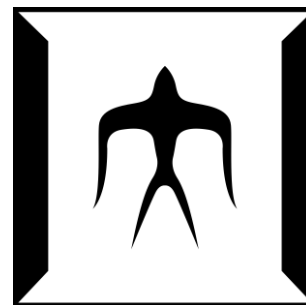
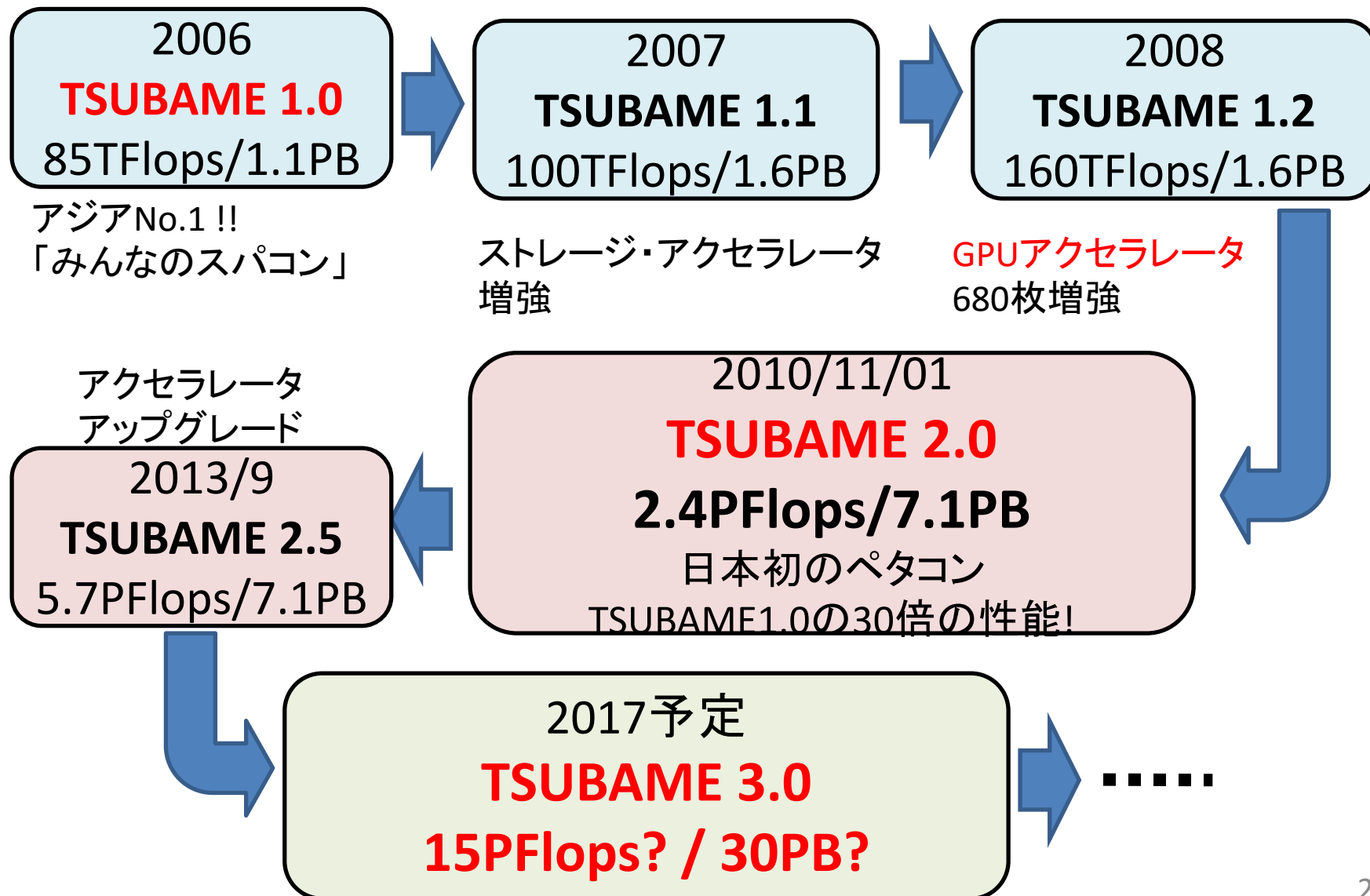


スーパーコンピュータ TSUBAME 2.5利用ガイドンス

GSICのガイドンス資料を抜粋・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

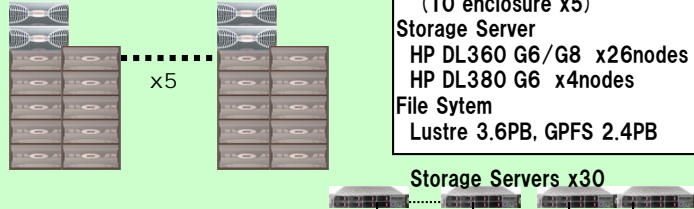


ハードウェア構成

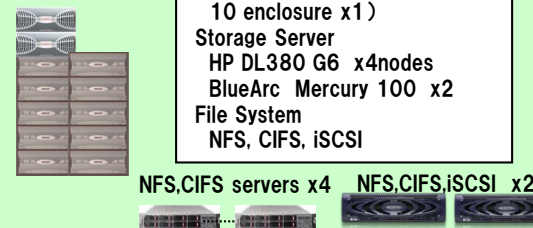
スーパーコンピュータTSUBAME2.5 システム構成

ペタバイト級HDD ストレージ: Total **7.2PB** (Lustre+ home)

並列ファイルシステム領域 6.0PB



ホーム領域 1.2PB



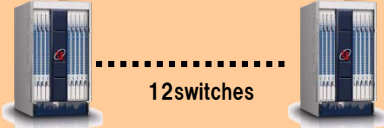
StorageTek
SL8500
テープシステム
~8PB

HPCIストレージ 0.6PB



ノード間相互結合網: フルバイセクション ノンブロッキング 光 QDR InfiniBand ネットワーク

Core Switch



Voltaire Grid Director 4700 12switches
IB QDR: 324port

Edge Switch



Voltaire
Grid Director 4036 179switches
IB QDR: 36 port

Edge Switch (10GbE port付き)



Voltaire
Grid Director 4036E 6 switches
IB QDR:34port
10GbE: 2port

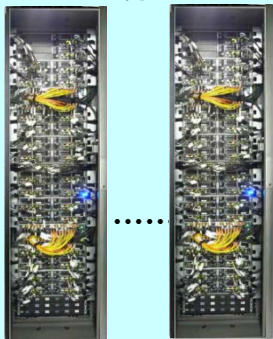
管理サーバ群

Titenet3

Sinet4

計算ノード: **5.76PFLOPS (CPU+GPU)**, **225TFLOPS (CPU)**, **~120TBメモリ**, **>200TB SSD**

Thin計算ノード



1408nodes

30node x 42MCS racks, 他148nodes

HP Proliant SL390s G7 1408nodes
CPU Intel Westmere-EP X5670 2.93GHz
(Turbo boost 3.2GHz) 12Core/node
Mem: 58GB (54GiB) x1367nodes
103GB (96GiB) x41nodes
GPU NVIDIA Tesla K20X 1.31TFlops,3GPU/node
SSD 60GB x 2 120GB ※54GiBメモリ搭載node
120GB x 2 240GB ※96GiBメモリ搭載node
OS: SUSE Linux Enterprise / Windows HPC Server

CPU Total Speed: 216TFLOPS (w/Turbo boost)

Total Speed: 5750TFLOPS

Memory Total:83.5TB (CPU) + 27.2TB (GPU)

SSD Total:173.9TB

Medium計算ノード



HP DL580 G7 24nodes
CPU Intel Nehalem-EX 2.0GHz
32Core/node
Mem:137GB (128GiB)
SSD 120GB x 4 480GB
OS: Suse Linux Enterprise Server

CPU Total Speed: 6.14TFLOPS

Fat計算ノード



HP DL580 G7 10nodes
CPU Intel Nehalem-EX 2.0GHz
32Core/node
Mem:274GB (256GiB) x8nodes
548GB (512GiB) x2nodes
SSD 120GB x 4 480GB
OS: Suse Linux Enterprise Server

CPU Total Speed: 2.56TFLOPS

PCI-E gen2 x16 x2slot/node

GSIC:NVIDIA Tesla S1070GPU

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



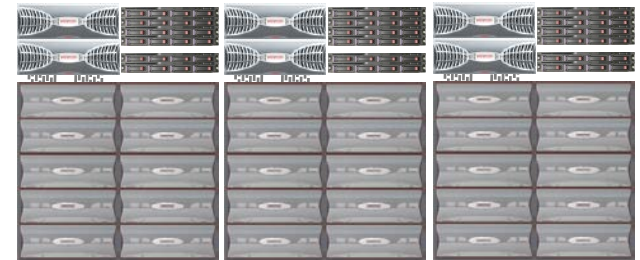
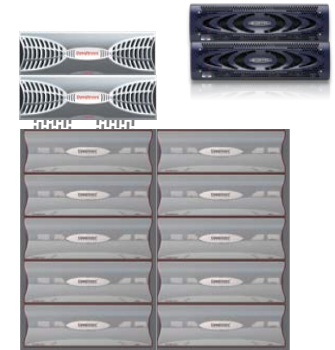
計算ノード(2)

- 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○、パスワード×
 - 学内からは鍵認証○、パスワード○ (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

基本ソフトウェア

OS	SUSE Linux Enterprise Server 11 SP3
Job Scheduler	PBS Professional

Compiler	Intel Compiler, PGI CDK, gcc 4.3.4
MPI	OpenMPI, MVAPICH2
GPGPU	CUDA

- 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

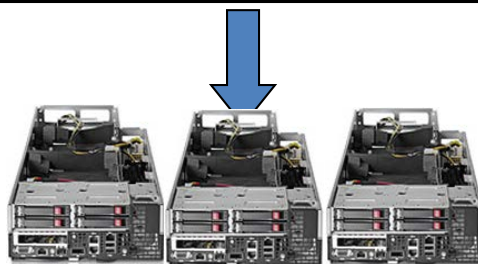
TSUBAME2へのログイン(1)



SSH

login-t2.g.gsic.titech.ac.jp

インタラクティブノードに
自動で移動、作業可能



バッチキューシステムで
ジョブ投入



計算ノードたち(1000ノード以上)

TSUBAME 2.5 ガイダンス

TSUBAME2へのログイン(2)

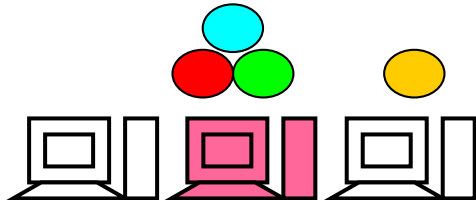
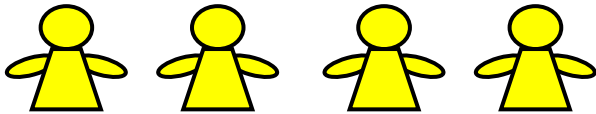
- Linuxなどからの場合
 - ssh [アカウント名]@login-t2.g.gsic.titech.ac.jp
 - Windowsの端末ソフトからの場合(putty, ttsshなど)
 - ホスト名 : login-t2.g.gsic.titech.ac.jp
 - プロトコル : SSH
 - ポート: 22
 - ユーザ名(アカウント名)・パスワードを正しく入力
- 様々なメッセージの後に以下のように表示されればログイン成功

10B12345@t2a006163:>

バッチキューシステムとは

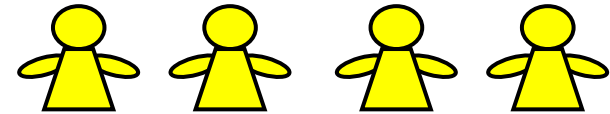
- TSUBAME2ではPBSPProというバッチキューシステムでジョブ(プログラム)を投入
- 多数のプログラムの「交通整理」
 - OSはノード内、バッチキューシステムはノード間の管理

システムなし

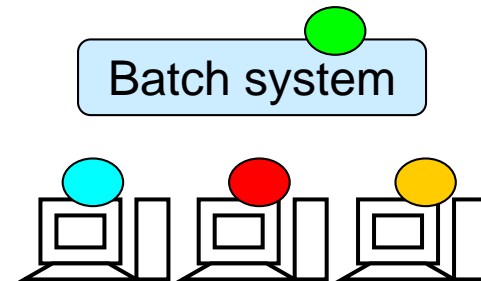


ユーザが自分でノード決定
混雑すると実行が遅くなる

システムあり



Batch system



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Medium/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/>

特に大事なものは、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！