

RICC運用状況報告 理研シンポジウム 2012年10月12日

理化学研究所
情報基盤センター

野田 茂穂
shigeho@riken.jp

All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

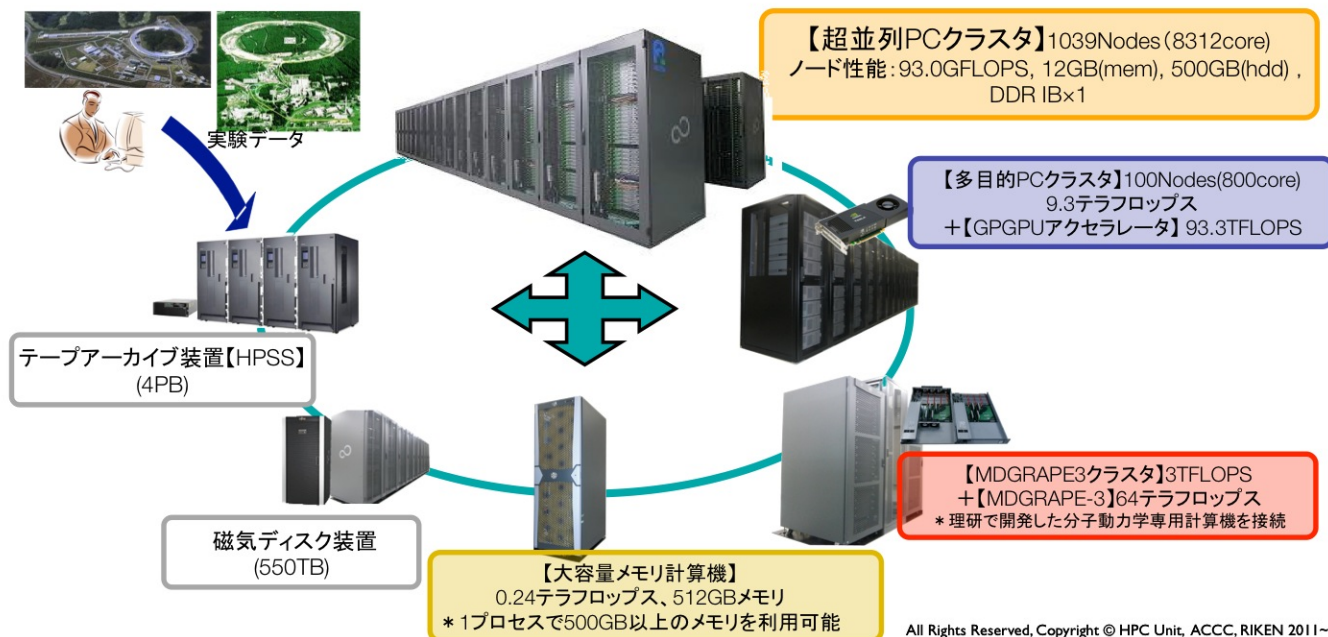
RICCの紹介と運用状況

All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

RICCの概要

【システム構成】

超並列PCクラスタ+GPUクラスタ+専用機クラスタ+大容量メモリ計算機



アプリケーション一覧

Name	ricc	mpc	upc	mdg	ax	Install directory
ADF						

インストールされているアプリ/ライブラリ

Name	ricc	mpc	upc	mdg	ax	Install Directory
ADF			○			/usr/local/adt2009.01
AMBER 8				○		/usr/local/amber8
AMBER 10			○			/usr/local/amber10
AMBER 11			○			/usr/local/amber11
ANSYS	○		○			/usr/local/ansys
DALTON		○	○			/usr/local/dalton
DMol3		○				/usr/local/dmol3
GAMESS		○	○			/usr/local/gamess
Gaussian03			○			/usr/local/gaussian/g03_E01
Gaussian03NBO			○			/usr/local/gaussian/nbo/g03_E01
Gaussian09			○			/usr/local/gaussian/g09_A.02
GaussView	○					/usr/local/gaussian/gv
IMSL	○	○	○			/opt/vni/imsi/fni600/Inxin100e64
IMSL	○	○	○			/opt/vni/imsi/fni600/Inxin110e64
GSL	○	○	○	○		/usr/local/gsl
GSL	○	○	○	○	○	/usr/local/gsl
FFTWT3	○	○	○	○	○	/usr/local/fftwt3
FFTWT2	○	○	○	○	○	/usr/local/fftwt2
FFTWT2-MPI	○	○	○	○	○	/usr/local/fftwt2-mpi
HDF5	○	○	○	○	○	/usr/local/hdf5
ATLAS	○	○	○	○		/usr/local/atlas-3.8.3
Harminv		○	○			/usr/local/harminv
libctf		○	○			/usr/local/libctf
Xerces-C++	○	○	○	○		/usr/local/xerces-c
libxml2	○	○	○	○		/usr/local/libxml2

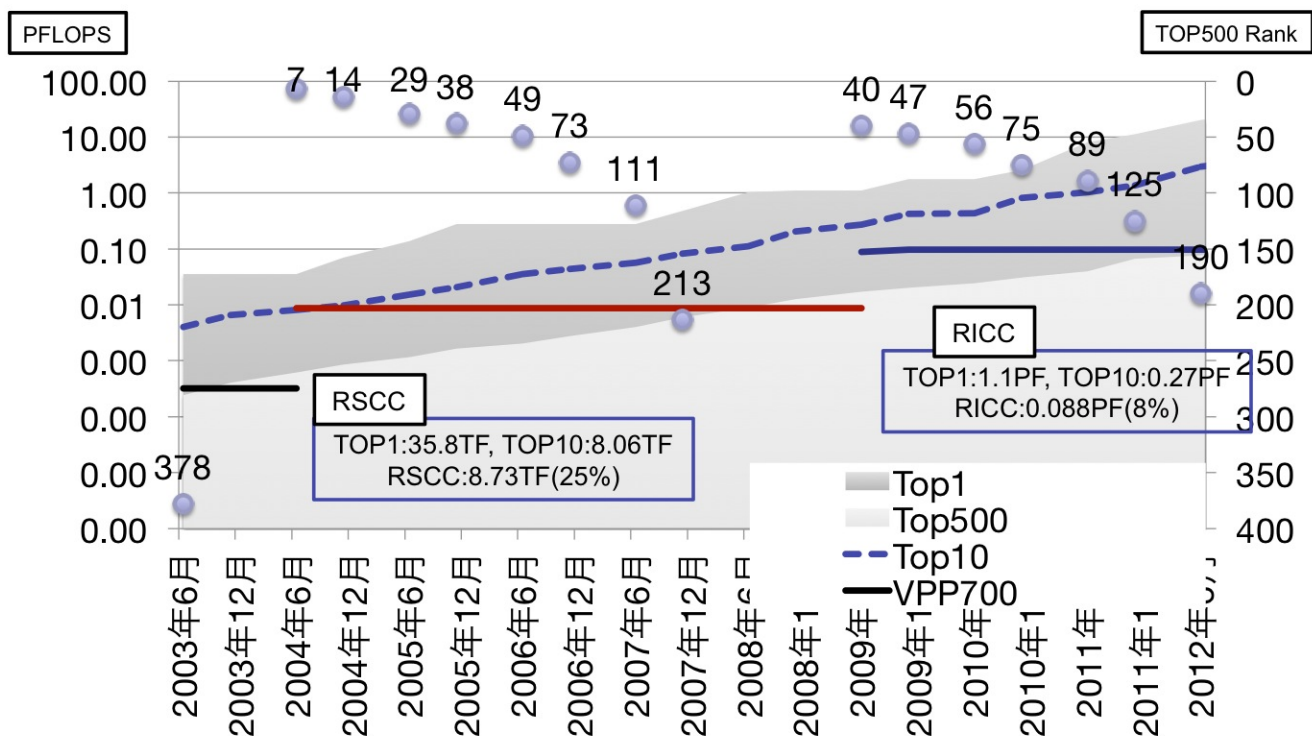
RICCポータル

<https://ricc.riken.jp>

Python-2.4 ライブラリ

Name	ricc	mpc	upc	mdg	ax	Install Directory
nose	○	○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages
numpy	○	○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages
scipy	○	○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages
Rodis		○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages
mpi4py	○	○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages
Matplotlib(PyLa b)	○	○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages
pytz	○	○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages
dateutil	○	○	○	○		/usr/lib64/python2.4/site-packages

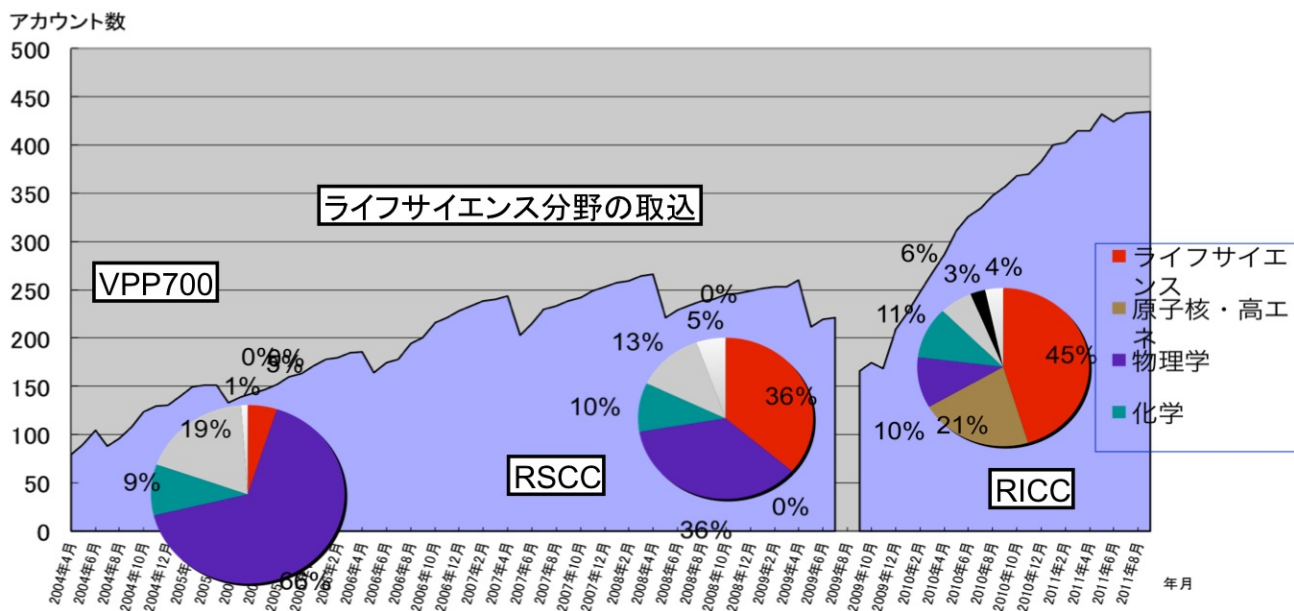
RIKENスパコンとTOP500

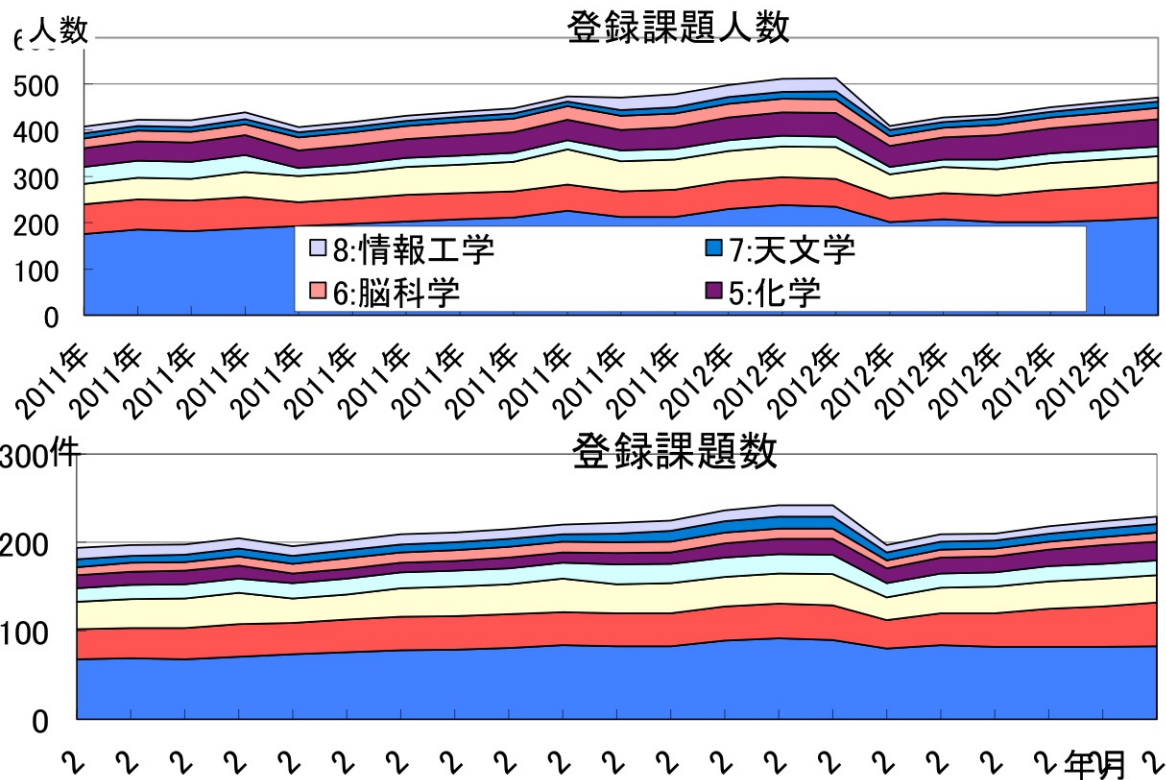


All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

理化学研究所 情報基盤センター

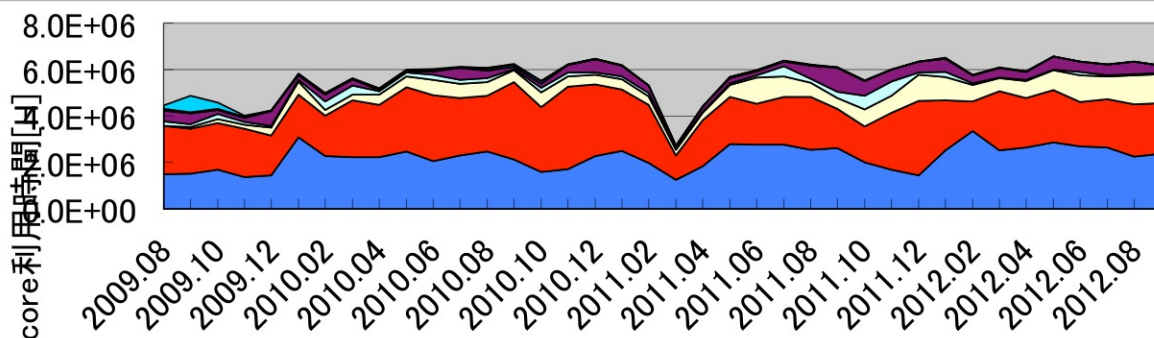
RIKENスパコンの状況(ユーザ数)



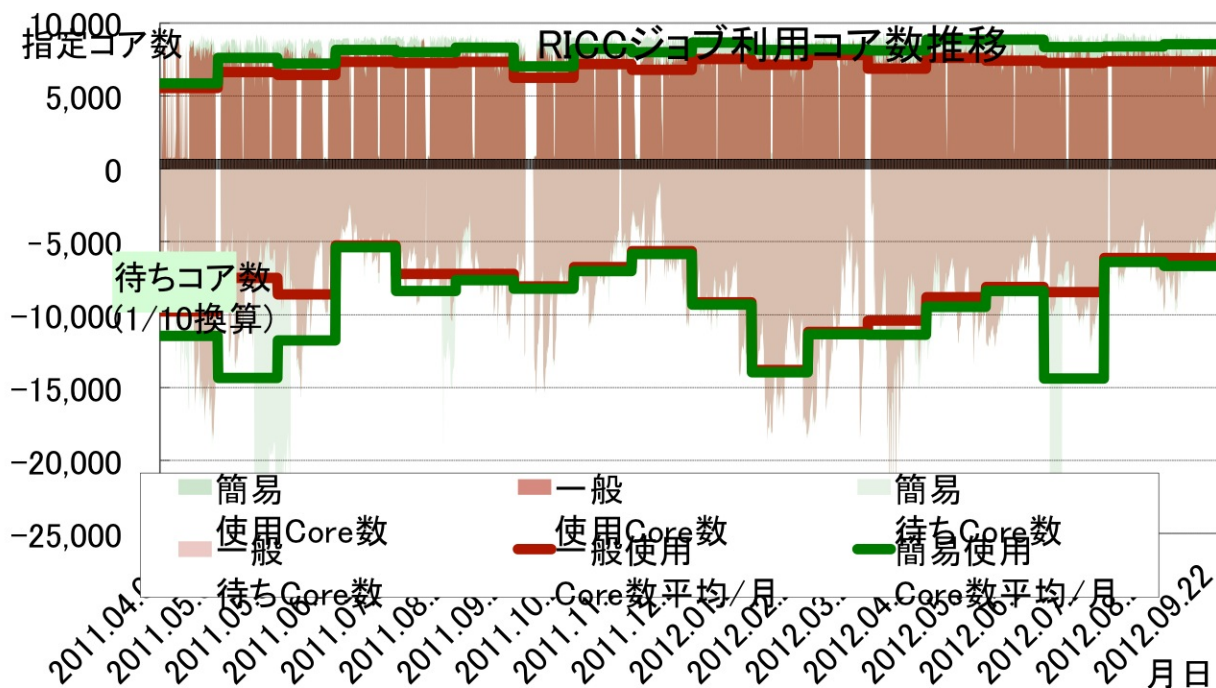


All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

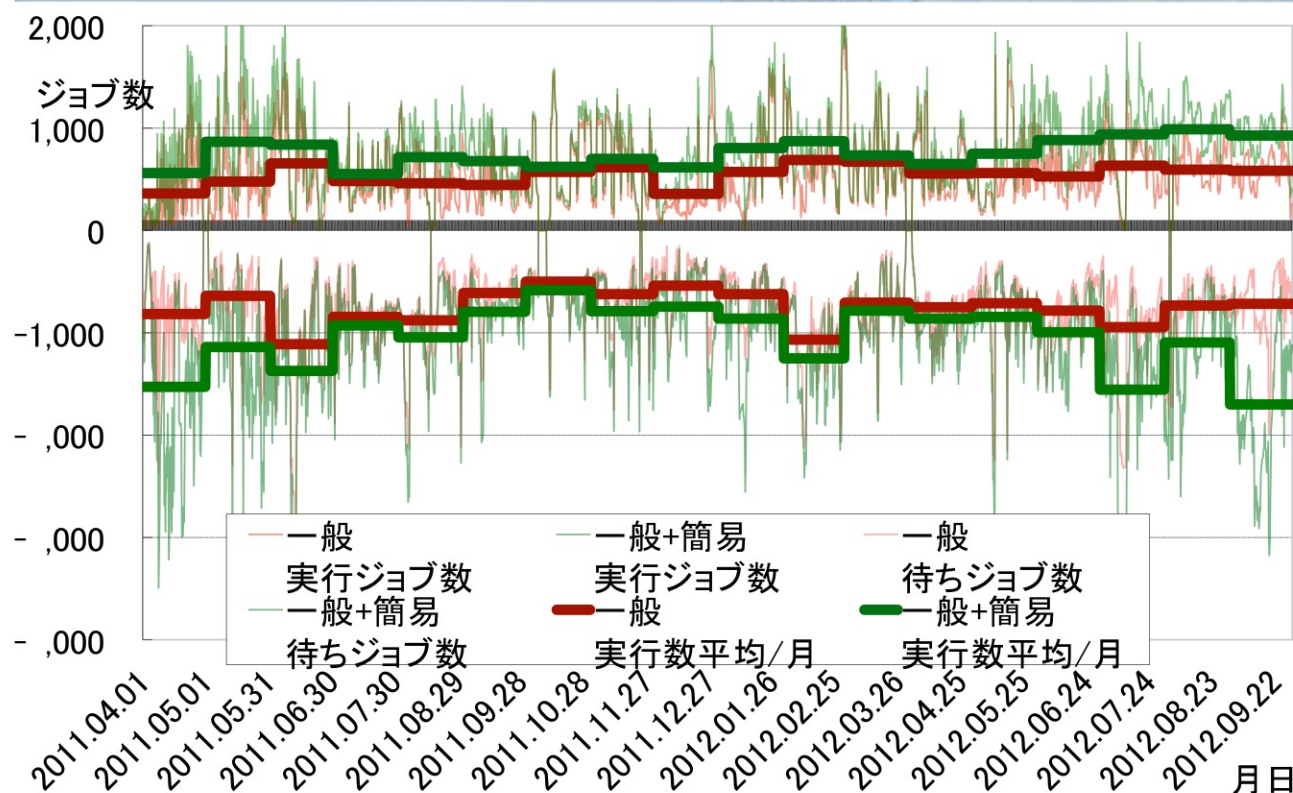
分野毎利用統計 (時間、割合)



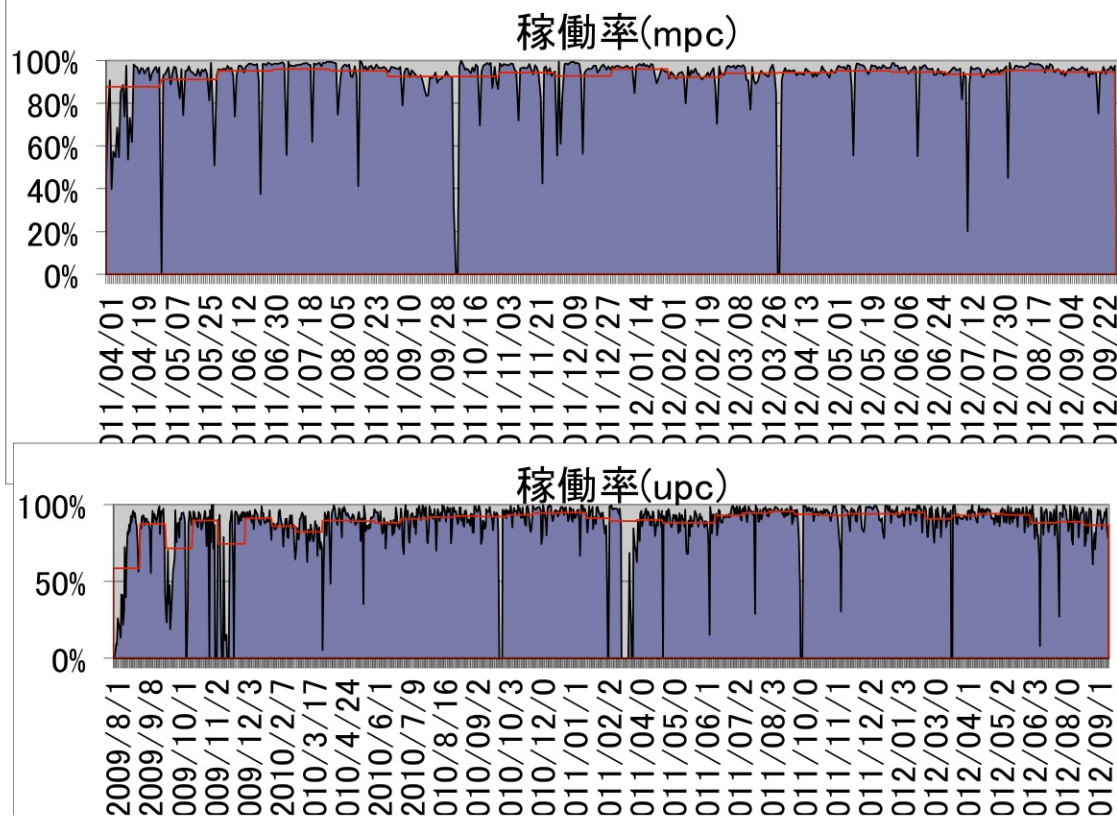
All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~



All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

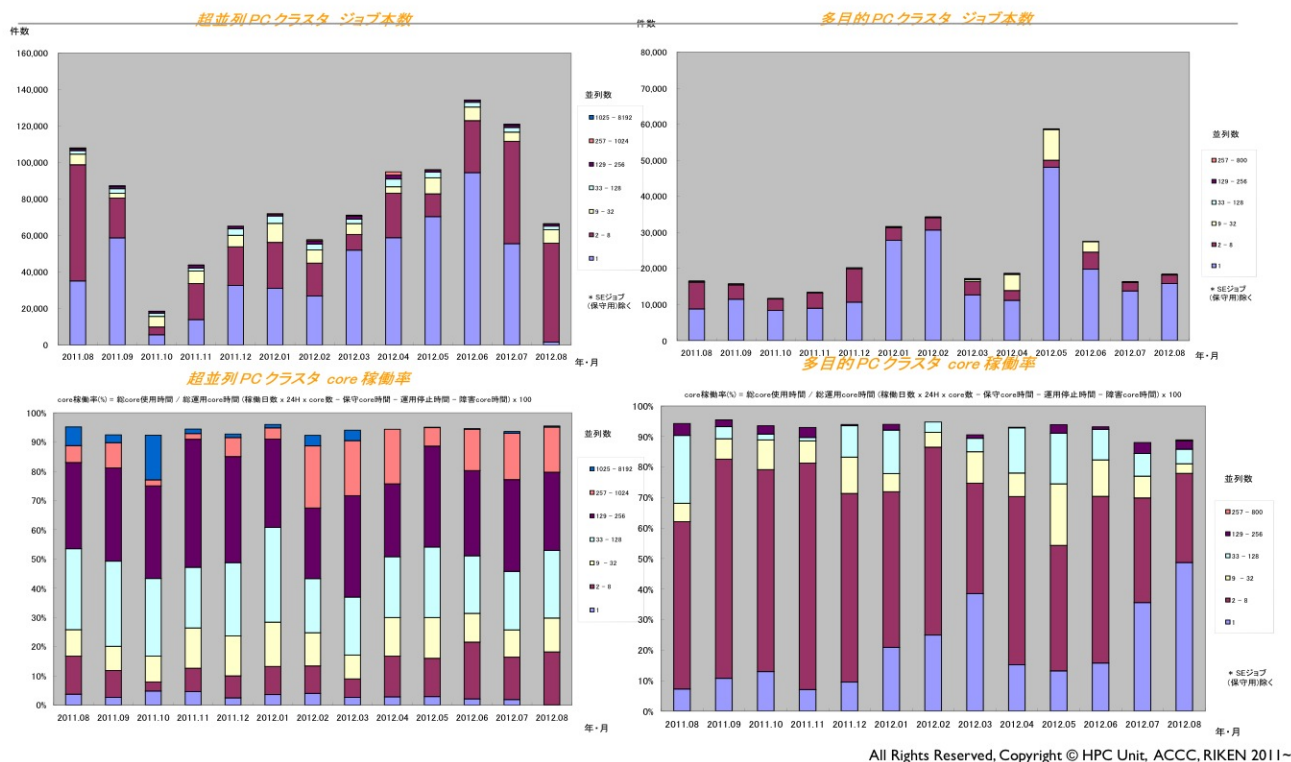


All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~



情報基盤センター取り組みについて

PCクラスタ利用の分析

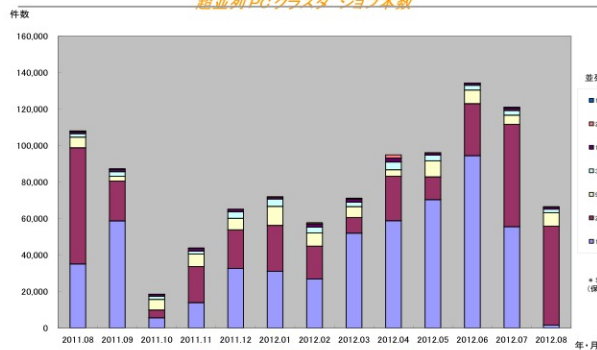


非並列ジョブの取扱い

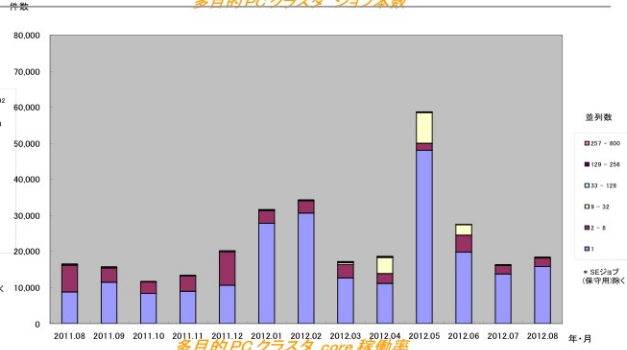
- 並列計算機での非並列ジョブが演算量は小さいがリクエスト数が多い
- 非並列ジョブを並列計算機から排除
→非並列用計算機導入 (2012年4月～)
- Total : 22node, 264core
- Node : 12core/node, 4GBmemory/core, 700GB HDD 100GB SSD

PCクラスタ利用の分析

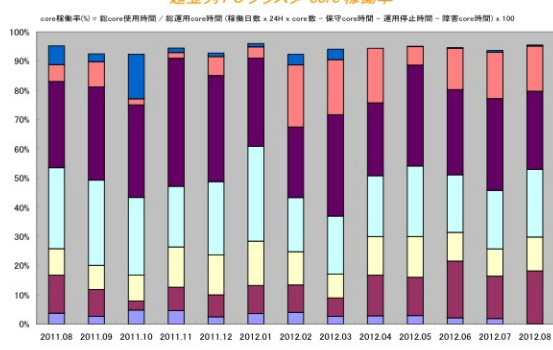
超並列PCクラスタ ジョブ本数



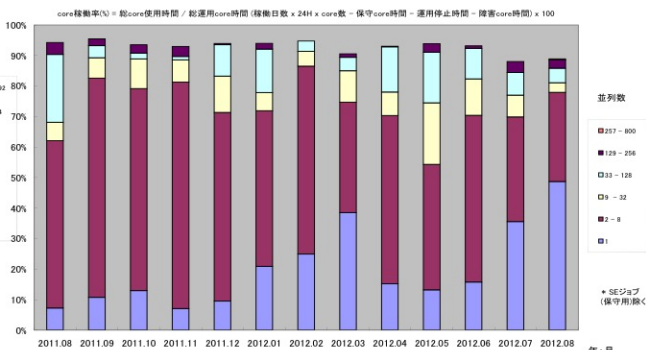
多目的PCクラスタ ジョブ本数



超並列PCクラスタ core稼働率

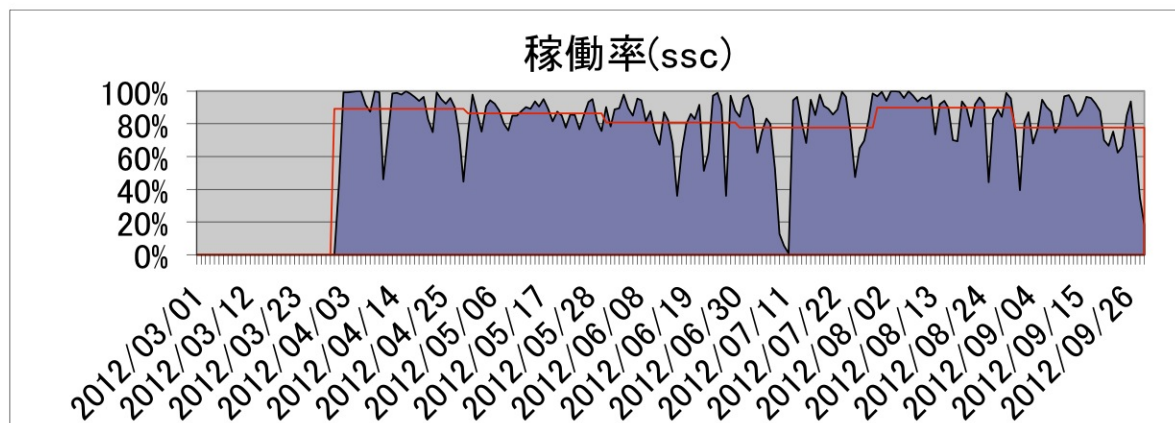
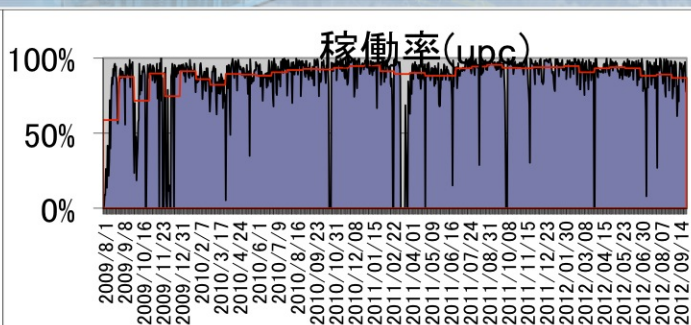
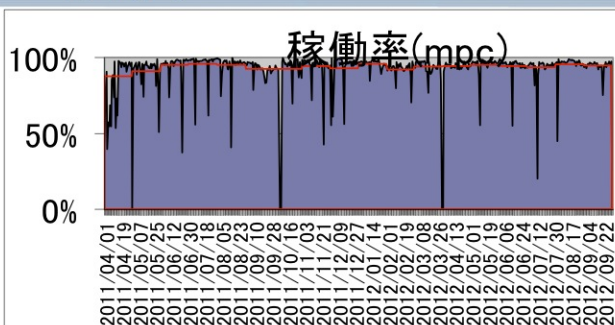


多目的PCクラスタ core稼働率



All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

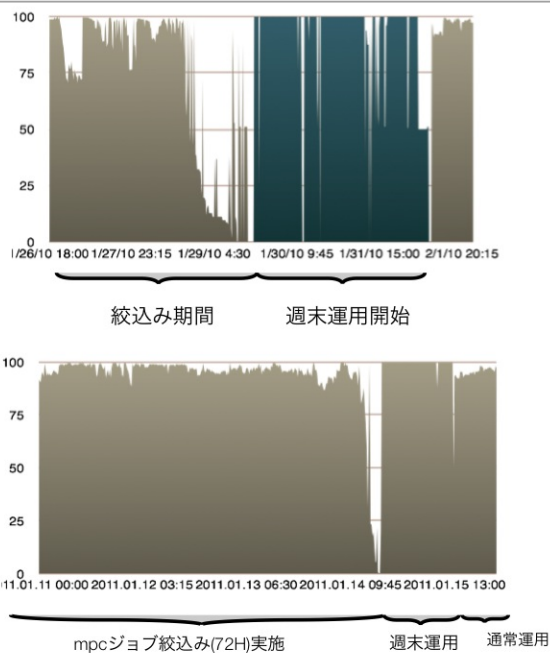
稼働率



All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

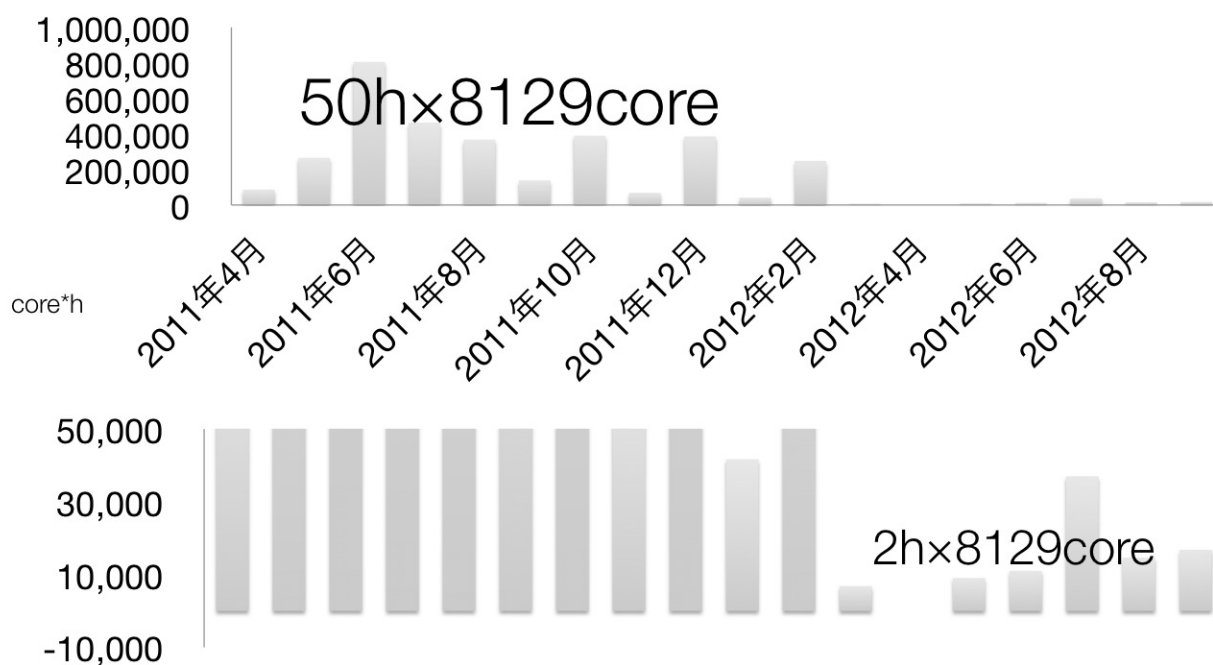
大規模並列ジョブのための週末運用

- 常時高並列ジョブがサブミットできるが
高い稼働率のため現実的に通常運用中の
実行は困難
 - 大規模並列ジョブをまとめて実行する
日を設ける
- 利用区分に関わらずどの課題でも参加で
きる
 - 目的：高並列なプログラム開発やチュ
ーニング
- 2010年1月から開始（1～2回/月の
ペース）



All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

週末特別運用の利用状況



All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

データデポジトリシステム (d2s) d2s.riken.jp

-概要:

- ・ 大量の実験データが生成され、ストレージ容量が不足
- ・ HPSSを利用するには複数のコマンド実行が必要

-Total Data Size Tape 800TB, Cache Disc 62TB

-User : 20TB使える (それ以上は相談)

-グループ共有機能、公開機能 (イントラネットの中)

All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

利用者アクセスイメージ

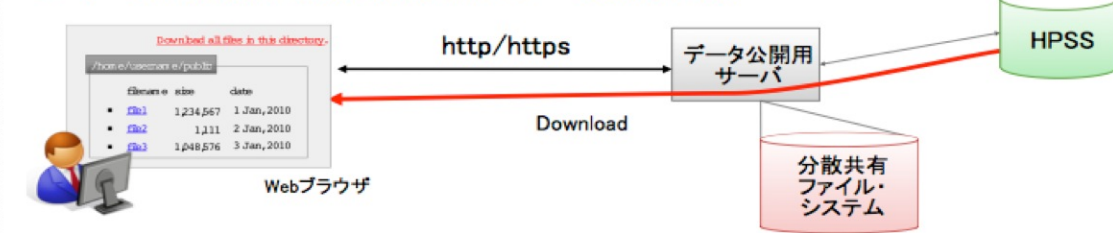
① データ操作・転送

- GUIによる簡易操作、ファイル転送が可能



② 公開データDownload

- データ公開機能により、研究者間でデータ共有が可能

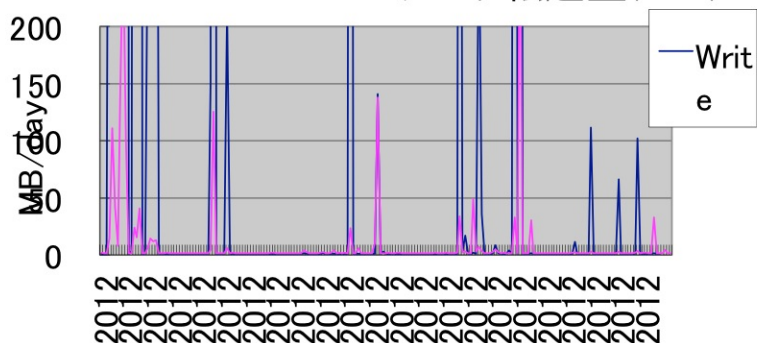


All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

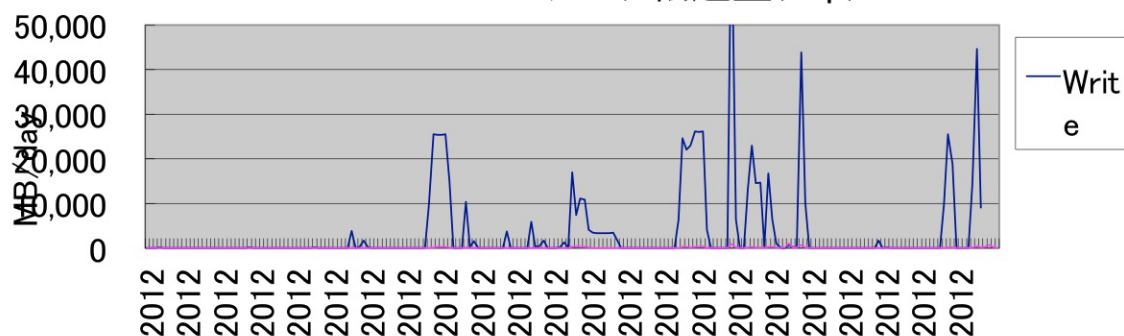
データ転送量

- GUI利用とコマンドライン利用
- コマンドラインからの利用が主

D2S データ転送量(web)



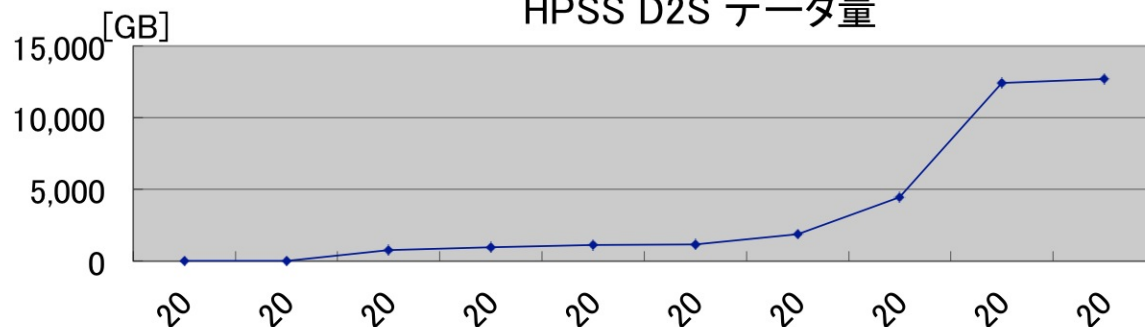
D2S データ転送量(scp)



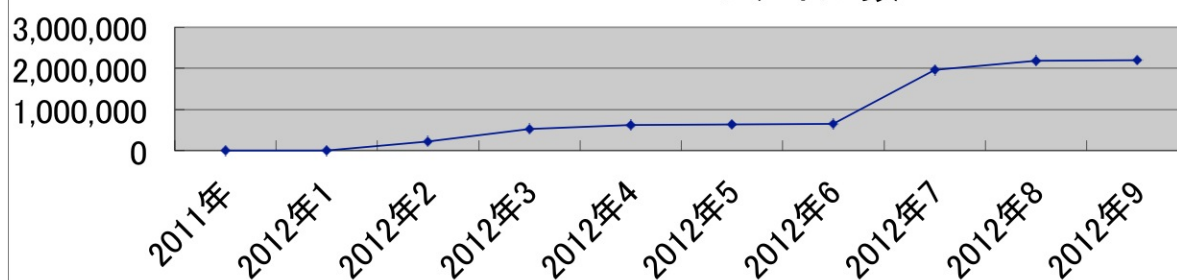
All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

格納データ量

HPSS D2S データ量



HPSS D2S ファイル数



All Rights Reserved, Copyright © HPC Unit, ACCC, RIKEN 2011~

まとめ

- D2Sに理研外部とのデータ共有の要望が来ている。

- ご意見、ご要望等：hpc@riken.jp