

Q&A of Users meeting on July 31 2017

abbreviation

GW: HOKUSAI GreatWall

BW: HOKUSAI BigWaterfall

Q1) Does user have to avoid overlapping of the research proposals between the existing General Use project of GW and the newly applying General Use project of BW?

A1) If user has the General Use project of GW in FY2017 (G17***), the application of BW will be added to the project. In this case, the project number need to be written in the application form. There seems to be many overlap of research proposals between GW and BW, but user should explain the differences of the purpose and methods of computation as clearly as possible.

Q2) Which version of Gaussian will be available on GW-MPC and BW-MPC?

A2) After the maintenance scheduled in the beginning of September, Gaussian16(G16) will be available on GW-ACSG/L. Gaussian09(G09) will be also available without official support of Gaussian Inc.

At the same time, G09 and G16 will be available on GW-MPC.

On BW-MPC G16 will be available on the only fixed 56 nodes installed RHEL . On the other nodes installed CentOS, G16 will be also available without official support of Gaussian Inc. G09 will be also available without official support of Gaussian Inc.

Q3) Does ACCC have any idea of the application for FY2018 projects?

A3) Currently, we do not decide the application of the next year. As the future direction, users will apply for the computation resources for each subsystem of GW and BW. If the total applied computational resources of GW-MPC and BW-MPC differ largely, we would like to adjust the computational resources for the projects that can use either system without problems.

Q4) Is new General Use project to use GW-MPC unacceptable of the 2nd project review of FY2017?

A4) Yes.

Q5) Is there any solution to run large-scale jobs on GW-MPC by Quick Use project?

A5) ACCC can permit to change the upper limit of the number of parallelization by

Quick Use project if they need. If you have such a demand, you should request as early as you can because we have to schedule executing of targeting jobs appropriately.

Q6) How will the condition of job execution (ex. the maximum number of the parallelization) be planned to set?

A6) For General Use project, the maximum number of parallelization is 5,120 cores (128 nodes).

Q7) Can the entire systems (GW and BW) be operated from the front-end server, hokusai.riken.jp, after the regular operation of BW starts?

A7) Yes. The old front-end system of GW will be operated only for specific purposes.

Q8) Is there any plan to provide training classes for beginners?

A8) Information Systems Division is able to provide instructions or consultations for beginners on demanded. If you need them, please request by email.

Q9) Which performance profiler will be available on BW?

A9) Intel Vtune Amplifier will be available.

Q10) Is there any plan to install accelerators for Deep Learning?

A10) We are having a plan to have ACSG operated as a GPU dedicated server. We are also considering to install software frameworks for Deep Learning. But it is difficult to support continuously because those frameworks update so frequently.

Q11) Is Hyper-Threading available on BW?

A11) Hyper-Threading is not available on BW in the operation starting from October. We should be considering about Hyper-Threading when the performance gain will be cleared because we can't switch (On/ Off) Hyper-Threading flexibly.

7月31日 スーパーコンピュータ利用者説明会 Q&A

略称補足

GW: HOKUSAI GreatWall

BW: HOKUSAI BigWaterfall

質問1 BWの課題申請は既存のGWの課題との重複を避けるよう意識する必要はあるか。

回答1 GWで一般利用されている場合、BWの課題申請は追加ということになる。その場合、申請書にGWでの課題番号を記述していただく。研究内容は重複するところが多いと思われるが、計算内容などの相違点を記述して頂きたい。

質問2 Gaussianは、GW-MPCやBW-MPCでどのバージョンが利用可能か。

回答2 GW-ACSG/Lについては、9月初めのメンテナンス以降、Gaussian16(G16)が利用可能になり、Gaussian09(G09)はガウシアン社によるオフィシャルなサポート外という条件で引き続き利用可能となる。

GW-MPCについては、同様に9月初めのメンテナンス以降、G09とG16が利用可能となる。

BW-MPCについては、G16が特定の56ノード(OSがRHEL)で利用可能となり、それ以外のノードのOSはCentOSなのでオフィシャルなサポート外で利用可能です。G09はオフィシャルなサポート外で利用可能となる。

質問3 来年度(2018年度)の課題申請はどうなるみこみか。

回答3 現時点で何も決まっていないが、方向性としてGW、BWのサブシステム毎の計算時間を申請していただく予定です。GW-MPCとBW-MPCで全申請量が異なる場合は、どちらでも問題なく使える課題を対象として計算時間の調整を行いたいと考えている。

質問4 今年度下半期はGW-MPCの一般利用は受け付けないということで間違いないか。

回答4 はい。

質問5 自分のプロジェクトで年度内にGW-MPCで簡易利用での並列度を超えるような大規模実行に使いたいと考えているがどうすればよいか。

回答5 簡易利用で並列数上限の変更などは必要があれば相談に応じる。実施時期を適切に決めたいのでなるべく早めにメールで相談して欲しい。

質問6 BWのジョブ実行の条件(例えば最大並列数)はどうなるのか。

回答6 一般利用での BW-MPC での最大並列数は、5,120 コア(128 ノード)である。

質問7 BW 運用開始後フロントエンド (hokusai.riken.jp) にログインすると全システム (GW と BW 両方)が利用できるのか。

回答7 できる。GW のログインノードは特殊用途用としてログインして使えるように残す。

質問8 初心者向け講習会を実施してほしい

回答8 初歩的なインストラクションについては個別に時間を設けて対応させていただいているので、要望があればメールで連絡を欲しい。

質問9 BW にはプロファイラはどういうものが入るか。

回答9 Intel Vtune Amplifier が利用できる。

質問10 ディープラーニング用のアクセラレータなどの導入の予定はないか。

回答10 ACSG は GPU 専用サーバにすることも検討している。フレームワークの導入も検討はしているが、更新頻度が速いためどのようなサポートを継続的にできるかがネックだと考えている。

質問11 BW でハイパースレッディングは使えるか。

回答11 10月からの運用では OFF にする。フレキシブルな ON/OFF はできないので、パフォーマンス向上の具体的な見込みなどがたった時点でまた相談させてほしい。