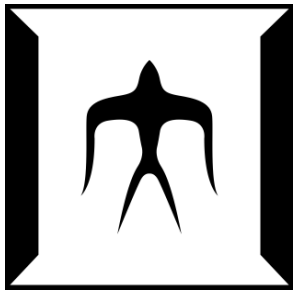
TSUBAME3.0利用講習会

www.t3.gsic.titech.ac.jp



令和2年度版（2021/02/09)

東京工業大学
学術国際情報センター
共同利用推進室

CONTENTS

- □ 歴史・概要
- □ ハードウェア・ソフトウェア仕様
- □ 利用開始とログイン
- □ 利用可能アプリケーション～module～
- □ 資源タイプ（計算ノード）
- □ ジョブの実行とスクリプト
- □ TSUBAMEポイントと課金
- □ リンク一覧

TSUBAMEの歴史

TSUBAMEの変遷

2006年　TSUBAME1.0　85TFlops/ 1.1PB　アジアNo1「みんなのスパコン」
2007年　TSUBAME1.1　100TFlops/ 1.6PB　ストレージ・アクセラレータ増強
2008年　TSUBAME1.2　160TFlops/ 1.6PB　GPUアクセラレータ680枚増強 (S1070)
2010年　TSUBAME2.0　2.4PFlops/ 7.1PB　日本初のペタコン (M2050)
2013年　TSUBAME2.5　5.7PFlops/ 7.1PB　GPUをアップグレード (K20X)
2017年　TSUBAME3.0　12PFlops/16.0PB　Green500 世界1位！(P100)

共同利用推進室の事業　TSUBAME学外利用の窓口として

2007年 文科省 先端研究施設共用イノベーション創出事業（無償利用）
2009年 TSUBAME共同利用開始（有償利用）
2010年 文科省 先端研究施設共用促進事業、JHPCN 開始
2012年 HPCI（革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ）開始
2013年 文科省 先端研究基盤共用・プラットフォーム形成事業
2016年 東京工業大学 学術国際情報センター 自主事業化、
HPCI 産業利用（実証利用、トライアル・ユース）開始

利用区分 ／ 年度			2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013	2014	2015	2016	2017	2018	2019	2020	合計
学術利用	HPCI		-	-	-	-	-	6	5	10	14	5	9	12	16	14	91
	JHPCN		-	-	-	4	6	5	11	10	10	12	11	15	14	8	106
	有償利用		-	-	1	4	9	14	17	22	23	25	23	27	25	28	218
産業利用	無償利用/HPCI		11	15	15	8	10	12	21	17	13	15	8	3	3	1	152
	有償利用	公開	-	-	3	6	7	9	8	10	8	8	5	6	4	5	79
		非公開	-	-	2	7	6	4	10	12	10	13	16	19	19	20	138
合計			11	15	21	29	38	50	72	81	78	78	72	82	81	76	784

利用区分

- 有償利用
  - 共同利用：産業利用（成果公開・成果非公開）
  - 共同利用：学術利用（成果公開のみ）
- 無償利用
  - HPCI/JHPCN による利用（学術・産業）

利用区分	利用者	制度		募集時期	申請および審査	成果	料金（税込）
学術利用	他大学 または 研究機関等	HPCI		年1回 10月頃	HPCI運用事務局 （高度情報科学技術研究機構）	公開	無償
		JHPCN		年1回 1月頃	JHPCN拠点事務局 （東京大学 情報基盤センター）	公開	無償
		TSUBAME学術利用		随時 募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	1口：110,000円
産業利用	民間企業	HPCI	実証利用	年1回 10月頃	HPCI運用事務局 （高度情報科学技術研究機構）	公開	無償
			トライアルユース	随時 募集中			
		TSUBAME産業利用		随時 募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	1口：110,000円
						非公開	1口：330,000円

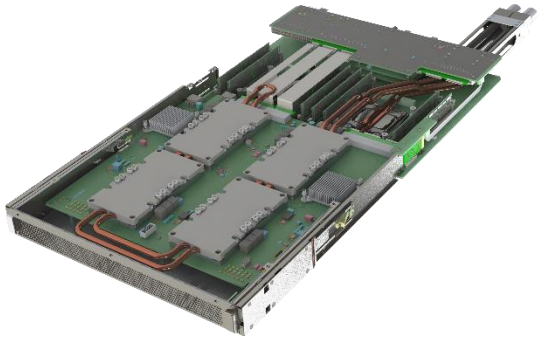
※ 2017年8月より運用開始
Green500 世界1位(2017/6)
Top500 国内 5位 (2020/11)

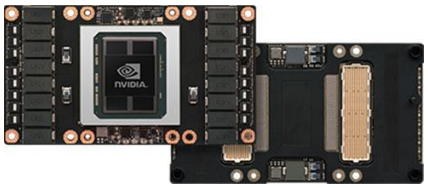
TSUBAME3.0 概要

Compute Node

CPU: Intel Xeon E5-2680v4（14core） × 2
GPU: NVIDIA Tesla P100 × 4

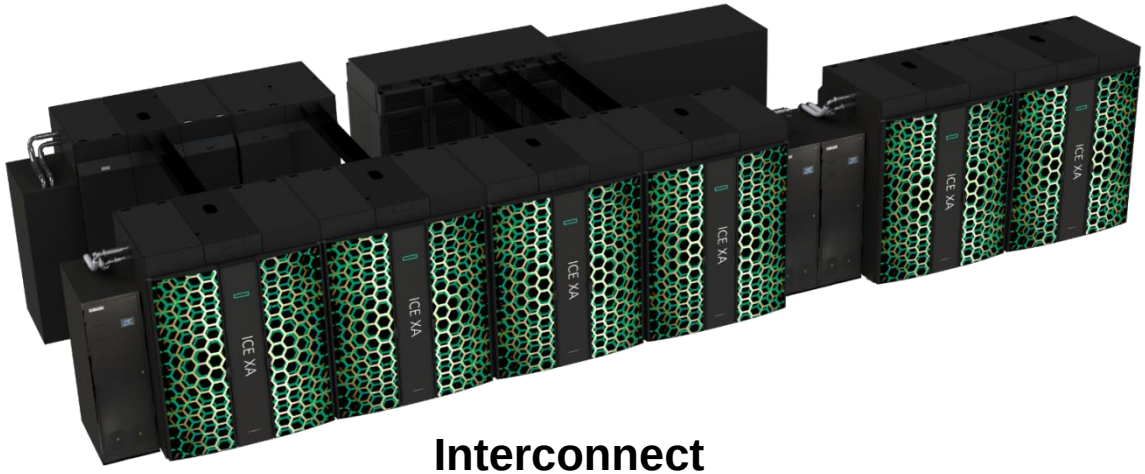
Performance: 22.5 TFLOPS
Memory: 256 GB(CPU)
64 GB(GPU)





System

540 nodes: 15120 CPU cores, 2160 GPUs
Performance: 12.15 PFLOPS



Interconnect

Intel Omni-Path HFI 100Gbps ×4
Topology: Fat-Tree

Operating System

SUSE Linux Enterprise Server 12 SP4

Job Scheduler

UNIVA Grid Engine

https://www.gsic.titech.ac.jp/sites/default/files/T3SpecJ.pdf

GPUスパコン計算ノード比較

	資源提供機関	計算資源名／機種名	システム全体		ノード単体			ノード間ネットワーク
			演算性能	ノード数	プロセッサ	演算性能	メモリ	
Xeon+GPU(NVIDIA Tesla)	東工大	**TSUBAME3.0**	12.15 PF	540	Xeon E5-2680v4, 2.4GHz(14コア)x2 +Tesla P100 x4, NVLink	22.5 TF	256GiB	Intel Omni-Path 100Gbps x4
	名大	**CX2570 M5**	7.49 PF	221	Xeon Gold 6230, 2.10-3.90 GHz(20コア)x2 +Tesla V100 x4	33.88 TF	384GiB	InfiniBand EDR 100 Gbps x2
	九大	**ITO サブシステムB** CX2570 M4	3.05 PF	128	Xeon Gold 6140 (Skylake-SP,2.3GHz,18コア)x2 +Tesla P100x4, NVLink	23.85TF (2.65TF + 5.3TF*4)	384GiB	InfiniBand EDR 4x 100 Gbps
	筑波大	**Cygnus** (Deneb node)	2.4 PF	80	Xeon Gold 6126 (Skylake-SP,2.6GHz,12コア)x2 +Tesla V100x4,PCIe	30TF	192GiB	InfiniBand HDR100 4x
	東大	**Reedbush-L**	1.43 PF	64	Xeon E5-2695v4, (Broadwell-EP, 2.1GHz, 18コア)x2 +Tesla P100 x4, NVLink	22.41TF (1.21TF + 5.3TF*4)	256GiB	InfiniBand EDR 4x * 2port 200Gbps
		Reedbush-H	1.42 PF	120	Xeon E5-2695v4 (Broadwell-EP, 2.1GHz, 18コア)x2 +Tesla P100 x2, NVLink	11.81TF (1.21TF + 5.3TF*2)	256GiB	InfiniBand FDR 4x 2リンク 56Gbps x2
	産総研	**ABCI** ※1	37.2 PF	1088	Xeon Gold 6148 (20コア) x2 +Tesla V100 x 4	34.19TF	384GiB	InfiniBand EDR

https://www.hpci-office.jp/materials/r03_boshu_setsumeikai_hpci.pdf#page=5 より引用

利用開始とログイン

2008年 2010年 2013年 2017年

Tesla S1070 (Tesla GT200)
on TSUBAME1.2

Tesla M2050 (Fermi)
on TSUBAME2.0

Tesla K20X (Kepler)
on TSUBAME2.5

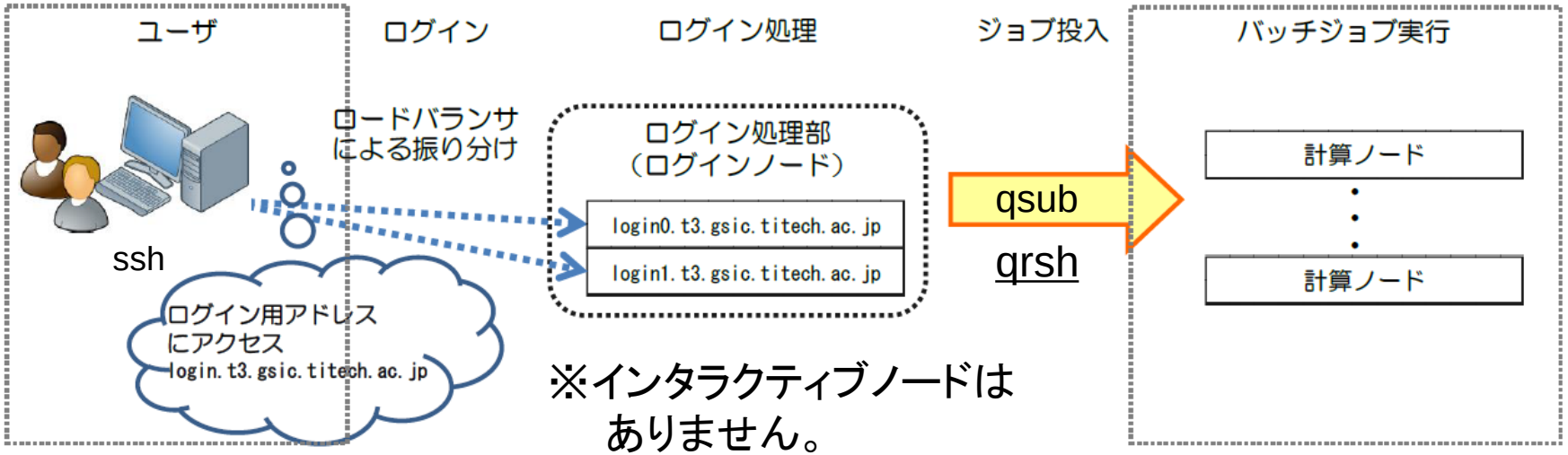
Tesla P100 (Pascal)
on TSUBAME3.0

7位 4位 12位 13位

TOP 500 ランキング推移

https://www.gsic.titech.ac.jp/top500

計算機へのログイン



- SSHログイン: ssh <username>@login.t3.gsic.titech.ac.jp
  → どちらかのログインノードに振り分けられる
  - 原則、公開鍵認証方式のみ(パスワードは不可)
  - ログインノードではファイル編集、軽いコンパイルなど
  - GPU なし (module load cuda でCUDAコンパイルは可能)
  - HPCI ユーザーも同じログインノードを使用 (gsi ssh)
  - GUI (X Window) を利用する場合は ssh –YC にてログインする

TSUBAME3ポータル

- **アカウント作成方法 (以下のいずれか)**
  - 東工大学内では、東工大ポータル → TSUBAMEポータル
  - TSUBAMEポータル https://portal.t3.gsic.titech.ac.jp/ptl/
- 学外の方のアカウントは共同利用推進室にて発行

  アカウント発行に際し本人のメールアドレスが必要

  TSUBAME3.0ポータルにて

  - 公開鍵の設定（ssh-keygen, Tera Term, PuTTY）

    ※ Windowsで利用可能なSSHクライアント https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/windows_sshclients

  - パスワードの設定（ログインパスワード）
  - ジョブ情報の確認（ポイント消費など）
  - https://www.gsic.titech.ac.jp/sites/default/files/Portal2020v1.pdf

有償サービス

- 課題単位でグループを作成
  課題採択: TSUBAMEグループ を割り当てる

- TSUBAMEポイントによるプリペイド従量制
  - １ノード×１秒＝ 1 TSUBAMEポイント
  - １口＝ 1000ノード時間＝ 1000 × 3600 TSUBAMEポイント
    ポイントを消費し口数が不足した場合は追加購入可能。

- グループ共有の高速ストレージ (Lustre)
  - /gs/hs0/グループ名, /gs/hs1/グループ名
  - TB×月単位 （1TB/月 36,000 TSUBAMEポイント）
  - ホームディレクトリ (25GB) の利用は無償

TSUBAME3.0ソフトウェア

- OS: SUSE Linux Enterprise Server (SLES) 12 SP4
  - Docker コンテナ（ https://helpdesk.t3.gsic.titech.ac.jp/manuals/handbook.ja/jobs/#container ）
  - Singularity 対応（ https://helpdesk.t3.gsic.titech.ac.jp/manuals/handbook.ja/freesoft/#singularity ）
- スケジューラ: Univa Grid Engine (8.6.10)
- コンパイラ: gcc (4.8.5), Intel (19.0) , PGI (20.1)
- MPI: OpenMPI, Intel MPI, SGI MPT (Message Passing Toolkit)
- CUDA 10.2.89 (default) が利用可能
- プログラミングツール: Intel Vtune, PAPI, ARM Forge…
- 多種ISVアプリ（後述）

moduleコマンド(後述) による切り替え

moduleコマンドについて

- 利用するソフトウェアに関係する環境設定を、
  module コマンドを用いて設定する
  - 例：module load intel　→ Intelコンパイラ
    - module load intel/19.0.0.117 のようにバージョン指定も可能
  - 例：module load python-extension/3.4
- 用意されているモジュールの一覧：module avail
- モジュールによっては、さらに依存モジュールのロードが必要。現在のモジュールは module list で確認する
  - 例：gromacsモジュールはintel-mpiモジュールに依存
- moduleコマンド自体が動かないとき(後述)は
  - . /etc/profile.d/modules.sh ←先頭は「ドット・スペース」

現在インストールされているモジュール(1)

コンパイラ、MPI、開発ツール 関連のモジュール。$ module available

必要な環境に応じた module を load し、プログラムをコンパイルする。

コンパイラ: gcc 4.8.5(*)、Intel 19.1.0.166、PGI 20.1 (LLVM対応)、clang 9.0.0

MPI: OpenMPI、Intel MPI、SGI MPI (MPT)

例1) gcc + OpenMPI の場合: module load cuda openmpi

例2) Intel + IntelMPI の場合: module load intel cuda intel-mpi

```
------------------------------------------------- /apps/t3/sles12sp2/modules/modulefiles/compiler -------------------------------------------
cuda/10.0.130             cuda/9.0.176              intel/17.0.5.239          pgi/17.10                 pgi/19.7
cuda/10.1.105             cuda/9.1.85               intel/18.0.1.163          pgi/17.5                  pgi/20.1(default)
cuda/10.2.89(default)     cuda/9.2.148              intel/19.0.0.117          pgi/18.1                  pgi-llvm
cuda/8.0.44               intel/16.0.4.258          intel/19.1.0.166(default) pgi/18.7                  pgi-nollvm
cuda/8.0.61               intel/17.0.4.196          intel/19.1.1.217          pgi/19.1
------------------------------------------------- /apps/t3/sles12sp2/modules/modulefiles/mpi -------------------------------------------
ibmmpi/v9.01.04.03                  mpt/2.16                                openmpi/2.1.2-opa10.9-thread-multiple
intel-mpi/17.3.196                  openmpi/1.10.2-pgi2017                  openmpi/2.1.2-pgi2017
intel-mpi/17.4.239                  openmpi/2.1.1                           openmpi/2.1.2-pgi2018
intel-mpi/18.1.163                  openmpi/2.1.2                           openmpi/2.1.2-thread-multiple
intel-mpi/19.0.117                  openmpi/2.1.2-opa10.9                   openmpi/3.1.4-opa10.10(default)
intel-mpi/19.6.166(default)         openmpi/2.1.2-opa10.9-t3 (東工大Bugfix)  openmpi/3.1.4-opa10.10-t3
intel-mpi/19.7.217                  openmpi/2.1.2-opa10.9-t3-thread-multiple
------------------------------------------------- /apps/t3/sles12sp2/modules/modulefiles/tools -----------------------------------------------
allinea/7.0.5(default)          intel-ins/18.1.1.535159          intel-itac/19.0.018              intel-vtune/20.0.0.605129(default)
forge/18.0.1                    intel-ins/19.0.0.569751          intel-itac/20.0.015(default)     intel-vtune/20.1.0.607630
forge/19.0.5(default)           intel-ins/20.0.0.603904(default) intel-itac/20.1.024              papi/5.5.1
forge/20.0.3                    intel-ins/20.1.0.604266          intel-vtune/17.4.0.518798        perfboost/2.16
forge/7.0.5                     intel-itac/17.3.030              intel-vtune/17.5.0.526192        perfsuite/1.1.4
intel-ins/17.1.3.510645         intel-itac/17.4.034              intel-vtune/18.1.0.535340
intel-ins/17.1.4.527006         intel-itac/18.1.017              intel-vtune/19.0.2.570779
------------------------------------------------- /apps/t3/sles12sp2/modules/modulefiles/hpci-apps ------------------ 【国プロアプリ】-----------------------------------
abinit-mp/1.10              frontistr/5.0b(default)     hphi/3.1.2                openmx/3.8.3               salmon/1.2.0
abinit-mp/1.15(default)     genesis/1.3.0_cpu           hphi/3.3.0(default)       openmx/3.8.5(default)      salmon/1.2.1(default)
frontflowblue/8.1           genesis/1.3.0_gpu(default)  modylas/1.0.4             phase0/2018.01.01          smash/2.2.0
frontistr/5.0a              hphi/3.0.0                  ntchem2013/10.1           salmon/1.0.0
```

※ gcc, gfortran 等は module load しなくても利用できます。gcc は 8.3.0 も利用可能です。

※ 2020年春のメンテナンス後のバージョン一覧　https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/changes2020

現在インストールされているモジュール(2)

アプリケーションの モジュール の一覧。 $ module available 続き ※ISVのプログラムによっては学外の方はご利用になれません。

```
--------------------------------------- /apps/t3/sles12sp2/modules/modulefiles/isv ----------------------------------
abaqus/2017                 ansys/R20.1(default)        gaussian16/B01              maple/2019.1                matlab/R2018a_u6
abaqus/2017_explicit        avs/8.4                     gaussian16/B01_cpu          maple/2019.2.1              matlab/R2018b
actran/19.1                 comsol/53                   gaussian16/B01_gpu          maple/2020.1                matlab/R2019a
actran/2020                 comsol/53a                  gaussian16/C01_cpu          marc_mentat/2017            matlab/R2019b
amber/16                    comsol/53a_u1               gaussian16/C01_gpu(default) marc_mentat/2017.1          matlab/R2020a(default)
amber/16_cuda               comsol/53a_u2               gaussian16/C01_nbo7         marc_mentat/2018.1          nastran/2017.1
amber/16up10                comsol/53a_u3               gaussian16_linda/A03        marc_mentat/2019            nastran/2018.1
amber/16up10_cuda           comsol/53a_u4               gaussian16_linda/B01        marc_mentat/2019.1          nastran/2018.2
amber/16up12_cuda           comsol/54                   gaussview/6                 mathematica/11.1.1          nastran/2018.2.1
amber/18up12                comsol/54_u1                gaussview/6.1               mathematica/11.2.0          nastran/2019.0
amber/18up17                comsol/54_u3                lsdyna/R10.1.0              mathematica/11.3.0          nastran/2020.0
amber/18up5(default)        comsol/54_u4                lsdyna/R10.2.0              mathematica/12.0.0(default) patran/2017.0.2
amber/20up0                 comsol/55                   lsdyna/R11.1.0              mathematica/12.1.0          patran/2018.0
ansys/R18.1                 comsol/55_u1                lsdyna/R9.1.0               mathematica/12.1.1          patran/2019.0
ansys/R18.2                 comsol/55_u2                lsdyna/R9.3.1               matlab/R2017a               patran/2019fp1
ansys/R19.0                 comsol/55_u3(default)       lsprepost/4.3               matlab/R2017a_u3            schrodinger/2020-2
ansys/R19.3                 dytran/2017                 lsprepost/4.5               matlab/R2017b               schrodinger/Feb-17
ansys/R19.4                 dytran/2018                 maple/2016.2                matlab/R2017b_u9
ansys/R19.5                 gaussian16/A03              maple/2018.1                matlab/R2018a
------------------------------------------ /apps/t3/sles12sp2/modules/modulefiles/free --------------------------------
a2ps/4.14                   fftw/3.3.8                  jupyterlab/2.1.0(default)   openfoam-esi/v1906          singularity/3.4.1
caffe/1.0                   firefox/76.0.1              jupyterlab/2.1.0-py383      openfoam-esi/v1912          singularity/3.4.2(default)
chainer/4.3.0               gamess/apr202017r1          lammps/31mar2017            openjdk/1.8.0.242           singularity/3.6.0
chainer/5.2.0               gcc/10.1.0                  lammps/3mar2020             paraview/0_5.2.0            tensorflow/1.12.0
clang/10.0.0                gcc/10.1.0-cuda             llvm/3.9.1                  paraview/5.0.1              tensorflow/1.9.0
clang/9.0.0                 gcc/8.3.0(default)          mesa/13.0.3                 paraview/5.4.0(default)     tensorrt/6.0.1.8
cp2k/4.1                    gcc/8.3.0-cuda              mpifileutils/0.9.1          paraview/5.8.0              texlive/20170704
cp2k/4.1-libint             gimp/2.10.4                 namd/2.12                   paraview/5.8.0-egl          tgif/4.2.5
cp2k/5.1_cuda               gimp/2.8.22                 namd/2.12-20180711          petsc/3.7.6/complex         tinker/8.1.2
cp2k/5.1-libint             gnuplot/5.0.6               namd/2.13                   petsc/3.7.6/real            tinker/8.7.2
cp2k/7.1.0                  gnuplot/5.2.4               namd/2.13-20191210          petsc/3.9.3/complex         tmux/2.5
cudnn/5.1                   gromacs/2016.3              namd/2.14b1                 petsc/3.9.3/real            tmux/2.7
cudnn/6.0                   gromacs/2018.1              namd/2.14b2                 php/7.1.6                   turbovnc/2.2.2
cudnn/7.0                   gromacs/2019.4(default)     nccl/1.3.4                  pov-ray/3.7.0.3             visit/2.12.3
cudnn/7.1                   gromacs/4.6.7               nccl/2.1                    python/3.6.5(default)       vmd/1.9.3
cudnn/7.3                   hadoop/2.8.0                nccl/2.1.4                  python/3.8.3                vtk/6.1.0
cudnn/7.4                   hdf5/1.10.1                 nccl/2.2.13                 python-extension/2.7(default) vtk/8.0.0(default)
cudnn/7.6                   hdf5-parallel/1.10.5        nccl/2.4.2(default)         python-extension/3.4        xpdf/3.04
dmtcp/2.5.2                 hpci/1.0                    netcdf-parallel/4.7.0       r/3.4.1
ffmpeg/4.2.2                imagemagick/7.0.6           openfoam/4.1                singularity/2.6.1
fftw/2.1.5                  intel-python/2.7.14(default) openfoam/6.0               singularity/3.2.1
fftw/3.3.6                  intel-python/3.6.5          openfoam/7.0                singularity/3.3.0
```


※ アプリケーションのバージョンアップにより module のバージョンが更新されていることがありますのでご注意ください。

ジョブの実行についての概要

- ジョブスケジューラは UNIVA Grid Engine (UGE)
- ジョブの性質にあわせて、資源タイプを選択
  - f_node (フル), h_node (ハーフ), q_node (クォーター)…
  - s_gpu、q_core、s_core …
- ジョブの投入は qsub コマンドを用いる
  - 「ジョブスクリプト」を用意する (vi, vim, emacs など…)
- 予約キューの利用
  - 1時間、1ノード単位からの予約、24時間以上のジョブ
- ssh による計算ノードへの直接ログイン
  - qsub で割り当てた f_node のみ直接 ssh でログイン可能

資源タイプ一覧

資源タイプ	タイプ名	CPUコア数	メモリ(GB)	GPU数	課金係数
F	f_node	28	235	4	1.00
H	h_node	14	120	2	0.50
Q	q_node	7	60	1	0.25
G	s_gpu	2	30	1	0.20
C4	q_core	4	30	N/A	0.20
C1	s_core	1	7.5	N/A	0.06

- MPIジョブ等では、f_node=4、q_node=10 のように1ジョブで複数資源を利用可能
  - 異種混在は不可、最大で 72ノード割り当て可能
  - 520ノードから各資源タイプを割り当てる
  - 最大利用可能資源量は→ https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/resource-limit

計算ノードのインタラクティブ利用

- 計算ノードにて対話的な実行を試したい場合など、
  インタラクティブな利用が可能 (-I = ハイフン 小文字のエル)

  qrsh –l [資源タイプ] –l h_rt=[利用時間] –g [グループ]

- 例: qrsh –l q_node=1 –l h_rt=0:10:00 (お試し利用)

→ 計算ノードが割り当てられ、Linuxコマンドが実行できる。

※ この例では q_node なので、7コア1GPU 利用可能。

- 10分以上利用する時は、-g オプションにてTSUBAMEグループを指定する。 h_rt には適切な wall time を設定する。
- 例: qrsh –l f_node=2 –l h_rt=1:00:00 –g tgx-20IXX

※ 複数ノードを割当てた際は cat $PE_HOSTFILE にて計算ノードを確認できる

- f_node 以外を qrsh で割り当てた場合もX転送が可能

  例 : qrsh -l s_core=1,h_rt=0:10:00

ジョブの投入の概要

1. ジョブスクリプトの作成
   - ジョブの最長実行時間は24:00:00（延長なし)
   - お試しだと 00:10:00 （10分間 2ノードまで無料）
   - 24時間以上実行する場合は予約システムを利用
2. qsub を利用しジョブを投入
3. qstat を使用しジョブの状況を確認
4. qdel にてジョブをキャンセル
5. ジョブの結果を確認

※詳細はこちら → https://helpdesk.t3.gsic.titech.ac.jp/manuals/handbook.ja/jobs/#jobscript

Step 1. ジョブスクリプト

- 下記のような構成のファイル(ジョブスクリプト)をテキストエディタなどで作成 (vi など TSUBAME上で編集)
  - 拡張子は .sh

```
#!/bin/sh
#$ -cwd
#$ -l [資源タイプ]=[個数]
#$ -l h_rt=[経過時間]
#$ -p [プライオリティ]
[module の初期化]
[プログラミング環境のロード]
[プログラム実行]
```

← 現在のディレクトリで下記を実行する (あったほうがよい)

← 資源タイプ × 個数を利用 (必須)

← 実行時間を0:10:00などと指定 (必須)

← スケジューラにとっての優先度(なくても可) 省略時は -5、-4 が中間、-3 が最優先

-cwd, -l, -p等は、このスクリプトに書く代わりに、qsubのオプションとしてもok
他のオプションについては、利用の手引き4.2.2を参照

ジョブスクリプトの例(1)

- 例：Intelコンパイラ+CUDAでコンパイルされたプログラム a.out を実行したい

```
#!/bin/sh
#$ -cwd
#$ -l s_gpu=1
#$ -l h_rt=0:10:00
#$ -N GPU
. /etc/profile.d/modules.sh
module load cuda
module load intel
./a.out
```

※ -l は ハイフン 小文字のエル
※ . /etc は “ドット スペース /etc”

s_gpu を1個使用 (GPU利用の最小単位)
実行時間を10分（お試し利用）に設定
ジョブに名前をつけることも可能
「module」を利用可能にする
「cuda」と「intel」必要なモジュールを load
一行にも書ける module load cuda intel
プログラムを実行

```
module load cuda pgi
```

※ PGI のオプションは –ta=tesla,cc60
もしくは pgfortran –Mcuda=cuda8.0,cc60
-gencode=arch=compute_60, code=sm_60

ジョブスクリプトの例 (2)

- OpenMP による、ノード内並列ジョブの例

```
#!/bin/sh
#$ -cwd
#$ -l f_node=1
#$ -l h_rt=0:10:00
#$ -N openmp
. /etc/profile.d/modules.sh
module load cuda/9.0.176
module load intel/18.0.1.163
export OMP_NUM_THREADS=28

./job_pre
./job_main
./job_post

for i in data1 data2 data3 …
do
    ./program ${i}
done
```

資源タイプ F を 1ノード使用

バージョンを明示的に指定

ノード内に28スレッドを配置

複数の処理の記述も可能

入力データの数だけループの例

※ CPU/GPUの指定 https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/node/326

ジョブスクリプトの例(3)

- MPIによる、複数ノード並列の例 (Intel MPI)

```
#!/bin/sh
#$ -cwd
#$ -l f_node=2
#$ -l h_rt=0:10:00
#$ -N intelmpi
. /etc/profile.d/modules.sh
module load cuda
module load intel
module load intel-mpi
mpiexec.hydra -ppn 4 -np 8 ./a.out
```

資源タイプ F を 2ノード使用

ノードリストは次の変数から取得
$PE_HOSTFILE
cut –c 1-6 $PE_HOSTFILE > nodelist

Intel MPI 環境の設定

ノードあたり 4プロセスで 8並列

- OpenMPIでは、

9行目: module load openmpi

10行目: mpirun –npernode 4 –n 8 -x LD_LIBRARY_PATH ./a.out

※ 1ノード 4プロセス (4 GPU)
2ノード 8並列の計算の例

ジョブスクリプトの例(4)

- ハイブリッド並列の例 (Intel MPI)

```
#!/bin/sh
#$ -cwd
#$ -l f_node=2
#$ -l h_rt=0:10:00
#$ -N HyBrid
. /etc/profile.d/modules.sh
module load cuda
module load intel
module load intel-mpi
export OMP_NUM_THREADS=7
mpiexec.hydra -ppn 4 -np 8 ./a.out
```

資源タイプ F を 2ノード使用

Intel MPI 環境の設定

1プロセスに 7スレッドを配置

ノードあたり MPI 4プロセス、
全部で8プロセスを使用する

- OpenMPI だと、

  9行目：module load openmpi

  11行目：mpirun –npernode 4 –n 8 –x LD_LIBRARY_PATH ./a.out

ステップ2: qsubによるジョブ投入

qsub –g [TSUBAMEグループ] ジョブスクリプト名

- [TSUBAMEグループ] は、ジョブスクリプト内ではなく
  qsub –g [TSUBAMEグループ] として指定する。
  – 省略した場合は、お試し実行扱いとなり、2ノード10分まで
    例: $ qsub –g tgx-20IXX ./job.sh

→ 成功すると、

Your job 1234567 ("job.sh") has been submitted

のように表示され、ジョブID(ここでは1234567)が分かる

- 予約ノードへのジョブの投入は qsub –ar 予約番号 とする
  例 : $ qsub -g tgx-20IXX –ar 予約番号 ./job.sh

※) AR : Advance Reservation （実際のジョブの長さは10分間短くすること）

ステップ3: ジョブの状態確認

qstat [オプション]

例: qstat

→ 自分の現在のジョブ情報を表示

```
job-ID     prior   name       user         state submit/start at     queue
jclass                         slots ja-task-ID
-----------------------------------------------------------------------------
    1234567 0.55500 job.sh     touko-t-aa   r     05/03/2019 12:17:41
all.q@r8i2n7
```

ノード名

r は実行中、qw は待機中
Eqw は実行されません。

ジョブステータスが「Eqw」となり実行されない。
https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/node/65

- 主なオプション

オプション	説明
-r	ジョブのリソース情報を表示します。
-j (JOBID)	ジョブに関する追加情報を表示します。

qstat -u “*” : 全てのジョブを表示します。
qacct -j job-ID : ジョブの詳細を表示します。

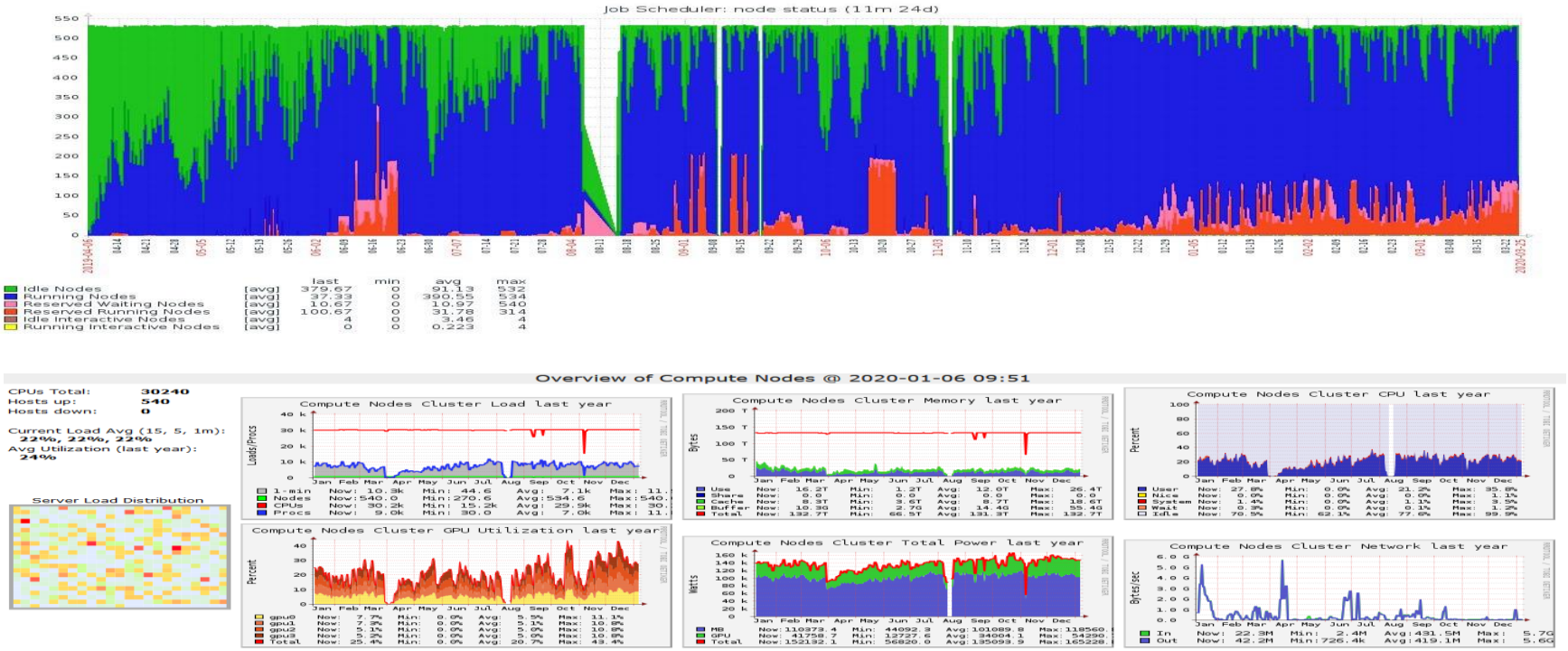
ステップ3: ジョブの状態確認

モニタリング情報

TSUBAME3.0 モニタリングページ　https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/monitoring

・ジョブモニタリング（ジョブの混雑具合 :アイドルノード 実行ノード 予約ノード ）

・マシンモニタリング（各ノードの状況 : http://pm1.t3.gsic.titech.ac.jp/ganglia/）



ステップ4: ジョブを削除するには

qdel [ジョブID]　※ジョブIDは数字のみ

例: qdel 1234567　(前述の Eqw の例など)

※ なんらかの原因でジョブが削除できないときは
　共同利用推進室までご連絡ください。

※ TSUBAMEポイント、グループディスクの利用状況は
t3-user-info コマンドにより知ることができます。

例 : $ t3-user-info group point　　TSUBAMEポイントを表示

例 : $ t3-user-info disk group　　グループディスクの表示

ステップ5: ジョブ結果の確認

- ジョブが(printfなどで)出力した結果は、下記のファイルに格納される
  - 標準出力　　→ [ジョブスクリプト名].o[ジョブID]
  - 標準エラー出力→ [ジョブスクリプト名].e[ジョブID]

  たとえば、job.sh.o1234567 と job.sh.e1234567
- ジョブ投入時に-N [ジョブ名]をつけておくと、
  [ジョブ名].o[ジョブID] となる
- -o [ファイル名], -e [ファイル名] オプションでも指定可
- -j y によりエラー出力を標準出力に書き出す（ファイル1つに）
- -m abe –M <メールアドレス> 結果をメールにて通知する
- qacct –j job–ID ジョブの詳細を表示する

結果ファイルの説明　https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/node/139

計算ノードの予約利用

- 計算ノードを、開始時刻・終了時刻を指定して予約
  - 1時間、1ノード単位からの予約が可能
  - 24時間以上のジョブを予約して利用可能
  - 予約可能資源数 (資源タイプ f_node, h_node, q_node)

	4月～9月（閑散期）	10月～3月（繁忙期）
予約可能最大ノード数	270ノード	135ノード
予約可能時間	168時間（7日間）	96時間（4日間）
最大確保予約枠	12,960ノード時間	6,480ノード時間

  - 予約時期によって課金係数が異なる
    - 5.00 倍　実行開始24時間以内　（直前の予約を防ぐため）
    - 1.25 倍　実行開始14日前～1日前まで　（14日前頃の予約を推奨）
    - 2.50 倍　上記以外の時期（2週間以上前）

・計算ノードの予約　https://helpdesk.t3.gsic.titech.ac.jp/manuals/portal.ja/node_reservation/

・ノード予約について https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/node/162 (キャンセルは24時間前)

・予約後 5分以内にキャンセルすればポイントは全て返却されます。（予約不成立とする）
予約の5分後～開始24時間までは半分。予約開始24時間以内では返却されません。

・予約時の注意：　https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/node/263

・予約状況を調べるには　t3-user-info compute ars コマンドを用いる

データ転送など外部へのアクセス

- TSUBAME3.0 ではログインノードおよび各計算ノードから
  外部のネットワークへ直接アクセスすることができます。
- TSUBAME3.0 にインストールされているソフトウェアでも
  git などを用いて最新版のソースを参照することが可能です。

例１: lammps
```
$ git clone https://github.com/lammps/lammps
```
例２: gromacs
```
$ git clone https://github.com/gromacs/gromacs
```
例３: namd
```
$ git clone https://charm.cs.illinois.edu/gerrit/namd.git
```
例４: 最新の GPU版 TensorFlow をインストールする
```
$ module load cuda python/3.6.5
$ pip install --user tensorflow-gpu
```

- ファイル転送について補足 https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/node/96
- ISVアプリなどでは学外のライセンスサーバーを直接利用可能です。
- 外部からの計算ノードの見え方 https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/node/244

ストレージの利用 (1)

- ホームディレクトリ
  - 各ユーザごとに、25GBまで無料で利用可能

    /home/?/$username
- 高速ストレージ（グループディスク Lustre file system）
  - 課題グループのメンバーでアクセスするストレージ領域

    （必要に応じて共同利用推進室にて割り当てます）
    - 1TB×1か月で 36,000ポイント (10ノード時間 相当)
    - 1TB あたり 2,000,000ファイル のファイル数制限あり
    - 年度末まで一括購入されます（月単位での購入はできません）
  - /gs/hs0/[グループ名] もしくは /gs/hs1/[グループ名]
  - 使用量は lfs quota –g tgx-20IXX /gs/hs0 もしくは

    “ t3-user-info disk {group|home} ” コマンドにて

ストレージの利用 (2)

- ローカルスクラッチ領域
  - ノードごと・ジョブごとに一時利用できる領域
    - /scr スクラッチ ディレクトリ (SSD NVMe 2TB)
    - ジョブ終了時に消える
    - ノードあたり約 1.9TB グループディスクよりも高速
  - ディレクトリ名は、ジョブごとに異なる

  → 環境変数 $TMPDIR 、$T3TMPDIR (MPI用) にて参照する
    - たとえば Cプログラムでは、

      getenv(“TMPDIR”) などでディレクトリ名の文字列を取得
- 共有スクラッチ領域
  - 複数の f_node の領域を共有し1つのジョブで利用可能
  - ジョブ内での共有ストレージ （ジョブ終了時に消える）
  - /beeond ディレクトリ (BeeGFS On Demand) 2ノードで約 3.7TB

    #$ -v USE_BEEOND=1 をジョブスクリプト内に記述する

TSUBAMEポイントについて

・グループ区分: tgh-, tgi-, tgj-（課題ID）

TSUBAME3.0 (成果公開 : h, i)	1口	3,600,000 TSUBAMEポイント	100,000円 （税別）
TSUBAME3.0 （成果非公開 : j ）	1口	3,600,000 TSUBAMEポイント	200,000円 （税別）

１口は1000ノード時間の計算機資源量です。
1000 ノード × 3600 秒 = ノード秒で計算されます。
TSUBAMEポイントを知るには TSUBAMEポータル
もしくは “ t3-user-info group point ” コマンドにて

ポイントの消費式

ジョブ毎の使用ポイント
＝ceil(利用ノード数×資源タイプ係数×優先度係数×
0.7×max(実際の実行時間(秒), 300)＋0.1×指定した実行時間(秒))

資源タイプ	F	H	Q	G	C4	C1
係数	1.00	0.50	0.25	0.20	0.20	0.06

優先度	(デフォルト) -5	-4	-3
係数	1.00	2.00	4.00

グループストレージの使用ポイント
＝利用月数×利用可能容量(TB)×36,000（10ノード時間相当）

※ 課金の詳細につきましては下記をご参照ください。
http://www.somuka.titech.ac.jp/reiki_int/reiki_honbun/x385RG00001339.html#e000000198

関連リンク

ログインノード	login.t3.gsic.titech.ac.jp
共同利用推進室	https://www.gsic.titech.ac.jp/tsubame
共同利用推進室 FAQ	https://www.gsic.titech.ac.jp/kyodou/FAQ
利用講習会資料	https://www.gsic.titech.ac.jp/kyodou/beginners_course
TSUBAME3.0ウェブページ	https://www.t3.gsic.titech.ac.jp
TSUBAME3.0利用 FAQ	https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/faq
TSUBAME3.0利用状況	https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/monitoring
TSUBAME3.0利用ポータル	https://portal.t3.gsic.titech.ac.jp/ptl
TSUBAME3.0利用の手引き	https://helpdesk.t3.gsic.titech.ac.jp/manuals/handbook.ja/
TSUBAMEポータル利用の手引き	https://helpdesk.t3.gsic.titech.ac.jp/manuals/portal.ja/
採択課題一覧	https://www.gsic.titech.ac.jp/node/60
HPCI産業利用	https://www.gsic.titech.ac.jp/hpci-sangyo

Linux基礎	https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/sites/upload/T3_seminar_Linux.pdf
TSUBAME利用法	https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/sites/upload/T3_usage.pdf
GPU入門	https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/sites/upload/TSUBAME3_GPU_Computing_2020_Autum.pdf
並列プログラミング技法	http://www.hpci-office.jp/invite2/documents2/MPI-intermediate181206.pdf
マルチGPUプログラミング	https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/124/20191016-2.pdf

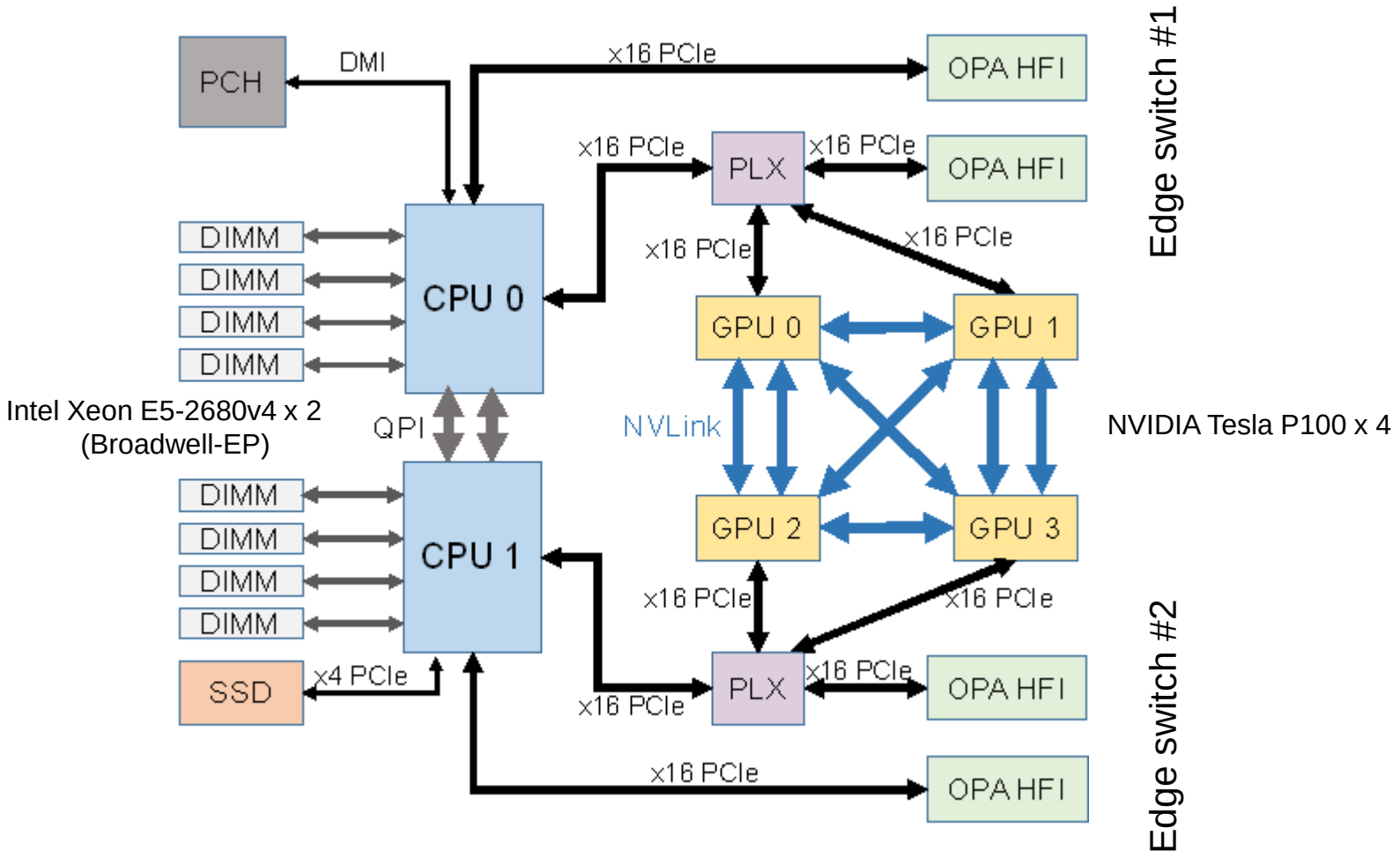
不明なことがありましたら以下のアドレスへ

- 共同利用制度の有償利用の利用者及び、
- HPCI実証利用、トライアルユース利用者は
  課題ID、もしくはユーザーIDを添えて、

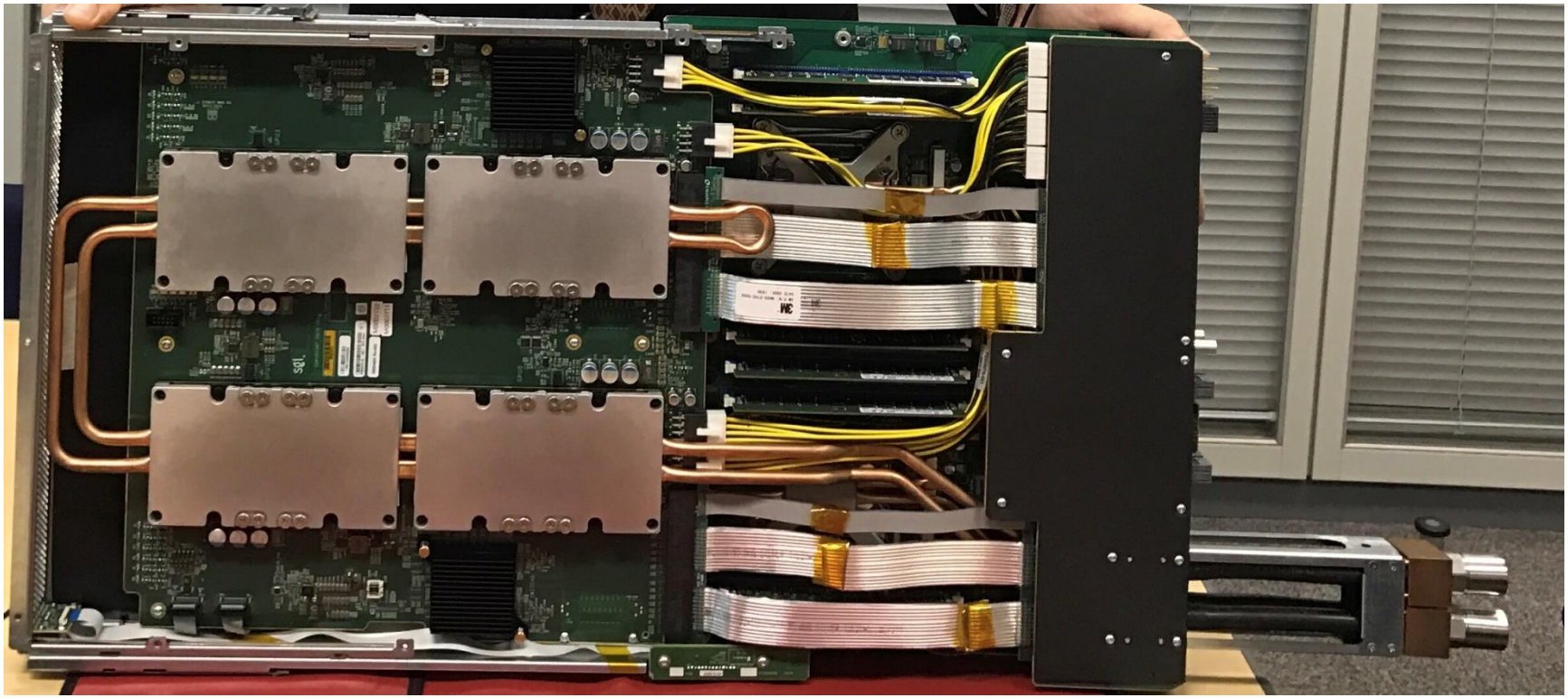
kyoyo@gsic.titech.ac.jp　まで

お気軽にお問い合わせください。

TSUBAME3.0 アーキテクチャ

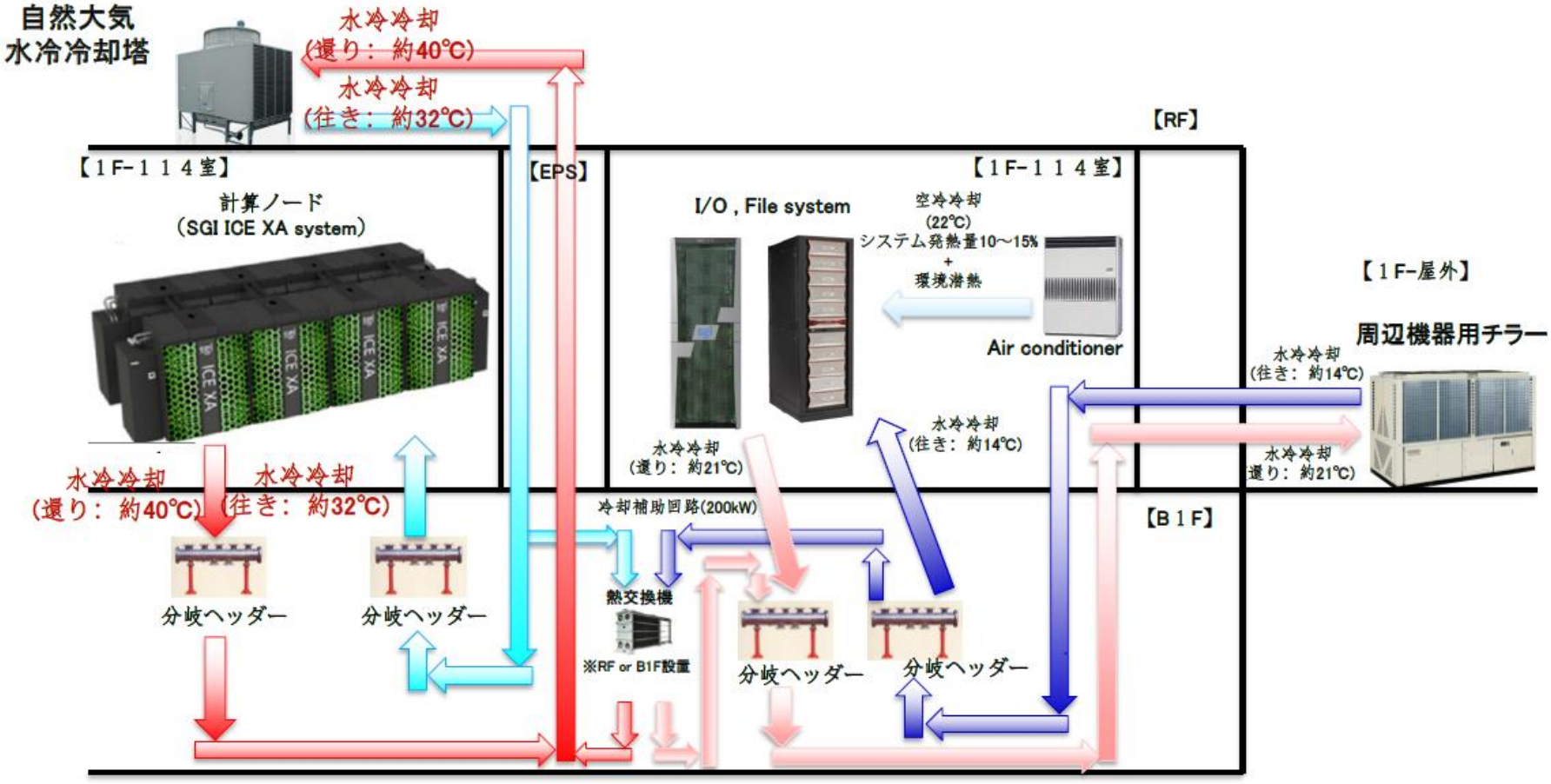


TSUBAME3.0 計算ノード



GPU x 4 (P100)　　CPU x 2 (Xeon 2.4GHz)　　冷却水↑

TSUBAME3.0 冷却システム系統図
32度の自然大気冷却水による高効率高温冷却




ICE XA
ICE XA