial_size = false
scheduler = slurm
base_os = centos7
cluster_type = spot
```

<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/cluster-definition.html>

# オペレーティングシステムの選択

- base\_os 設定により、利用するオペレーティングシステムを選択可能
- 指定可能な値は以下  
(デフォルトは alinux )
  - Amazon Linux: alinux
  - Amazon Linux2: alinux2
  - CentOS 6: centos6
  - CentOS 7: centos7
  - Ubuntu 16.04: ubuntu1604
  - Ubuntu 18.04: ubuntu1804
- ログインユーザ名はOSにより異なる
- NICE-DCV連携等、一部機能は特定のOSでしかサポートされていない場合も

```
[cluster default]
vpc_settings = public
key_name = private
master_instance_type = c5.large
compute_instance_type = c5.4xlarge
initial_queue_size = 0
max_queue_size = 10
maintain_initial_size = false
scheduler = slurm
base_os = centos7
cluster_type = spot
```

<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/cluster-definition.html>

# Spot インスタンスの利用

Spot インスタンスを利用することで、  
On-demand 価格の最大 9 割引で利用可能

- `cluster_type` に `true` を指定することで、  
Compute ノードに Spot インスタンスが利用される（デフォルトは `ondemand`）
- Spot 割引率は時価で変動し、インスタンスタイプや Region/AZ によっても異なる
- 中断が発生する可能性にも注意

```
[cluster default]
vpc_settings = public
key_name = private
master_instance_type = c5.large
compute_instance_type = c5.4xlarge
initial_queue_size = 0
max_queue_size = 10
maintain_initial_size = false
scheduler = slurm
base_os = centos7
cluster_type = spot
```

<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/cluster-definition.html>

[https://www.slideshare.net/AmazonWebServicesJapan/20190306-aws-black-belt-online-seminar-amazon-](https://www.slideshare.net/AmazonWebServicesJapan/20190306-aws-black-belt-online-seminar-amazon-ec2)

[ec2](#)

# AWS ParallelCluster の設定 パフォーマンス編

# HPC on AWS におけるパフォーマンスの基本

まずはシンプルな構成で試してみる、動かしてみる事が重要

CPU/メモリ/ネットワーク/ストレージ等、ボトルネックに応じて対処  
(現実的なコスト・計算時間で収まっているのであれば、深追いしないのも一つの戦略)

パフォーマンスチューニングにおける基本的な考え方は AWS 上でも大きく変わるわけではない

# コンピューート

## • vCPU 表記

- AWS での vCPU 表記は Intel Hyper-Threading Technology における 1 thread (= 1 論理コア) を示しており、物理コア数は vCPU 数の半分となる点に注意 (例: 72 vCPU = 36 物理コア)

## • CPU設定

- Intel Hyper-Threading Technology の無効化や、NUMA設定、Pinning等は **オンプレミス環境と同様**に行うことができる
- 特に最大のインスタンスサイズでは 複数 Socket 構成となっている事が多いため注意

## • インスタンス選択

- C5/C4 (コンピューート最適化) を中心に、より多くのメモリを必要とする場合に、M5/M4 (汎用) や R5/R4 (メモリ最適化) を選択
- 1 コアあたりのパフォーマンスを求める場合は Z1d も検討 (最大クロック 4 GHz)
- M5a/R5a といった AMDタイプインスタンスによりコストメリットが生まれる場合もある
- 世代の新しいインスタンスタイプの方が性能は良いが、旧世代は Spot インスタンス価格が下がっていることもあるため、**コストパフォーマンスを考慮して選択**

## • リージョン選択

- 10,000 vCPU ~ など大規模利用を行う場合は、インスタンスコストの安価な北米リージョン (us-east-1 等) の利用を検討

# Intel Hyper-Threading Technology の無効化

HPC アプリケーションでは、Intel HTT を無効化することでパフォーマンスが向上することもある

- `disable_hyperthreading = true` を指定（デフォルトは `false`、Intel HTT 有効）
- 有効、無効両方のケースでベンチマークを実施することを推奨

```
[cluster default]
vpc_settings = public
key_name = private
master_instance_type = c5.large
compute_instance_type = c5.4xlarge
initial_queue_size = 0
max_queue_size = 10
maintain_initial_size = false
scheduler = slurm
base_os = centos7
cluster_type = spot
disable_hyperthreading = true
```

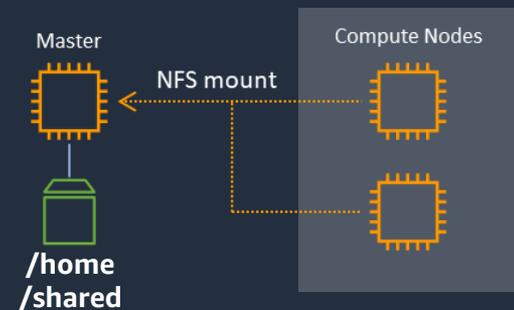
<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/cluster-definition.html>

# ストレージの選択

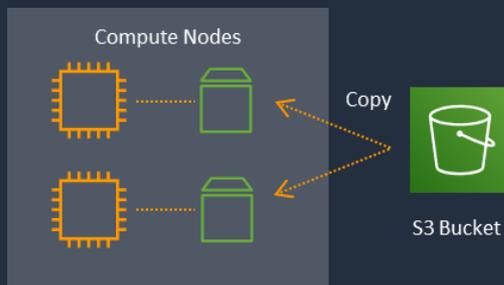
データの移動パターン等によって選択

- **NFS on Master**: ParallelClusterのデフォルト構成、扱いやすいが、Masterのインスタンスサイズや、EBS の性能に注意
- **S3 to local disk**: ジョブ開始時にS3等からローカルディスクにデータをコピー  
データ転送が最初と最後の場合に選択
- **FSx for Lustre**: 高速かつスケーラブルな共有ディスクが必要な場合に選択

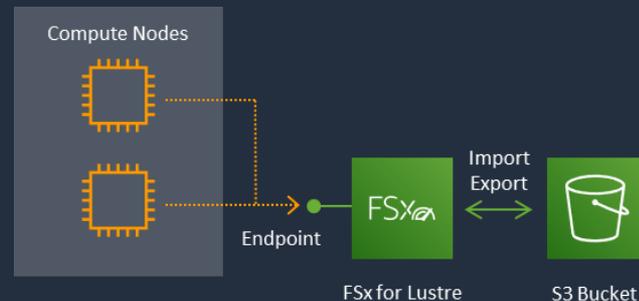
**(default)**



**S3 to local disk**



**FSx for Lustre**



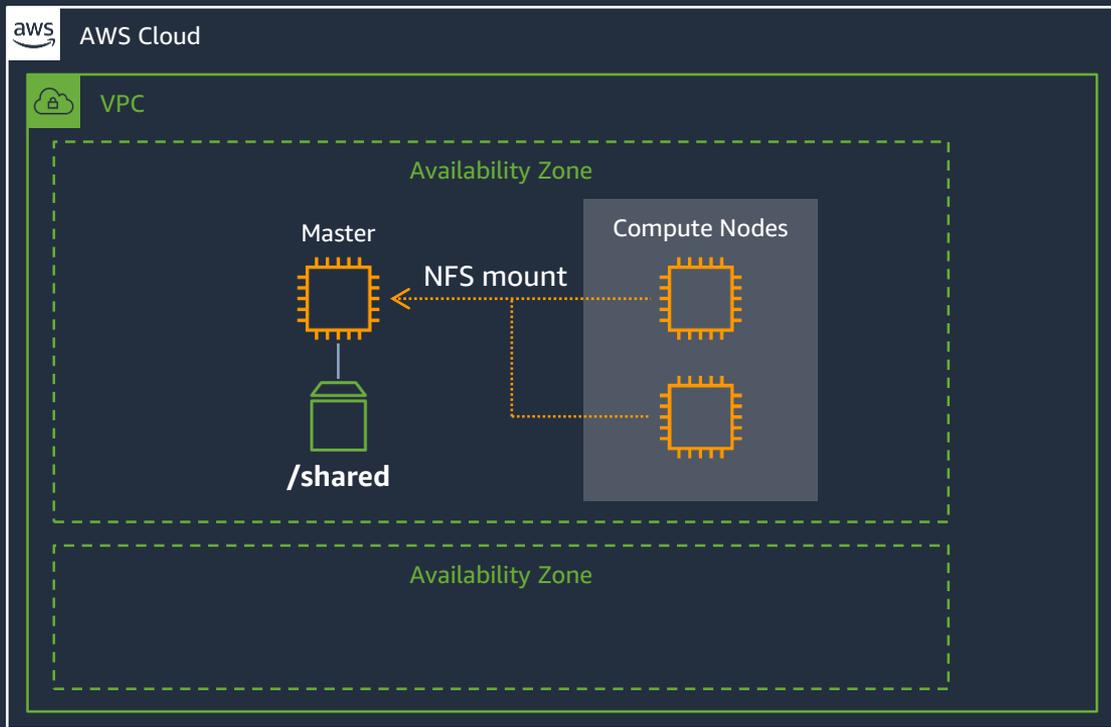
# Master Node 上のストレージを NFS で利用

- ParallelClusterのデフォルト構成
- EBSの設定により、幅広いパフォーマンスに対応可能
  - gp2: 1 GBあたり 3 IOPSのベース性能 + 容量に応じたバースト
  - io1: 必要なIOPSを指定可能 (最大 64,000 IOPS)

## 注意点:

- EBS性能に加え、Master Nodeのパフォーマンス（特にネットワーク帯域）にも注意
- 特にCompute Nodeが多い場合にはスケールしない
- EBSは内部でレプリケーションされているが、Single AZ構成

用途に応じたEBSパフォーマンスの設定が重要  
定期的なスナップショット取得も検討



# 参考: SSD-backed EBS の性能

ランダムI/Oの多いワークロードに適している  
汎用的な gp2 と高い性能を出せる io1 の2種類

	汎用SSD: gp2	プロビジョンドIOPS: io1
IOPS	<u>1 GB あたり3 IOPSのベースIOPS</u> 容量に応じて最大 3,000 IOPS までバースト可能	<u>必要な IOPS 値を指定可能</u>
最大IOPS	5,334 GB以上時: 16,000 IOPS	64,000 IOPSまで指定可能 Nitro世代の場合
最大スループット	334 GB 以上利用時 250 MB /s	1,000 MiB /s 2,000 IOPS 以上かつ Nitro世代の場合

[https://docs.aws.amazon.com/ja\\_jp/AWSEC2/latest/UserGuide/EBSVolumeTypes.html](https://docs.aws.amazon.com/ja_jp/AWSEC2/latest/UserGuide/EBSVolumeTypes.html)

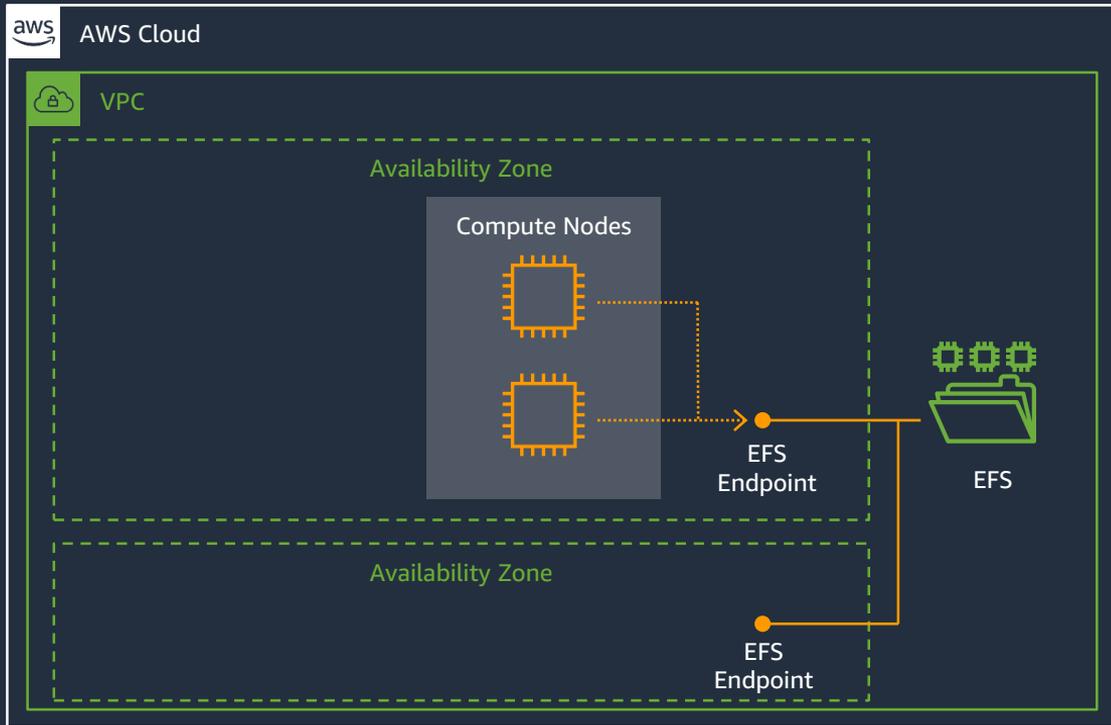
<https://aws.amazon.com/jp/about-aws/whats-new/2018/12/amazon-ebs-increases-performance-of-general-purpose-ssd-gp2-volumes/>

# Elastic File System を使用

- NFS互換かつ高い可用性・耐久性を持つEFSを使用
- POSIX互換のためユーザー情報などのメタデータを保持して運用することも可能

## 注意点:

- EFSの性能特性上、小さなファイルの頻繁な読み書きには向かない
- EFSのスループットは使用しているEFS容量に依存するため、利用初期・ベンチマーク時にはダミーファイルを置くことも検討



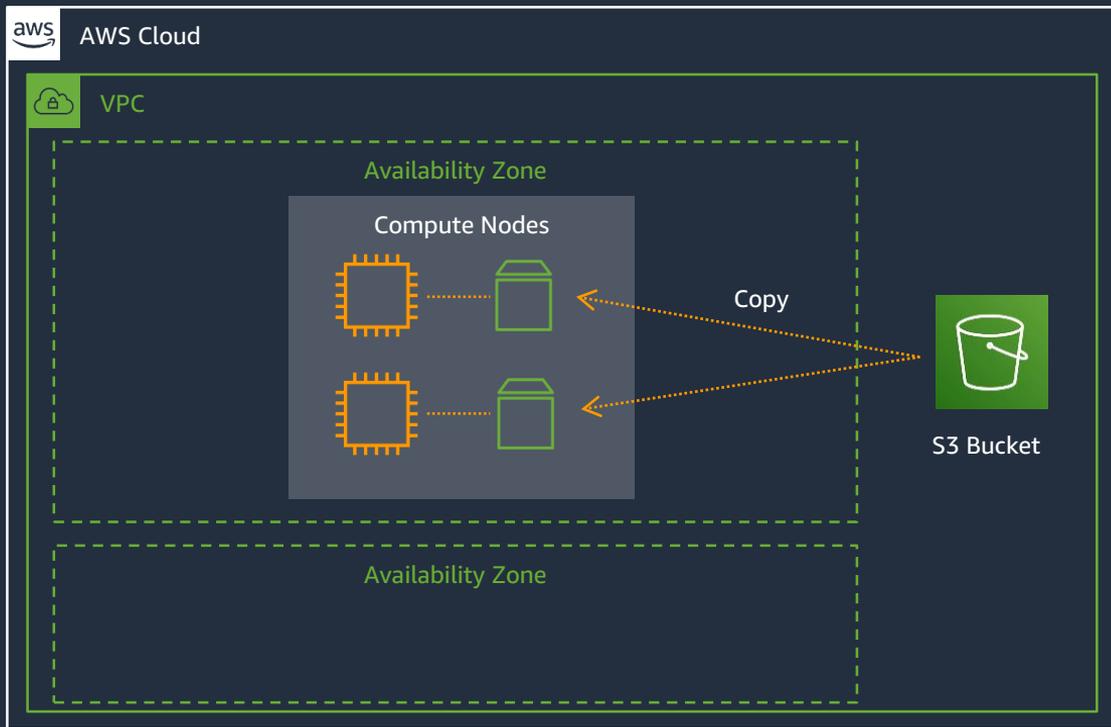
クラウドネイティブなファイルシステムによる高い可用性・耐久性  
レイテンシ・スループットなどの性能特性には注意が必要

# Compute Node の EBS / Instance Store を使用

- Compute Nodeに接続されているEBSまたは、Instance Storeを使用し、ジョブ開始時にS3/EFSからコピー
- 低レイテンシ・高スループット

## 注意点:

- S3からのデータコピー中もインスタンスを起動しておく必要がある
- S3上に大量のファイルを置く場合はコピーオーバーヘッドが大きいいため、事前にアーカイブする
- Instance Storeの有無及び性能はインスタンスタイプに依存する
- ジョブが終了してもデータは残るため、明示的な削除を行うことを推奨



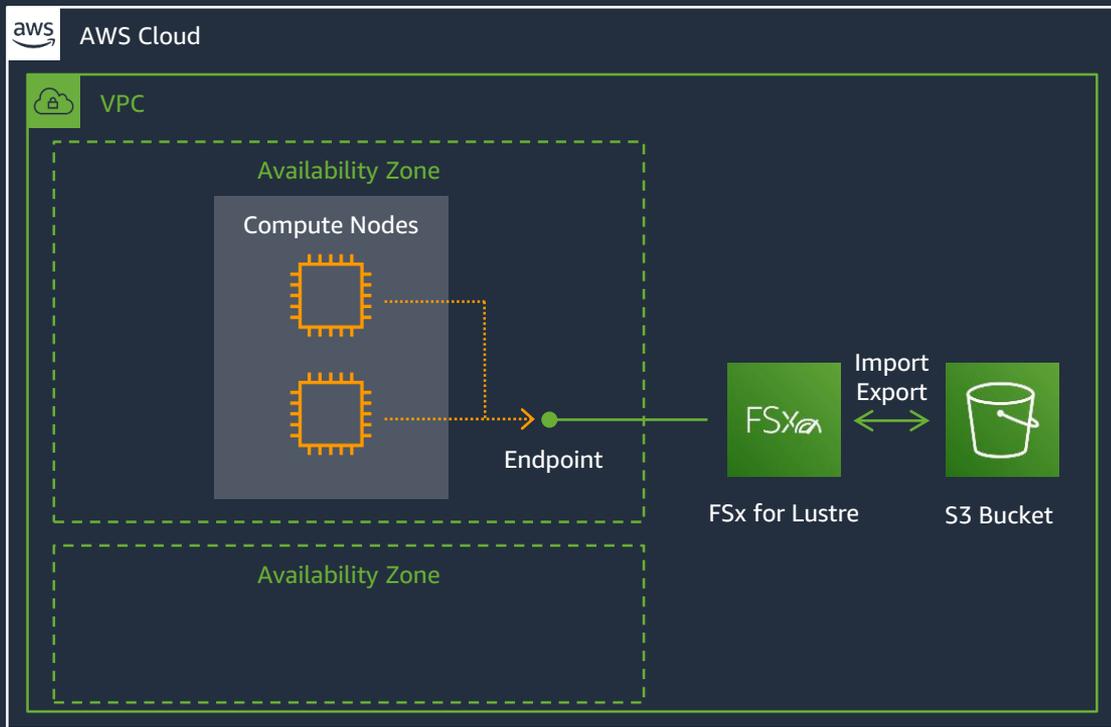
低レイテンシ・高スループットが可能  
ジョブの開始時・終了後にデータのコピーを行う必要がある

# FSx for Lustre を使用

- 数百GB/sといった高いパフォーマンスにも対応可能
- 通常のファイルシステムと同様に利用可能
- S3と連携し透過的な import、明示的な export が可能

## 注意点:

- FSx for Lustreを永続領域として使用することは非推奨であり、S3との連携を検討
- S3への export 時にはメタデータは保存されない
- 性能は Compute Nodes の台数やネットワーク帯域にも依存



分散ストレージによる高いパフォーマンス  
S3 への export については明示的に行う必要がある

# Storage Service の使い分け

どれか一つの方法のみに限定する必要はなく、データの種類や容量によって組み合わせて利用することが重要

## Good:

- ソフトウェア: EBS on Master, EFS
- 計算用一時領域: EBS/Instance Store on Compute, FSx for Lustre
- 計算元データ/計算結果: S3, FSx for Lustre

## Bad:

- S3を3rd partyソフトウェア等でmountして処理
- EFSへの粒度の細かいアクセス
- FSx for Lustre を永続領域として使用

# 共有 EBS ストレージ容量・性能の変更

Master にアタッチされ、Compute から NFS でマウントされている EBS ストレージの容量等を変更可能

- volume\_type , volume\_size, volume\_iops を指定
- デフォルトでは、/shared として各ノードからマウント済み
- 特定のスナップショットからボリュームを作成する事も可能
- その他、Master / Compute の root volume のサイズを変更したい場合は [cluster] セクションの master\_root\_volume\_size / compute\_root\_volume\_size を指定

```
[cluster default]
ebs_settings = ebs1
```

```
[ebs ebs1]
volume_type = io1
volume_size = 100
volume_iops = 500
```

<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/ebs-section.html>

# FSx for Lustre ファイルシステムの使用

FSx

高速な分散ストレージサービスである FSx for Lustre と連携可能

- `shared_dir` : Master/Compute 各ノードでのマウントポイントを指定
- `storage_capacity` を指定した場合は新規にファイルシステムが作成される
  - `export_path` , `import_path` の指定により S3 連携機能も利用可能
  - `deployment_type` の指定により `SCRATCH_2` や `PERSISTENT_1` といった新しいストレージタイプも利用可能
- `fsx_fs_id` を指定した場合は既存のファイルシステムが利用される

```
[cluster default]
fsx_settings = fs1
```

```
[fsx fs1]
shared_dir = /fsx
storage_capacity = 4400
deployment_type = SCRATCH_2
export_path = s3://bucket/folder
import_path = s3://bucket
```

<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/fsx-section.html>

<https://www.slideshare.net/AmazonWebServicesJapan/20190319-aws-black-belt-online-seminar-amazon-fsx-for-lustre>

# ネットワークパフォーマンス

MPI による通信が頻繁に発生するワークロードでは、Cluster Placement Group や、Elastic Fabric Adapter の利用を検討

- **Cluster Placement Group**: AZ 内の、できるだけ物理的に近いハードウェア上でインスタンスを起動するように指定  
インスタンス間通信が低レイテンシ化
- **Elastic Fabric Adapter**: MPI/NCCL に特化した専用の低レイテンシネットワークアダプタ
  - EFA 対応 MPI: OpenMPI 4.0.2 、 Intel MPI 2019 Update 6 が対応
  - EFA 利用可能インスタンスタイプ: c5n.18xlarge, c5n.metal, i3en.24xlarge, i3en.metal, inf1.24xlarge, m5dn.24xlarge, m5n.24xlarge, r5dn.24xlarge, r5n.24xlarge, p3dn.24xlarge (2020年3月時点)

※ そもそもノード間通信を発生させないために、c5.24xlarge (96 vCPU) 等大きなインスタンスサイズを使用することも検討

[https://docs.aws.amazon.com/ja\\_jp/AWSEC2/latest/UserGuide/placement-groups.html](https://docs.aws.amazon.com/ja_jp/AWSEC2/latest/UserGuide/placement-groups.html)

[https://docs.aws.amazon.com/ja\\_jp/AWSEC2/latest/UserGuide/efa.html](https://docs.aws.amazon.com/ja_jp/AWSEC2/latest/UserGuide/efa.html)

# Elastic Fabric Adapter の有効化

MPI に特化した低レイテンシネットワークアダプタであるEFAを有効化する

- `enable_efa = compute` 指定だけでなく、`placement_group = DYNAMIC` の指定も必要
- ParallelCluster 2.5.0 以降では、`module` コマンドで OpenMPI と Intel MPI を選択可能  
(デフォルトは OpenMPI だが、Intel MPI の利用によりパフォーマンスが向上する例もある)
- EFA利用環境でも、環境変数設定により、EFAの有効化・無効化を切り替え可能
  - `export FI_PROVIDER=sockets`
  - `export FI_PROVIDER=efa`

```
[cluster default]
compute_instance_type = c5n.18xlarge
placement_group = DYNAMIC
enable_efa = compute
```

<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/cluster-definition.html>

[https://docs.aws.amazon.com/ja\\_jp/AWSEC2/latest/UserGuide/efa-start.html](https://docs.aws.amazon.com/ja_jp/AWSEC2/latest/UserGuide/efa-start.html)

<https://aws.amazon.com/blogs/opensource/scale-hpc-workloads-elastic-fabric-adapter-and-aws-parallelcluster/>

# AWS ParallelCluster の設定 ネットワーク構成編



# クラスタネットワーク構成

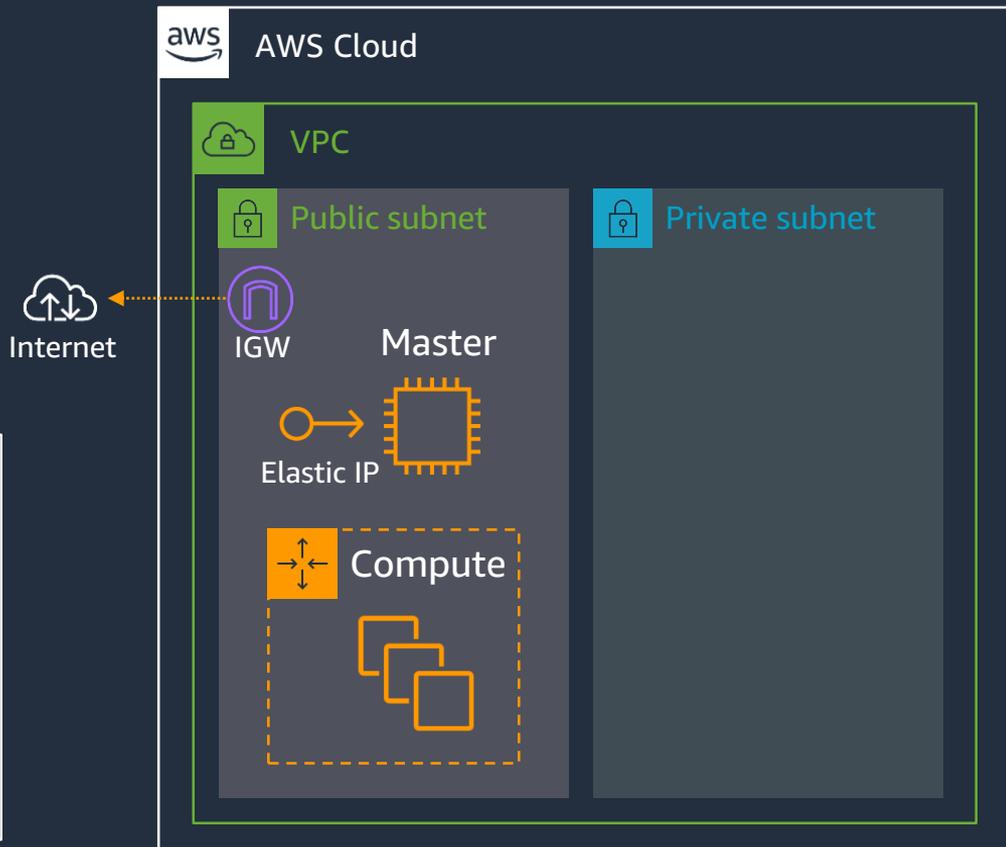
- config ファイルでの設定により、Master/Compute 各ノードを起動する VPC/Subnetを指定可能
- ただし、Master/Compute いずれのノードもインターネットへの Outbound アクセス許可が必要
- 大量のインスタンスを起動する可能性がある場合は、HPC環境専用の VPC/Subnetを作成することを推奨
  - Subnet の CIDR 設定によっては、Private IPアドレスが足りなくなることもあるため注意

# Single Public Subnet 構成

- Master/Compute ともに Public Subnet 上で起動
- `use_public_ips = true` (デフォルト true) では、Master に Elastic IP が割り振られる

```
[cluster default]
vpc_settings = public

[vpc public]
vpc_id = vpc-xxxxxx
master_subnet_id = subnet-<public>
use_public_ips = true
```



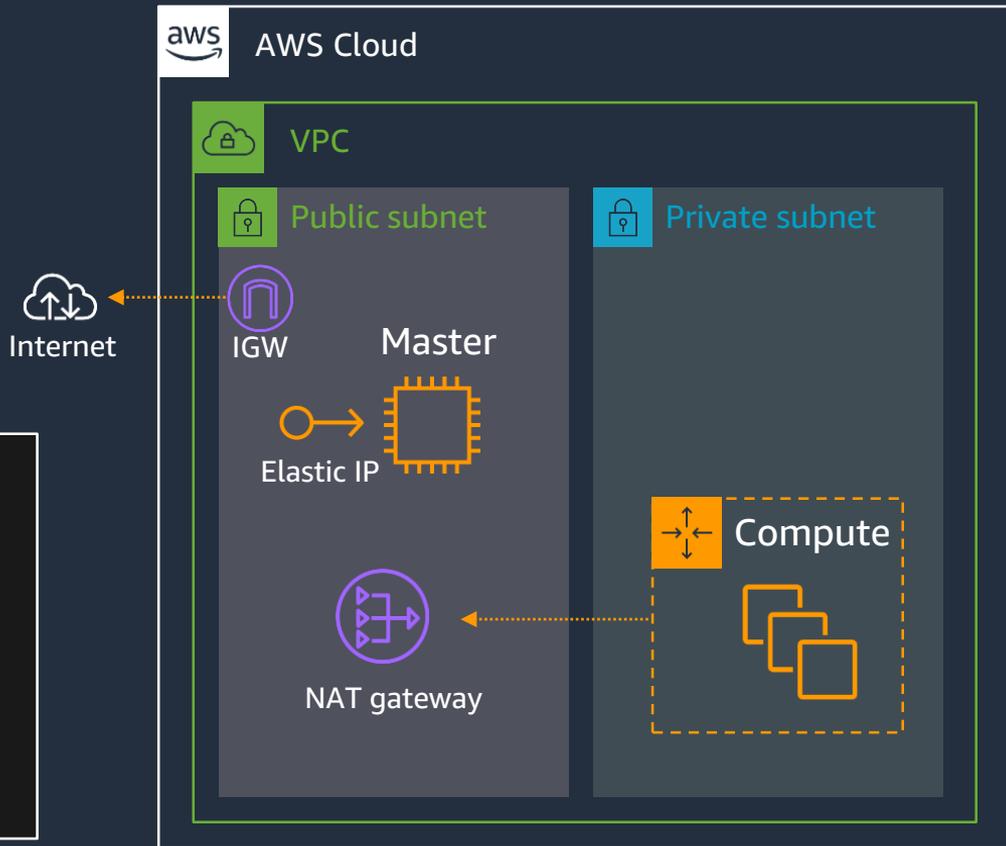
<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/networking.html>

# Public Subnet + Private Subnet 構成

- Master はPublic Subnet、 Compute はPrivate Subnet 上で起動
- Compute のインターネットアクセス用にNAT Gateway が必要
- インターネットへの公開部分が限られており、**推奨構成**

```
[cluster default]
vpc_settings = public

[vpc public]
vpc_id = vpc-xxxxxx
master_subnet_id = subnet-<public>
compute_subnet_id = subnet-<private>
```

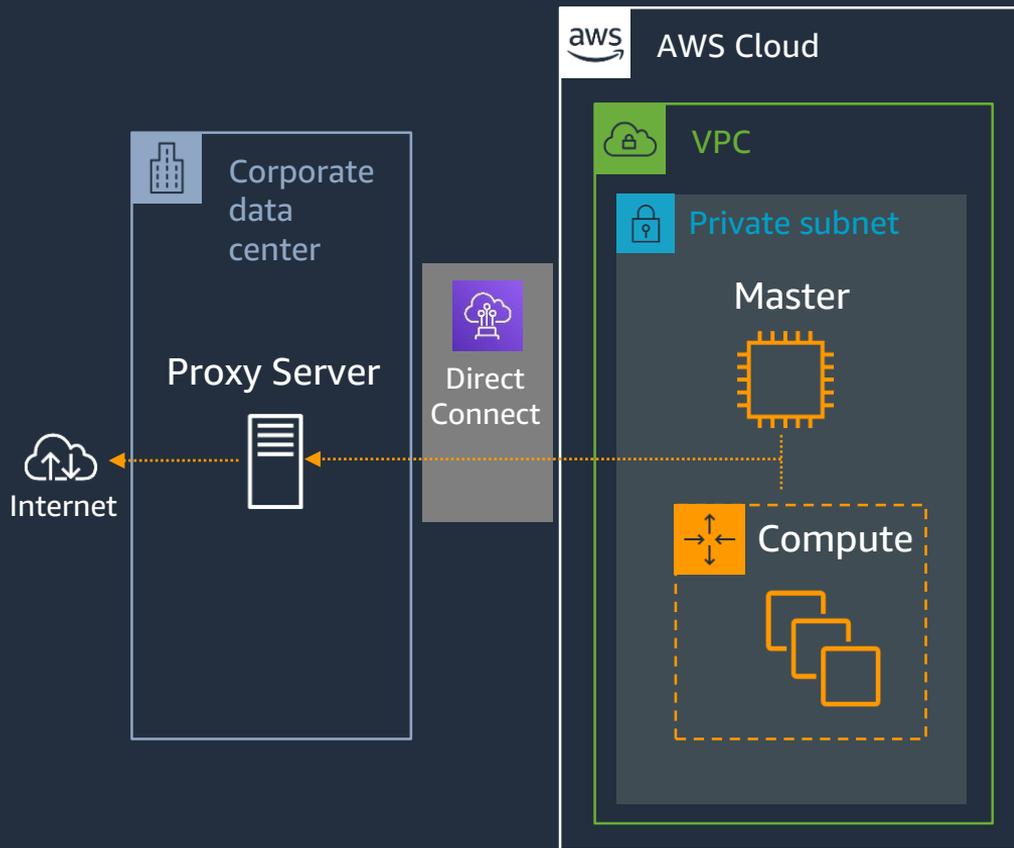


<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/networking.html>

# Private Subnet + AWS Direct Connect

- Master/Compute とともにPrivate Subnet 上で起動
- Internet アクセス用に、オンプレミス環境のProxy Server を経由する
- 認証付きProxy には対応していない
- 監査要件などのある場合に選択

```
[cluster default]
vpc_settings = public
proxy_server = http://proxy.corp.net:8080
[vpc public]
vpc_id = vpc-xxxxxx
master_subnet_id = subnet-<public>
use_public_ips = false
```



<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/networking.html>

# AWS ParallelCluster の設定 オペレーション編

# NICE-DCV との統合によるリモート可視化

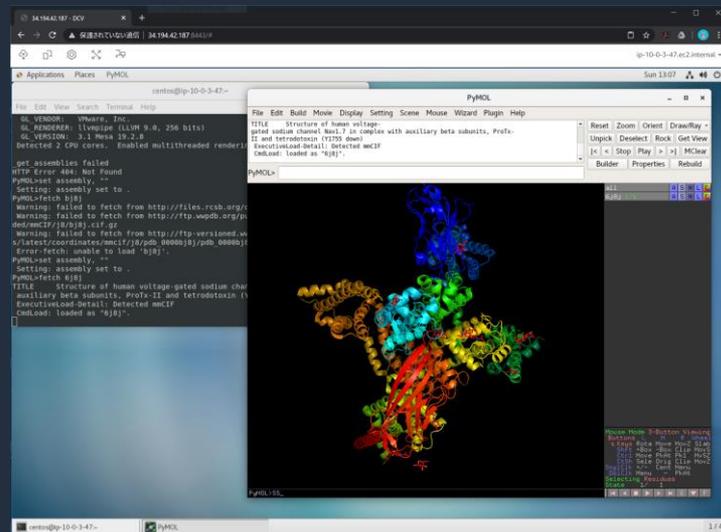
ブラウザからも利用可能なリモートデスクトップアプリケーションである NICE-DCV との統合により、可視化などの処理が容易に

- ParallelCluster 2.5.0 以降、Amazon Linux 2, CentOS7, Ubuntu 18.04 のみ対応
- クラスタ起動後、`dcv` サブコマンドによりアクセス用URLを生成

```
$ pcluster dcv connect <CLUSTER_NAME>
```

```
[cluster default]  
dcv_settings = dcv1
```

```
[dcv dcv1]  
enable = master
```



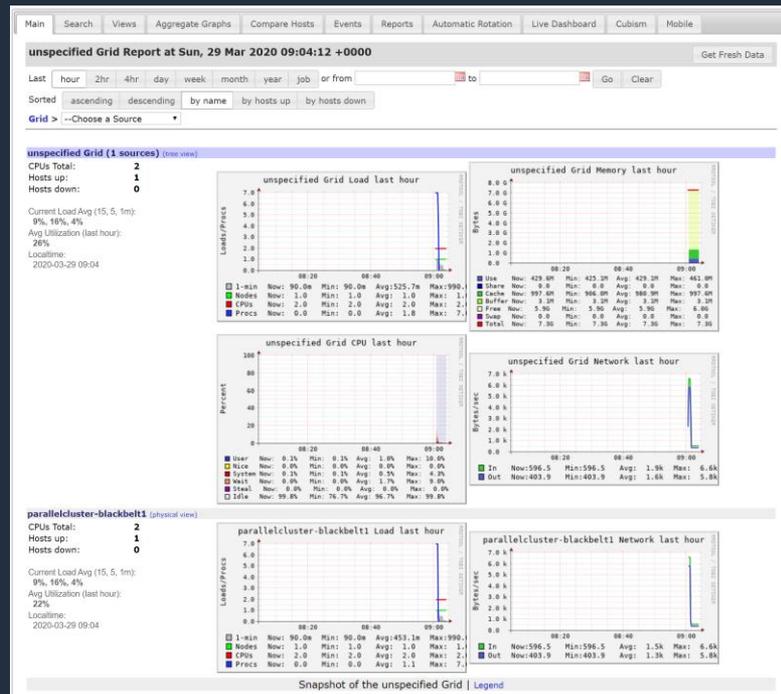
<https://aws.amazon.com/jp/hpc/dcv/>

<https://aws.amazon.com/jp/blogs/opensource/deploy-hpc-cluster-remote-visualization-single-step-parallelcluster/>

# Ganglia によるモニタリングの有効化

モニタリングソフトである Ganglia を利用可能

- Ganglia は、cfnccluster ではデフォルト有効だったが、ParallelCluster ではオプションの設定が必須となった
- クラスタ作成後、Master ノードの Security Group 設定で、inbound 80/TCP を許可する必要がある
- <http://<IP address>/ganglia/> にアクセス



```
[cluster default]
```

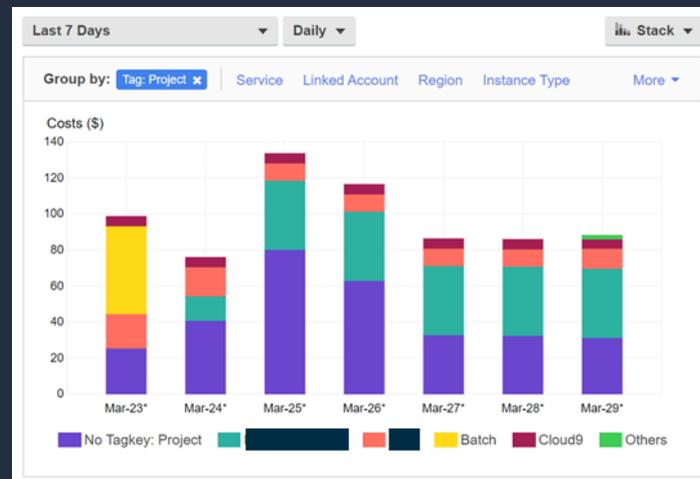
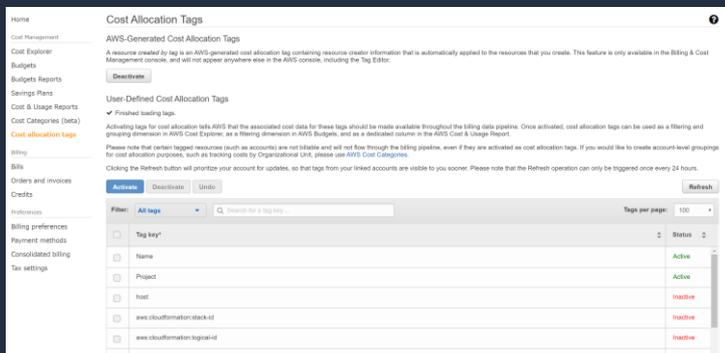
```
extra_json = { "cluster" : { "ganglia_enabled" : "yes" } }
```

<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/moving-from-cfncluster-to-aws-parallelcluster.html>

# リソースへのタグ付けによるコスト管理

- Config ファイルで tags を指定する事により、ParallelCluster が生成する各種リソースにタグが付与される
- Cost Allocation Tags の設定を有効化することで、Cost Explorerなどで、利用金額をタグにより分類することが可能

```
[cluster default]
tags = {"Project": "pcluster-benchmark"}
```



Cost Explorer

[https://docs.aws.amazon.com/ja\\_jp/awssaccountbilling/latest/aboutv2/cost-alloc-tags.html](https://docs.aws.amazon.com/ja_jp/awssaccountbilling/latest/aboutv2/cost-alloc-tags.html)

# カスタムブートストラップ・カスタム AMI 作成

初期設定や、ソフトウェアの各ノードへのインストール等を行うために、起動スクリプト設定や、カスタムAMIからのクラスタ起動の機能を使用することが可能

- 起動スクリプト (推奨)
  - 各ノードの起動時に実行したいスクリプト (Bash or Python) を S3 にアップロードした上で、config ファイルで指定する
- カスタムAMI
  - 事前にAMIを作成し、それを元に、各ノードを起動する方法
  - 起動スクリプトよりも起動時間を短縮する事が可能
  - ベースとなるAMIがアップデートされた際に追従が困難となるため、原則非推奨

[https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/pre\\_post\\_install.html](https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/pre_post_install.html)

[https://docs.aws.amazon.com/ja\\_jp/parallelcluster/latest/ug/tutorials\\_02\\_ami\\_customization.html](https://docs.aws.amazon.com/ja_jp/parallelcluster/latest/ug/tutorials_02_ami_customization.html)

# ジョブスケジューラログ等の CloudWatch Logs への配信

各インスタンス内のシステムログや、SGE/Torque/Slurm のログを CloudWatch Logs に配信する機能

- ParallelCluster 2.6.0 以降で利用可能、デフォルト有効
- config ファイルで、保持期間を設定可能
- pcluster delete 実行時にログを残すオプションを指定可能
- 配信されるログの例：
  - /var/log/cfn-init.log (System)
  - /var/log/messages (System)
  - /var/log/slurmctld.log (Slurm)
  - /var/log/jobwatcher (ParallelCluster)
  - /opt/sge/default/default/spool/qmaster/messages (SGE)

<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/cloudwatch-logs.html>

<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/cw-log-section.html>

# AWS ParallelCluster と IAM

ParallelCluster はデフォルトでは、クラスタ作成時に各インスタンス用 IAM role を生成するため、IAM を操作可能な権限が必要となる

事前にインスタンス用 IAM role を作成しておき、割り当てることも可能

- 事前に作成する IAM role
  - ParallelClusterInstancePolicy
  - <https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/iam.html#parallelclusterinstancepolicy>
- クラスタを作成するユーザーに必要な IAM 権限
  - ParallelClusterUserPolicy
  - <https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/iam.html#parallelclusteruserpolicy>

<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/iam.html>

# 参考 : AWS ParallelCluster で使用されるサービス

- AWS Auto Scaling
- Amazon EC2
- Amazon EBS
- AWS CloudFormation
- Amazon DynamoDB
- AWS IAM
- Amazon SNS
- Amazon SQS
- Amazon S3
- Amazon CloudWatch

<https://docs.aws.amazon.com/parallelcluster/latest/ug/aws-services.html>

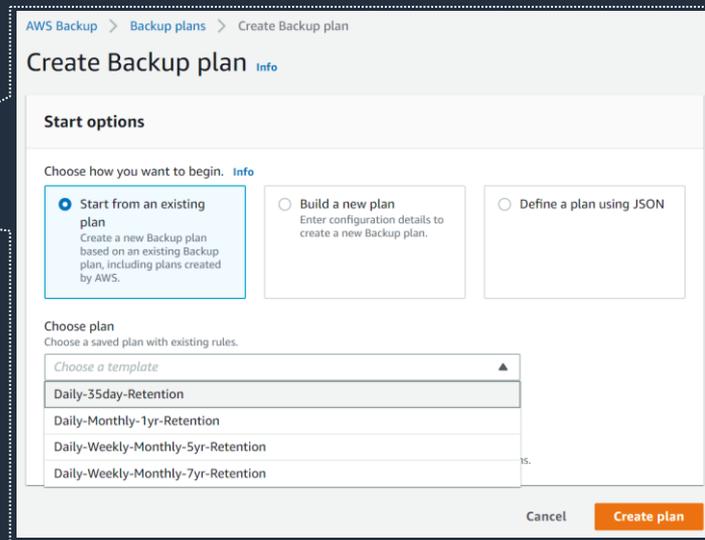
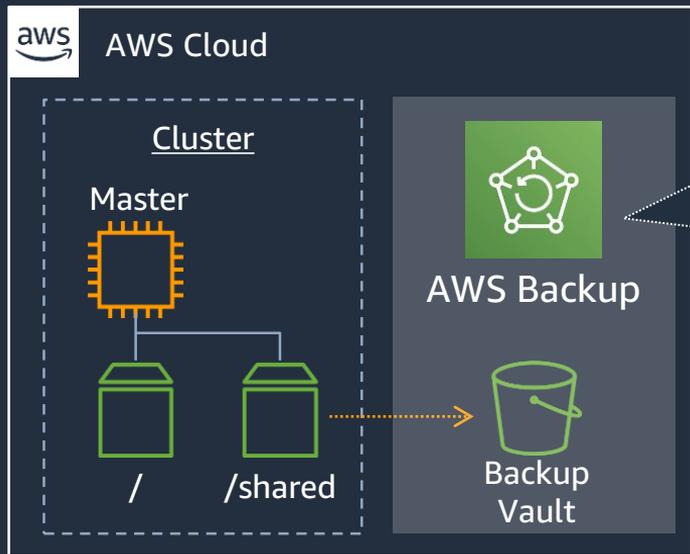
# AWS ParallelCluster と他のサービスの連携



# AWS Backup によるバックアップ設定

実サービスでは、障害や誤操作などによるデータ消失のリスクを防ぐために、EBS や EFSの定期的なバックアップを行うことを推奨

- AWS Backup を利用することで、EBS などのリソースにタグを付与するだけで、定期的なバックアップが可能
- バックアップ取得スケジュールや世代数についても自由に設定が可能

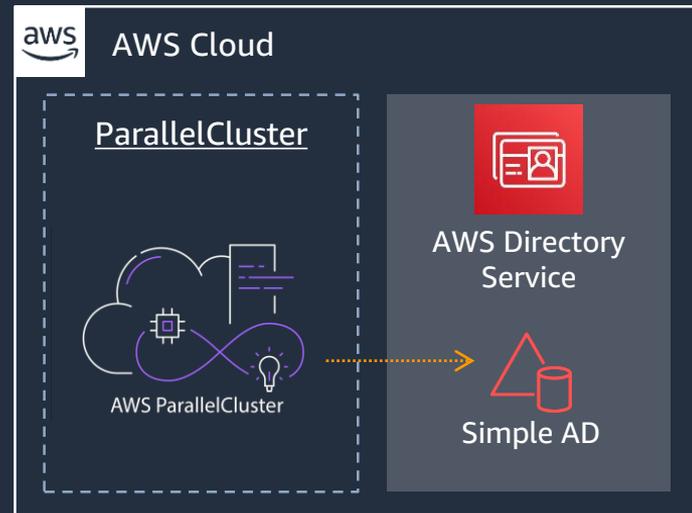


<https://aws.amazon.com/jp/blogs/news/aws-backup-automate-and-centrally-manage-your-backups/>

# AWS Directory Services との連携によるマルチユーザ対応

ParallelCluster は基本的に単一ユーザー向けの構成となっているが、AWS Directory Service と連携し、マルチユーザ対応を行うサンプルも公開済み

- マネージドディレクトリサービスである、AWS Directory Service の Simple AD を使用
- ディレクトリサービスが必要ない場合は、シンプルなスクリプトでマルチユーザー化を行う例もあり
  - <https://github.com/aws/aws-parallelcluster/wiki/MultiUser-Support>

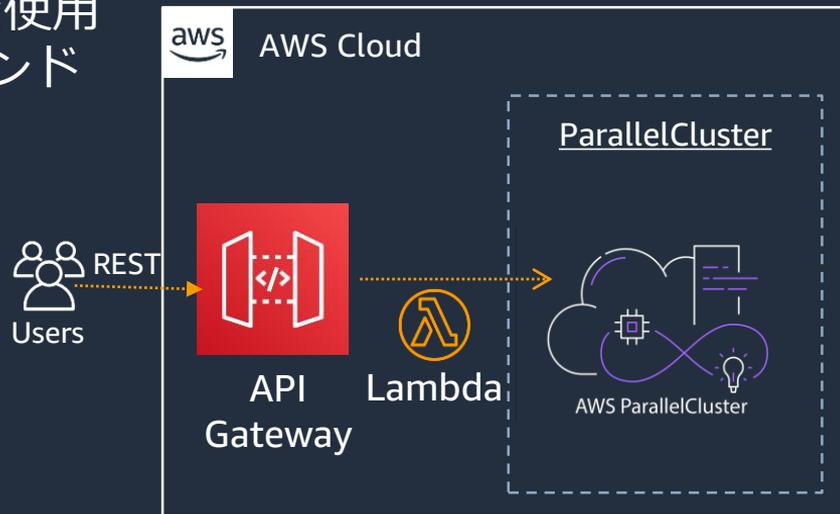


<https://aws.amazon.com/jp/blogs/opensource/aws-parallelcluster-aws-directory-services-authentication/>

# API Gateway との連携による REST API 化

API Gateway + Lambda 用いて REST API 経由でジョブの投入や一覧、詳細情報の取得を行えるようにする実装例

- 各 Lambda は、AWS Systems Manager を使用して Master ノードでスケジューラのコマンドを実行
- Web Frontend を実装したい場合にも有用

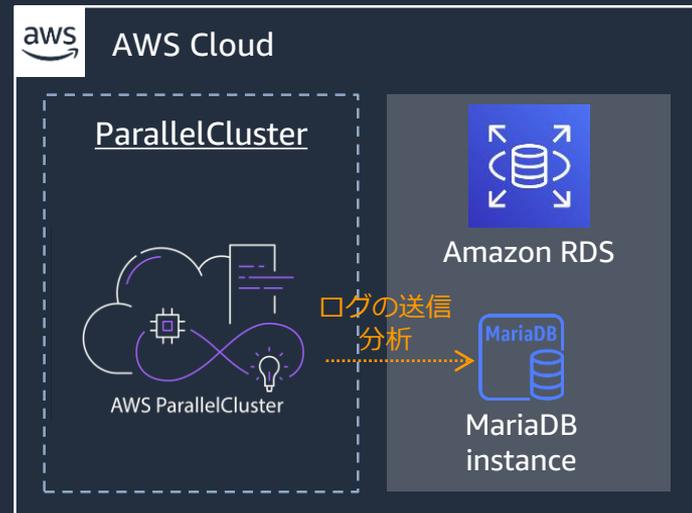


<https://aws.amazon.com/jp/blogs/opensource/aws-api-gateway-hpc-job-submission/>

# Slurm ジョブスケジューラの Accounting 機能と RDS の統合

Slurm の Accounting 機能を有効化するため、Amazon RDS を利用してジョブ実行ログの保存・分析用データベースを作成する

- slurmdbd を使用してデータベースに接続
- sacct コマンドによりジョブ投入ユーザ、実行時間、使用CPU core・メモリなどの情報を取得可能
- 複数の ParallelCluster に対して、単一の DB インスタンスでログを集積することも可能



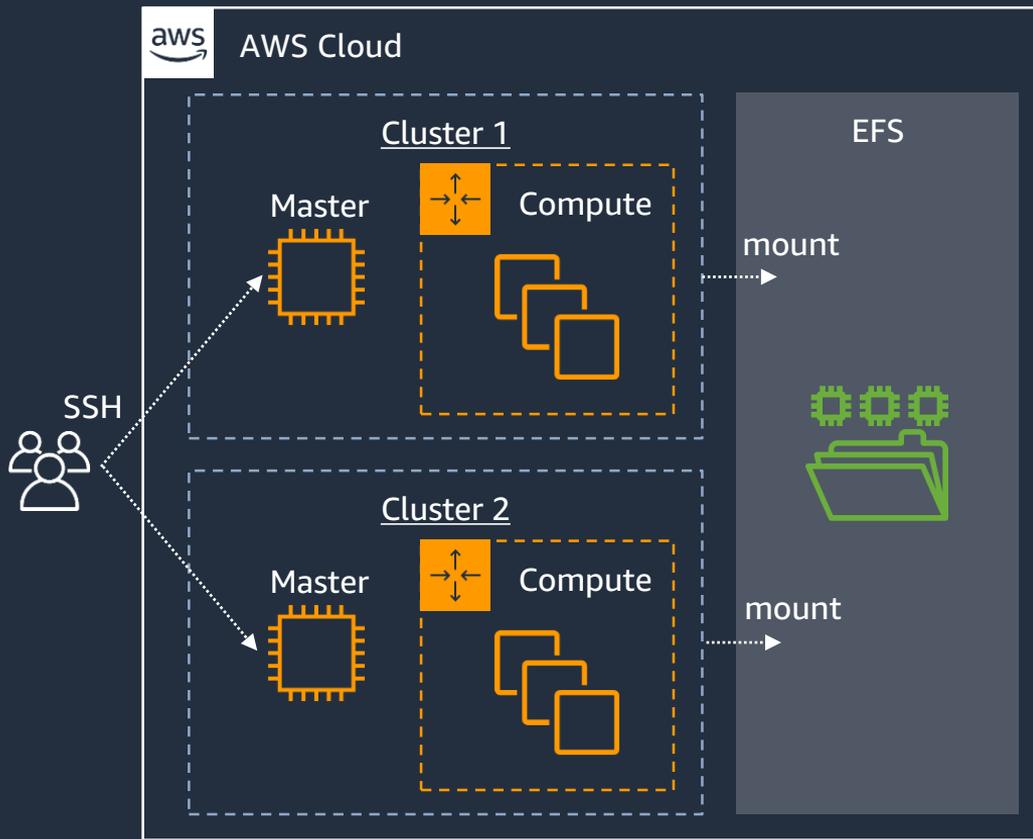
<https://aws.amazon.com/blogs/compute/enabling-job-accounting-for-hpc-with-aws-parallelcluster-and-amazon-rds/>

# AWS ParallelCluster の活用事例

# 複数クラスタの目的別併用

目的の異なる複数のクラスタを使用する際に利用できる構成

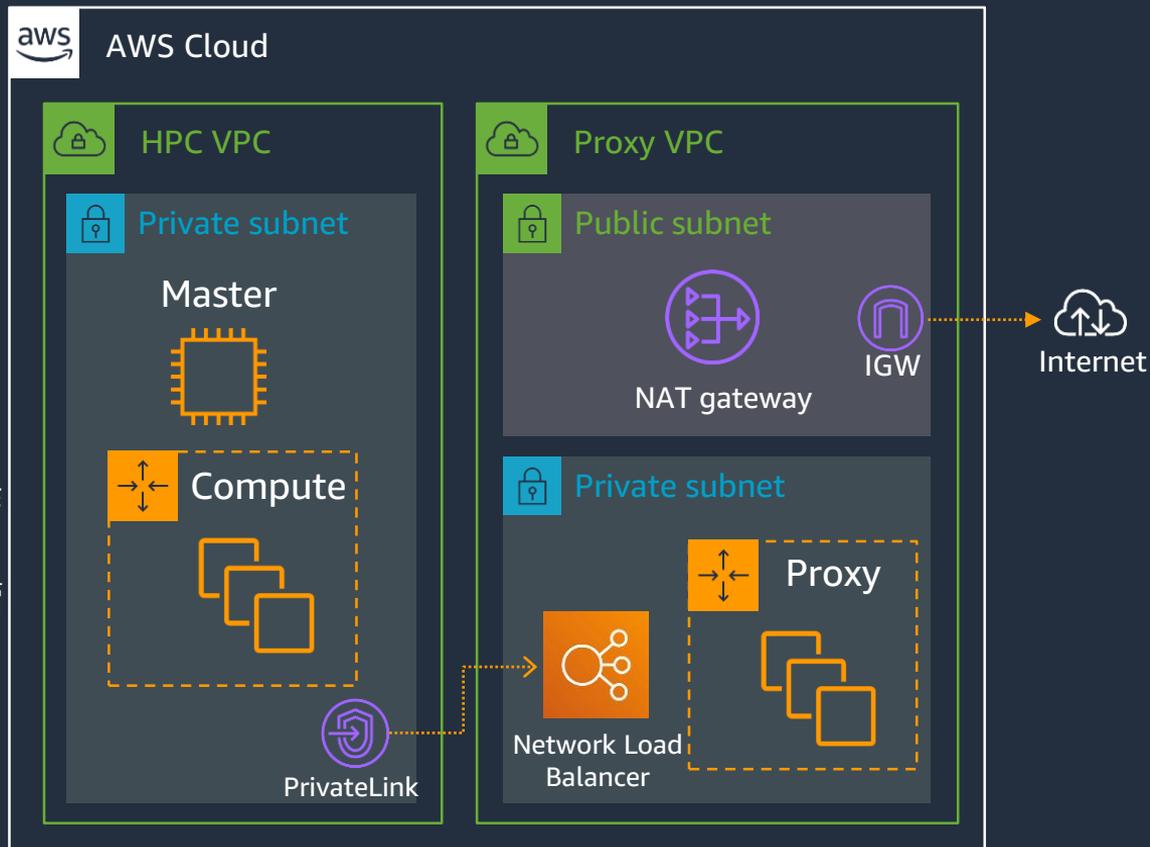
- CPUクラスタとGPUクラスタ、On-demand クラスタと Spot クラスタ等複数のタイプを使用したい場合
- 現状、ParallelCluster は、クラスタ辺り1種類のインスタンスタイプのしか指定できない
- そのため、複数クラスタを作成し、共有領域を mount する



# Proxy VPC の導入によるセキュリティの強化

ParallelCluster の各ノードはインターネットへのアクセス経路が必要だが、Proxy を経由することでアクセス先の制限・監視を行うことが可能

- 右図は、Proxy 専用の VPC を作成し、PrivateLink で接続した例
- 事前にSquidの設定を行ったAMIを作成し、それを元に Auto-Scaling Group を作成する
- Proxy VPC を複数のVPCで共有、一括管理を行うことも可能



# クラスタ環境のバージョン管理

## Western Digital 様での利用例

- クラスタ環境の再現を容易にするため、コードとして管理
- ParallelCluster の設定ファイル (config, pre/post script) を Git で管理し Jenkins による自動デプロイを行う

### Pipeline

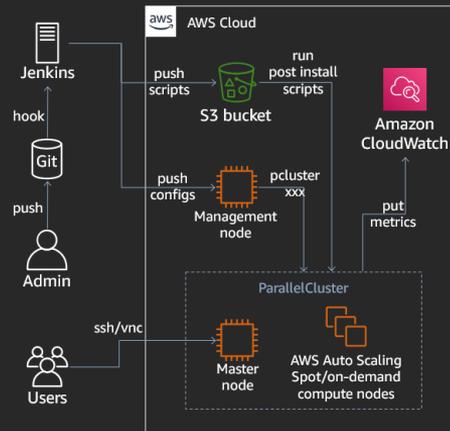
A pipeline for quick cluster optimization and its records

#### Git base operation

- All changes are recorded in Git
- Cluster config files → management node
- Custom bootstrap scripts → Amazon S3

#### Python virtual environments

- AWS ParallelCluster development is very active
- Mixed version of clusters



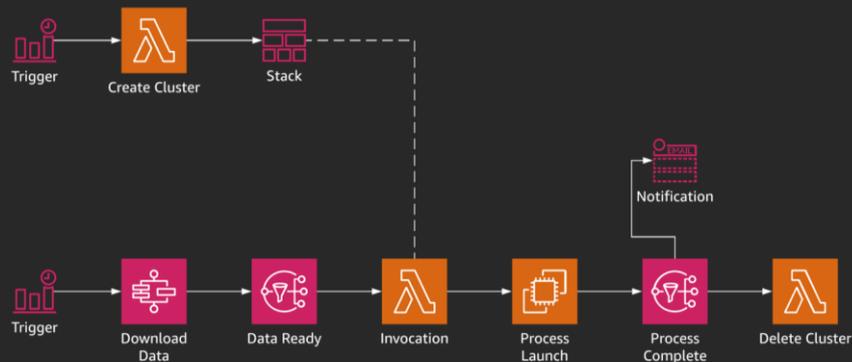
[https://d1.awsstatic.com/events/reinvent/2019/REPEAT\\_1\\_Setting\\_up\\_and\\_optimizing\\_your\\_HPC\\_cluster\\_on\\_AWS\\_CMP402-R1.pdf](https://d1.awsstatic.com/events/reinvent/2019/REPEAT_1_Setting_up_and_optimizing_your_HPC_cluster_on_AWS_CMP402-R1.pdf)

# イベントドリブンなクラスタライフサイクルとジョブ実行

## Maxar 様での利用例

- 処理を行うデータが生成された際に自動でクラスタを作成し処理を行う、その後クラスタは削除することでコスト削減
- クラスタの作成・削除には Lambda、StepFunctions を活用
- リソース不足などでクラスタの作成に失敗した場合に、他の AZ/Region、他のインスタタイプにフォールバックすることも可能

### Automated FV3GFS workflow within AWS



[https://d1.awsstatic.com/events/reinvent/2019/Powering\\_global-scale\\_predictive\\_intelligence\\_using\\_HPC\\_on\\_AWS\\_AIM227-S.pdf](https://d1.awsstatic.com/events/reinvent/2019/Powering_global-scale_predictive_intelligence_using_HPC_on_AWS_AIM227-S.pdf)

# 全体のまとめ

- HPC on AWS では、スケーラビリティなどクラウドの利便性を活かしながら大規模並列処理を行うことができ、既に様々なお客様にご利用頂いている
  - 必要な時に必要な量の必要なタイプのHPCクラスタを作成可能！
- AWS ParallelCluster を用いることで、SGE/Torque/Slurm など、既存のジョブスケジューラを使用しながらクラウド HPC を初めることが可能
- AWS ParallelCluster は config ファイルにより様々な構成の HPC クラスタを作成することができる
- 他の AWS サービスと組み合わせることで、オンプレミスでは実現が難しかった、イベントドリブン・自動化などの構成も可能に

**AWS ParallelCluster でクラウド HPC の第一歩を!**

# HPC on AWS 関連資料

- HPC on AWS  
<https://aws.amazon.com/jp/hpc/>
- HPC on AWS ハンズオン  
<http://bit.ly/aws-hpc>
- HPC on AWS @ 2019 30分でわかるクラウドHPCの現在  
<https://www.slideshare.net/DaisukeMiyamoto6/hpc-on-aws-2019>
- クラウド規模での Western Digital HDD シミュレーション – HPC タスク 250 万件、EC2 スポットインスタンス 4 万個  
<https://aws.amazon.com/jp/blogs/news/western-digital-hdd-simulation-at-cloud-scale-2-5-million-hpc-tasks-40k-ec2-spot-instances/>
- Saving Koalas Using Genomics Research and Cloud Computing  
<https://aws.amazon.com/jp/blogs/aws/saving-koalas-using-genomics-research-and-cloud-computing/>

# AWS ParallelCluster 関連 Blog: Architecture

- Deploying an HPC cluster and remote visualization in a single step using AWS ParallelCluster <https://aws.amazon.com/blogs/opensource/deploy-hpc-cluster-remote-visualization-single-step-parallelcluster/>
- AWS API Gateway for HPC job submission <https://aws.amazon.com/blogs/opensource/aws-api-gateway-hpc-job-submission/>
- AWS ParallelCluster with AWS Directory Services Authentication <https://aws.amazon.com/blogs/opensource/aws-parallelcluster-aws-directory-services-authentication/>
- Enabling job accounting for HPC with AWS ParallelCluster and Amazon RDS <https://aws.amazon.com/blogs/compute/enabling-job-accounting-for-hpc-with-aws-parallelcluster-and-amazon-rds/>
- Building an HPC cluster with AWS ParallelCluster and Amazon FSx for Lustre <https://aws.amazon.com/blogs/storage/building-an-hpc-cluster-with-aws-parallelcluster-and-amazon-fsx-for-lustre/>

# AWS ParallelCluster 関連 Blog: Software

- Best Practices for Running Ansys Fluent Using AWS ParallelCluster  
<https://aws.amazon.com/jp/blogs/opensource/best-practices-running-ansys-fluent-aws-parallelcluster/>
- Running Simcenter STAR-CCM+ on AWS with AWS ParallelCluster, Elastic Fabric Adapter and Amazon FSx for Lustre  
<https://aws.amazon.com/blogs/compute/running-simcenter-star-ccm-on-aws/>
- Scale HPC Workloads with Elastic Fabric Adapter and AWS ParallelCluster  
<https://aws.amazon.com/blogs/opensource/scale-hpc-workloads-elastic-fabric-adapter-and-aws-parallelcluster/>
- Building an interactive and scalable ML research environment using AWS ParallelCluster  
<https://aws.amazon.com/blogs/machine-learning/building-an-interactive-and-scalable-ml-research-environment-using-aws-parallelcluster/>

# AWS ParallelCluster 関連 re:Invent 2019 セッション

- Setting up and optimizing your HPC cluster on AWS  
[https://d1.awsstatic.com/events/reinvent/2019/REPEAT\\_1\\_Setting\\_up\\_and\\_optimizing\\_your\\_HPC\\_cluster\\_on\\_AWS\\_CMP402-R1.pdf](https://d1.awsstatic.com/events/reinvent/2019/REPEAT_1_Setting_up_and_optimizing_your_HPC_cluster_on_AWS_CMP402-R1.pdf)
- Using AWS ParallelCluster to simplify HPC cluster management  
[https://d1.awsstatic.com/events/reinvent/2019/Using\\_AWS\\_ParallelCluster\\_to\\_simplify\\_HPC\\_cluster\\_management\\_CMP372-P.pdf](https://d1.awsstatic.com/events/reinvent/2019/Using_AWS_ParallelCluster_to_simplify_HPC_cluster_management_CMP372-P.pdf)

# HPC 関連 Black Belt Online Seminar

- Amazon Elastic Compute Cloud (EC2)  
<https://www.slideshare.net/AmazonWebServicesJapan/20190305-aws-black-belt-online-seminar-amazon-ec2>
- Amazon Elastic Block Store (EBS)  
<https://www.slideshare.net/AmazonWebServicesJapan/20190320-aws-black-belt-online-seminar-amazon-ebs>
- AWS Batch  
<https://www.slideshare.net/AmazonWebServicesJapan/20190911-aws-black-belt-online-seminar-aws-batch>
- Amazon FSx for Lustre  
<https://www.slideshare.net/AmazonWebServicesJapan/20190319-aws-black-belt-online-seminar-amazon-fsx-for-lustre>
- Amazon EC2 スポットインスタンス  
<https://www.slideshare.net/AmazonWebServicesJapan/20190306-aws-black-belt-online-seminar-amazon-ec2>

# Q&A

お答えできなかったご質問については

AWS Japan Blog 「<https://aws.amazon.com/jp/blogs/news/>」にて

後日掲載します。

# AWS の日本語資料の場所「AWS 資料」で検索



日本担当チームへお問い合わせ サポート 日本語 ▼ アカウント ▼

コンソールにサインイン

製品 ソリューション 料金 ドキュメント 学習 パートナー AWS Marketplace その他 🔍

## AWS クラウドサービス活用資料集トップ

アマゾン ウェブ サービス (AWS) は安全なクラウドサービスプラットフォームで、ビジネスのスケールと成長をサポートする処理能力、データベースストレージ、およびその他多種多様な機能を提供します。お客様は必要なサービスを選択し、必要な分だけご利用いただけます。それらを活用するために役立つ日本語資料、動画コンテンツを多数ご提供しております。(本サイトは主に、AWS Webinar で使用した資料およびオンデマンドセミナー情報を掲載しています。)

[AWS Webinar お申込 »](#)

[AWS 初心者向け »](#)

[業種・ソリューション別資料 »](#)

[サービス別資料 »](#)

<https://amzn.to/JPArchive>



# 日々のアップデートチェックは週刊AWSで

The screenshot shows the AWS Japan blog interface. At the top, there's the AWS logo and navigation links like '製品', 'ソリューション', '料金', 'ドキュメント', '学習', 'パートナー', 'AWS Marketplace', 'カスタマー支援', and 'さらに詳しく見る'. A search bar is on the right. Below the navigation, the page title is 'Amazon Web Services ブログ' and the tag is 'Tag: 週刊AWS'. Three blog posts are listed, each with a thumbnail image of people at a conference, the title '週刊AWS', and a 'Read More' button.

**週刊AWS - 2019/11/25週**  
by AWS Japan Staff | on 02 DEC 2019 | in General | Permalink | Share

みなさん、こんにちは。ソリューションアーキテクトの下佐粉です。今週も週刊AWSをお送りします。最近めっきり冷え込むようになってきましたね。いよいよ冬本番が近づいてきた感じがします。前回は大きな発表多数で「特大号」でしたが、予想通りAWS re:Invent 2019直前という事もあって、今回も多くての発表がありました。AWS IoT dayと称してIoT関連のアップデートが多数発表されたりもしましたね。そのため今回も特大号でお送りします！米国は11月28日（木）がサンクスギビングデーなので、月-水曜までの内容です。

**週刊AWS - 2019/11/18週**  
by AWS Japan Staff | on 25 NOV 2019 | in General | Permalink | Share

みなさん、こんにちは。ソリューションアーキテクトの下佐粉です。この週刊AWSは、一週間のAWSでの新発表や新サービスについて厳選してコンパクトにまとめる…というのがコンセプトなのですが、先週は厳選してもコンパクトにならない量の発表がありました。AWS Storage Dayと銘打ってストレージサービス周りの発表が一度に行われたりもしましたね。そういうわけで、今回は「特大号」でお届けします。早速先週の主なアップデートについて振り返っていきましょう。

**週刊AWS - 2019/11/11週**  
by AWS Japan Staff | on 18 NOV 2019 | in General | Permalink | Share

こんにちは、AWSソリューションアーキテクトの小林です。再来週はAWS re:Invent 2019が開催されます。毎日様々なアップデートが発表されますので、クイズに振り返っていただくためのウェブセミナーを開催いたします。こちらのリンクからお申し込みいただけますので、ぜひご参加ください。例年同様、会期中に発表されたものを（可能な限り）すべてピックアップします。さらに直前に発表されたものの中で重要なトピックもご紹介していきますので、お楽しみに。

週刊AWS



# AWS Well-Architected 個別技術相談会

毎週“W-A個別技術相談会”を実施中

- AWSのソリューションアーキテクト(SA)に  
対策などを相談することも可能

- 申込みはイベント告知サイトから

(<https://aws.amazon.com/jp/about-aws/events/>)

AWS イベント

で[検索]



# ご視聴ありがとうございました

AWS 公式 Webinar

<https://amzn.to/JPWebinar>



過去資料

<https://amzn.to/JPArchive>

