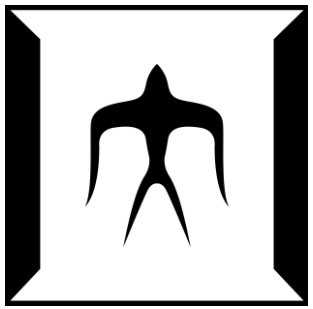
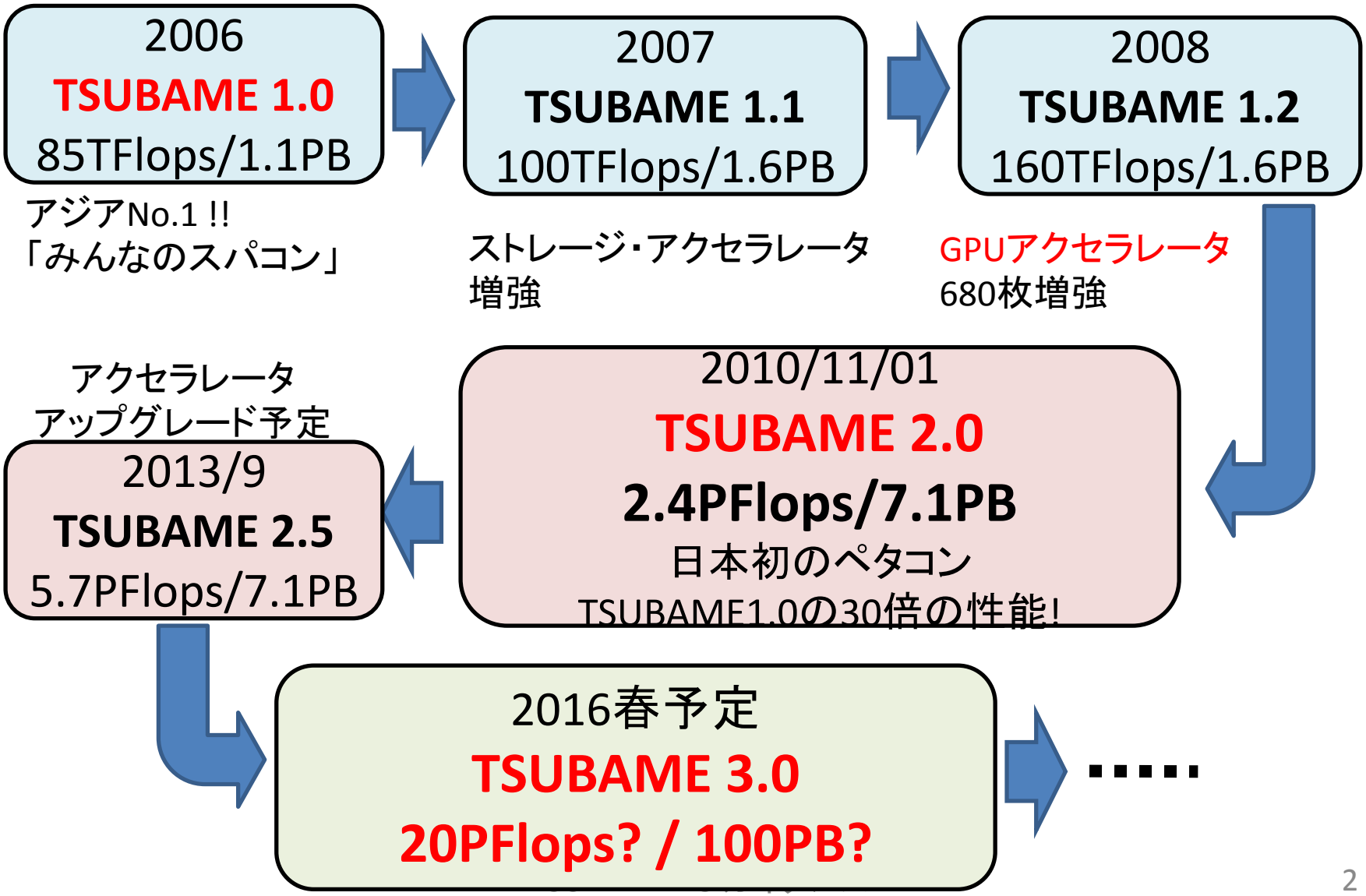
スーパーコンピュータ TSUBAME 2.5利用ガイダンス

GSICのガイダンス資料を抜粋・改変



TSUBAMEの歴史と今後



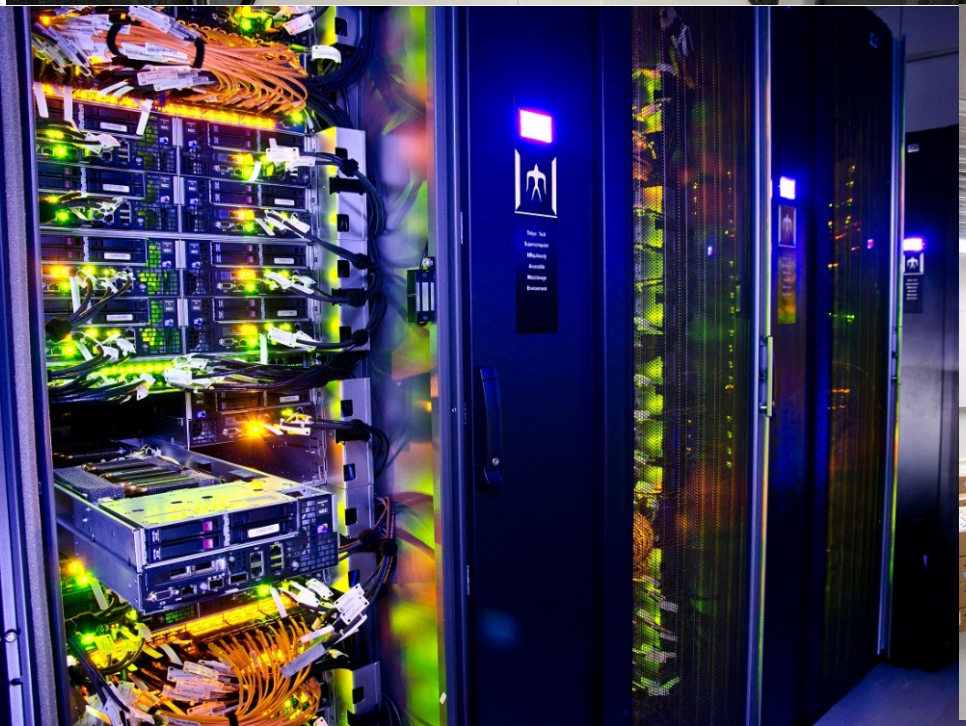
TSUBAME2.5の特徴(1)

- 理論値5.7PFlopsのばく大な演算性能
  - CPU合計性能: 0.2PFlops
  - GPU合計性能: 5.5PFlops
- 合計容量7.1PByteの巨大ストレージ
- バイセクションバンド幅200Tb/sの高速光ネットワーク

TSUBAME2.5の特徴(2)

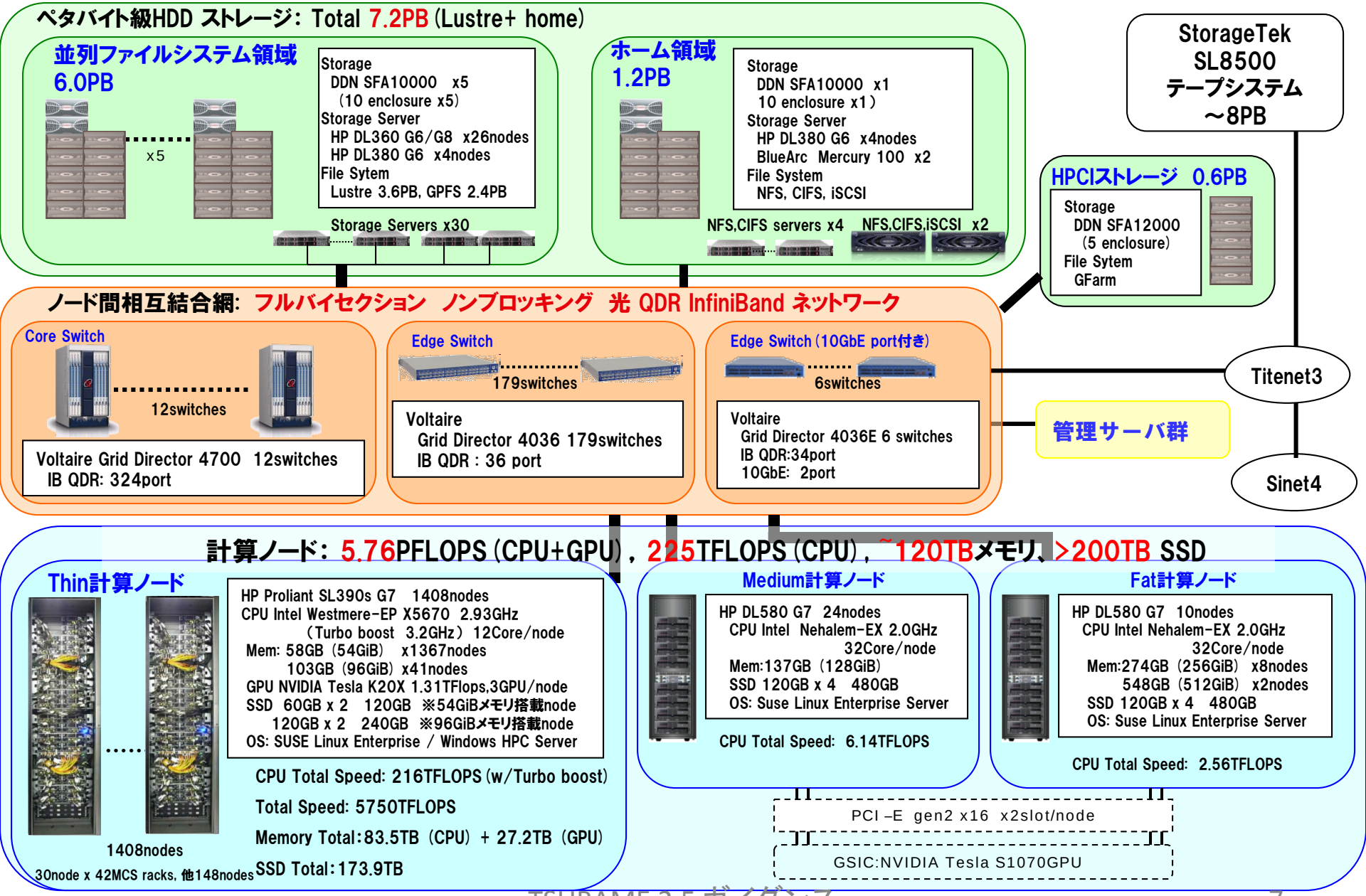
- ソフトウェア資産の継続性と新規運用
  - 既存のMPI, OpenMP, CUDAなどで記述されたプログラムの利用
    - GPU向けにOpenACCも利用可能
  - 既存ISVアプリの大部分の利用
  - SUSE Linux Enterprise 11
  - 新たにWindows HPC Serverの運用 (今回は説明対象外)
- GPU対応アプリも採用、ぜひ使ってください
  - CPUよりも計算が短時間で済む⇒課金も少なくてすむ






ハードウェア構成

スーパーコンピュータTSUBAME2.5 システム構成



計算ノード (1)

- Thinノード, Mediumノード, Fatノードの三種類
- Thinノード: 1408台 [一番良く使われる計算ノード]
  - HP Proliant SL390s G7
  - CPU: Intel Xeon 2.93GHz 6コア × 2=12コア
    - Hyperthreadingのために24コアに見える
  - GPU: NVIDIA Tesla K20X 3GPU
  - Memory: 54GB (一部は96GB)
  - SSD: 120GB (一部は240GB)
  - ネットワーク: QDR InfiniBand x 2 = 80Gbps

計算ノード(2)

- Medium/Fatノード:M24台 + F10台

  [大容量メモリが必要なジョブ向け]

  – HP Proliant DL580 G7

  – CPU: Intel Xeon 2.0GHz 8コア × 4 = 32コア

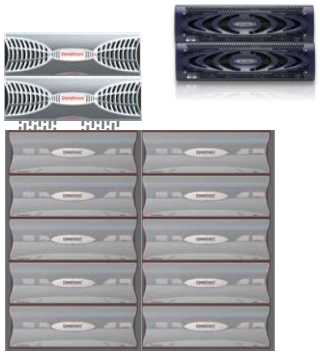
    • Hyperthreadingのために64コアに見える

  – Memory: 128GB (Medium), 256/512GB(Fat)

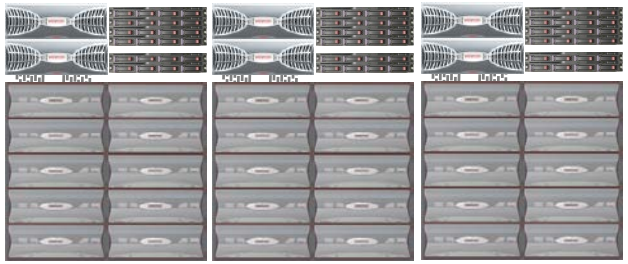
  – SSD: 480GB

  – ネットワーク: QDR InfiniBand x 1 = 40Gbps

TSUBAME2のストレージ



- ホームディレクトリ用 (/home)
  全ユーザが最初から利用可能
  - NFS, CIFS, iSCSI
    - BlueArc Mercury 100 (一部GridScaler)
    - DDN SFA 10K × 1, SATA × 600 disks



- 並列ファイルシステム
  グループ購入必要
  - Lustre (/work0, /work1)
    - MDS : HP DL360 G6 × 6
    - OSS : HP DL360 G6 × 20
    - DDN SFA 10K × 3, 2TB SATA × 3550 disks, 600GB SAS × 50 disks
  - 他. アーカイブ向きの/data0

実際の利用について

- 利用開始までの流れ
- 課金とTSUBAMEグループについて

TSUBAME2の利用開始

- 利用申請(必須)
  - 東工大ポータルにログインして、メニューからTSUBAME利用ポータルにシングルサインオン(SSO)で申請

    東工大ポータル : http://portal.titech.ac.jp
  - メールで仮パスワード発行、TSUBAME利用ポータルで本パスワードを設定して利用開始
  - ペーパーレスで即日利用が可能
- TSUBAME2へのログイン
  - SSHによるログイン
  - 学外からは鍵認証〇、パスワード×
  - 学内からは鍵認証〇、パスワード〇 (場所による)

TSUBAME利用ポータル

- 以下のサービスが利用可能なwebページ
  - アカウント新規利用申請、利用者情報の変更、利用停止(利用者自身)
  - TSUBAMEグループの作成、管理
  - 予算の追加、登録(予算管理者のみ)
  - Hキューの予約(グループ参加者)
  - 有償サービス利用履歴閲覧(利用者ごと、管理者)
  - 課金請求データの閲覧(予算管理者のみ)
- 入り方(1): 東工大ポータルから
- 入り方(2): http://tsubame.gsic.titech.ac.jp/ からTSUBAME portalリンク、TSUBAMEアカウントでログイン

TSUBAME2上で利用できるサービス

- 無償サービス
  - インタラクティブ、デバッグ専用ノードの利用
  - 小規模の計算試験(2ノード10分間まで)
  - 個人用ストレージサービス(home領域、
    全学ストレージ、学内ホスティング)
- 有償サービス
  - 研究目的の大規模計算(従量制、定額制)
  - Work領域，Data領域(グループ利用、月額制)
  - 追加ISVアプリケーション利用(予定)

有償サービス

- 研究室、研究プロジェクト単位でグループ作成(TSUBAMEグループ)
- TSUBAMEポイントによるプリペイド従量制
  - 1ポイントで従来の1ノード・時間を利用できるポイント制
  - 1口=6000円/600ポイント
- 定額制の仮想ノード計算サービス
- グループ共有の大規模work領域サービス

ソフトウェア構成と使い方

- システムソフトウェア・ストレージ
- バッチキューの構成と使い方
- アプリケーション

System Software

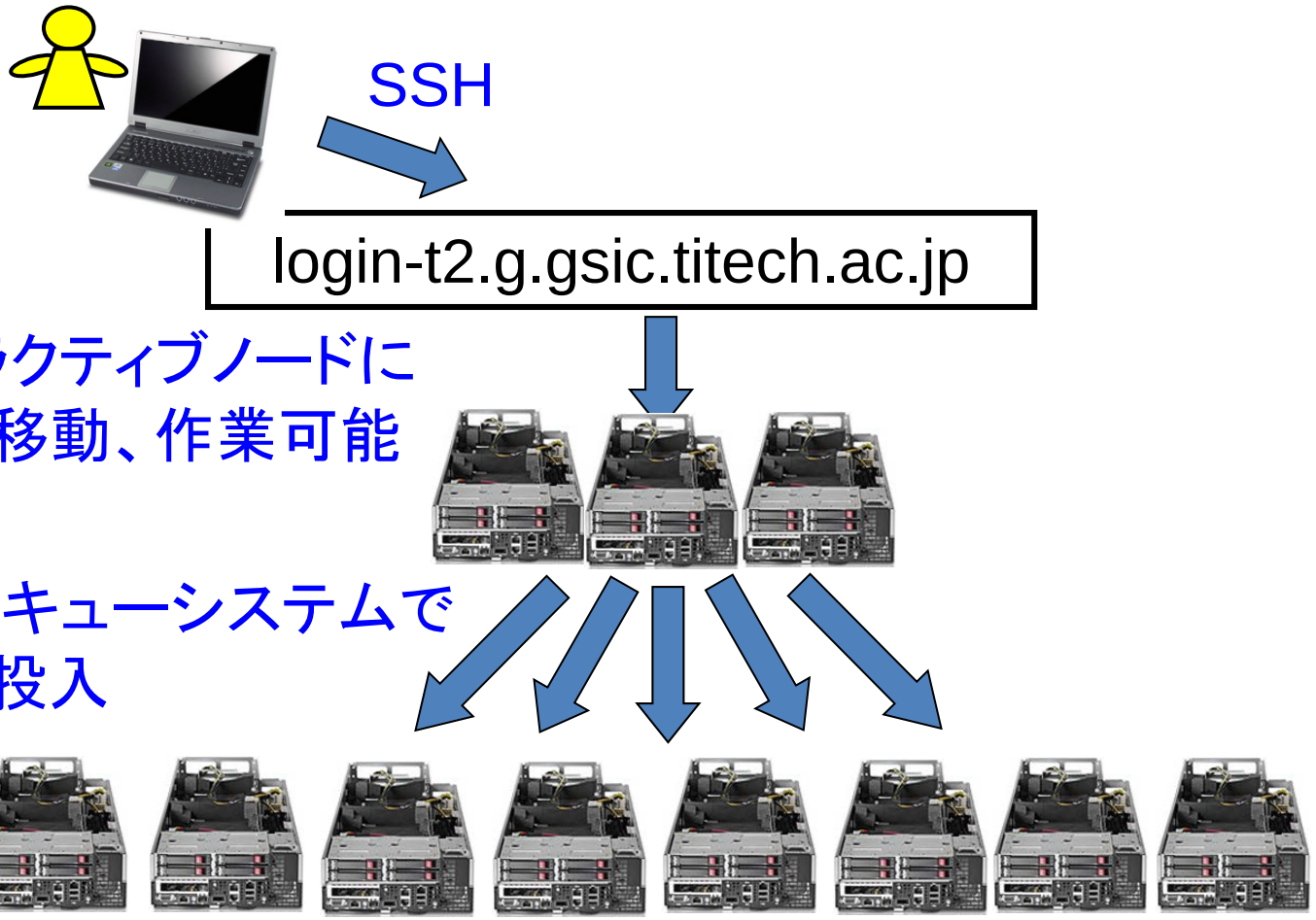
	TSUBAME 2
Linux OS	SUSE Linux Enterprise Server 11 SP1
Windows OS	Windows HPC Server 2008 R2
Job Scheduler for Linux	PBS Professional
Job Scheduler for Windows	Windows HPC Server

Compilers & Libraries

	TSUBAME 2
Compiler	Intel Compiler 2013 PGI CDK 14 gcc 4.3.4
MPI	OpenMPI 1.6.3 MVAPICH2 1.5.1
CUDA	5.5

- コンパイラの切り替えは環境変数の設定で可能
  - 利用の手引をご参照ください
- CUDA C/FortranによるGPUプログラミング可能
  - CUDA+MPIの場合はコンパイラの組み合わせについてご相談を
- バージョンアップの可能性あり

TSUBAME2へのログイン(1)



TSUBAME2へのログイン(2)

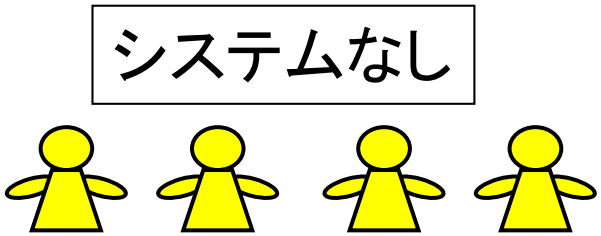
- Linuxなどからの場合
  - ssh [アカウント名]@login-t2.g.gsic.titech.ac.jp
- Windowsの端末ソフトからの場合(putty, ttsshなど)
  - ホスト名 : login-t2.g.gsic.titech.ac.jp
  - プロトコル : SSH
    - ポート: 22
- ユーザ名(アカウント名)・パスワードを正しく入力

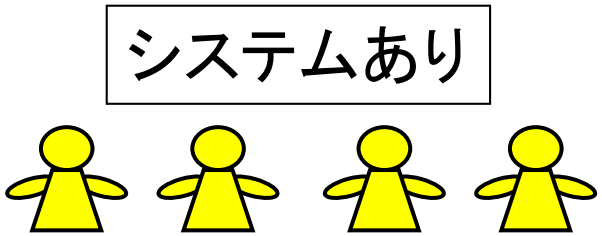
→ 様々なメッセージの後に以下のように表示されればログイン成功

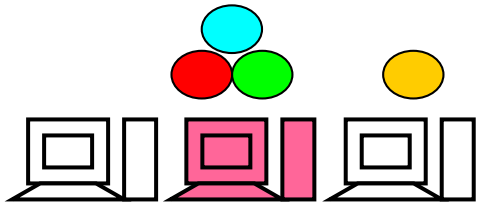
10B12345@t2a006163:>

バッチキューシステムとは

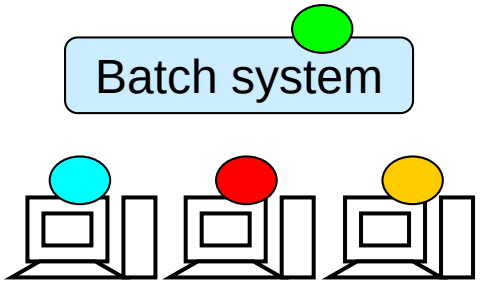
- TSUBAME2ではPBSProというバッチキューシステムでジョブ(プログラム)を投入
- 多数のプログラムの「交通整理」
  - OSはノード内、バッチキューシステムはノード間の管理







ユーザが自分でノード決定
混雑すると実行が遅くなる



システムが自動決定
ジョブ開始が待たされることあり

主要キューー一覧

- インタラクティブノード
- バッチキュー
  - [S] ノード占有系：12CPUコア、3GPUのノード利用
  - [U] 仮想マシン占有系：8CPUコア(16hyperthread) の仮想ノード利用
  - [V] 仮想マシン共有系：8CPUコア(16hyperthread) の仮想ノード利用
  - [G] GPU系：4CPUコア、3GPUのノード利用
  - [H]予約系：Thinノードをノード数、期間を予約して利用
- グランドチャレンジ(超大規模並列)制度
  - 数千～万の超大規模並列計算のための利用(要審査、年に2回+α)

ノード占有系：Sキュー・Lキュー

- Sキュー：12CPUコア, 3GPU, 54GBメモリを持つノードを利用
  - 多数CPUまたはGPUによる並列性や、I/O(ディスク・通信)性能が必要なジョブ向け
  - ノード内のジョブ混在は起こらない
  - 従量制課金
- 大容量メモリが必要なジョブには、S96, L128, L256, L512キュー
  - 数字はメモリ容量(GB)
  - Sに比べ1.5倍、2倍…の課金
  - L系はMeduim/Fatノード。CPUコア数が多く、GPUが古い

仮想マシン系：U・Vキュー

- ノードあたり8CPUコアを利用
  - 比較的小規模なジョブ向け
  - KVM仮想マシン技術により、以下のようなノードに見える
    - 8CPUコア (hyperthreadingで16コアに見える)
    - 23GBメモリ
    - GPUは無し
  - Vキューではノード内にジョブは混在しうる(共有)
  - I/O速度は他キューより下がるので注意

GPU系：Gキュー

- ノードあたり3GPU+4CPUコアを利用
  - GPUジョブに適している
  - 以下のようなノードに見える
    - 4CPUコア
    - 3GPU
    - 25GBメモリ
  - Vキュージョブと仮想マシン技術によりノードを共有
  - 従量制課金、Sに比べ0.5倍　(お買い得)
  - 定期的にGSICがGPU講習会開催 (ほぼ毎回満員御礼)

予約系：Hキュー

- 予約した期間ノードを占有して利用
  - 従来のHPCキューに相当
  - 1000CPUコアレベルの並列性が必要なジョブ向け
  - Webから日程・ノード数を予約
  - バッチキューを介さない利用も可
  - 従来よりも、柔軟な予約が可能
    - ノード数は16以上自由、期間は一日単位で最大7日

主要サービス比較

S ノード占有系 S96, L128なども	従量	約330台	並列度・I/O速度重視 MPI, GPUジョブもOK
U 仮想マシン占有系	定額	約220台	ノード内並列ジョブ向け CPUのみ、I/Oはやや弱め
V 仮想マシン内共有系	定額	約220台	比較的小規模ジョブ向け CPUのみ、I/Oはやや弱め
G GPU系	従量	約480台 (U,Vと共有)	GPUジョブ向け MPI, GPUジョブもOK CPUコア数とメモリが少な目
H 予約系	従量	約420台	大規模並列向け 1日単位1ノード単位で予約が可能に
グランド チャレンジ		400~1400台	超大規模ジョブ向け 審査制、年数回予定

バッチキューの使い方
t2subコマンドの基本

- PBS Proというバッチキューシステムを用いて計算ノードにジョブ投入します
- myprogというプログラムを、Sキューで実行する場合

(1) 同じディレクトリにスクリプトファイルを作っておく(たとえばjob.shというファイル) ⇒ chmod 755 job.sh などにより「実行可能」の必要

```
#!/bin/sh
cd $PBS_O_WORKDIR
./myprog
```

job.shファイル

(2) t2subコマンドで投入

```
t2sub –W group_list=xxx –q S ./job.sh
```

-q xxx: キュー名を指定

-W group_list=xxx: TSUBAMEグループ番号を指定

バッチキューの使い方
MPI並列ジョブの場合

(1)myprogがMPIプログラムとする。スクリプトは以下のように:

job.shファイル

```
#!/bin/sh
cd $PBS_O_WORKDIR
mpirun –n 並列数 –hostfile $PBS_NODEFILE ./myprog
```

(2) t2subコマンドで投入

```
t2sub –q S –W group_list=xxx –l select=10:mpiprocs=12 ¥
        -l place=scatter ./job.sh
```

- この場合、ノードあたり12並列 × 10ノード = 120並列で実行

バッチキューの使い方
SMP並列(スレッド,OpenMP)ジョブ

(1) myprogがプログラムとする。スクリプトは以下：

```
#!/bin/sh
cd $PBS_O_WORKDIR
./myprog
```

job.shファイル

(2) t2subコマンドで投入

```
t2sub –W group_list=xxx –l select=1:ncpus=8 –q S ./job.sh
```

- この場合、1ノード内で、8並列で実行

T2subのその他のオプション

- -l walltime=10:00:00

ジョブの最大実行時間。省略すると1時間

- -l select=～～:mem=40gb

ジョブが利用するメモリサイズ(ノードあたり)。省略すると1GB

- -o /xxx/yyy.txt

標準出力の出力先ファイル名

- -e /xxx/yyy.txt

標準エラー出力の出力先ファイル名

詳細は「t2sub -h」のヘルプ表示や、web上の「利用の手引」をご参照ください

バッチキュー関係コマンド

- t2stat

ジョブの状態を確認。通常は自ジョブのみ

例) t2stat –all: 他ユーザのジョブも表示

例) t2stat V: 指定したキュー(V)の情報のみ表示

- t2del

ジョブの終了を待たずに削除

例) t2del 147.t2zpbs03

ユーザが利用可能なストレージ構成

Home領域

- 用途
  - 計算ノードのホームディレクトリ(NFS)
  - (学内ストレージサービス(CIFS))
  - (学内ホスティングサービス(iSCSI))
- 利用方法
  - 1ユーザあたり25GBまで無料
  - ~ユーザ名/ でアクセス可能

Work領域

- 用途
  - 大規模データ格納
  - Linux計算ノードからアクセス可能 (Lustre)
  - グループ単位で利用可能
- 利用方法
  - TSUBAMEグループ単位で要申請。TB × 月で課金
  - /work1, /work0

テープライブラリと連携した階層型ファイルシステム(GPFSによる/data0)もあり

Work領域の利用方法

- [グループ管理者] TSUBAMEグループを登録、ディスクオプションを有効に ⇒　/work1または/work0以下にグループ名のディレクトリが生成
- [各ユーザ] 生成されたディレクトリ内に自分の作業ディレクトリを作成する

例: /work1/t2g-group-name/USER01, USER02, ….

利用上の注意

- インタラクティブノードでは長時間CPUを独占するプロセスを走らせないでください (数分が目安)
  - エディタ、コンパイラ、可視化ツール等はok
- 大量にディスクI/Oを行う場合は/homeではなく/work1, /work0を利用してください
- アカウントの貸し借り禁止

TSUBAME2の情報入手

TSUBAME2 WWWサイト

http://tsubame.gsic.titech.ac.jp/

特に大事なのは，メニュー⇒利用について⇒各種利用の手引き⇒TSUBAME2.5利用の手引き

Top⇒「Current Status」で，今の混雑具合やシステム利用電力を閲覧

TSUBAME2についての問い合わせ先

soudan@o.cc.titech.ac.jp

数人のGSICメンバー+常駐員が数千人のユーザからの質問を受け付けています．FAQも一度読んでから！