



筑波大学計算科学研究センター CCS HPCサマーセミナー 「Pegasusの利用法」

建部修見

tatebe@cs.tsukuba.ac.jp

計算科学研究センター



Pegasusシステム

- 2023年4月より運用開始
- 筑波大学計算科学研究センターが管理・運用
- 8.1 PFLOPS、ストレージ 7.1 PB
- 150ノード
 - 2.1GHz 48c Xeon Platinum 3.2 TFlops
 - H100 GPU (80GB HBM2e) 51 TFlops
 - 128 GiB DDR5メモリ
 - 2 TiB Optane不揮発性メモリ
 - 6 TB NVMe SSD (7 GB/s)
- ノード間ネットワーク IB NDR200 200 Gbps
 - フルバイセクション



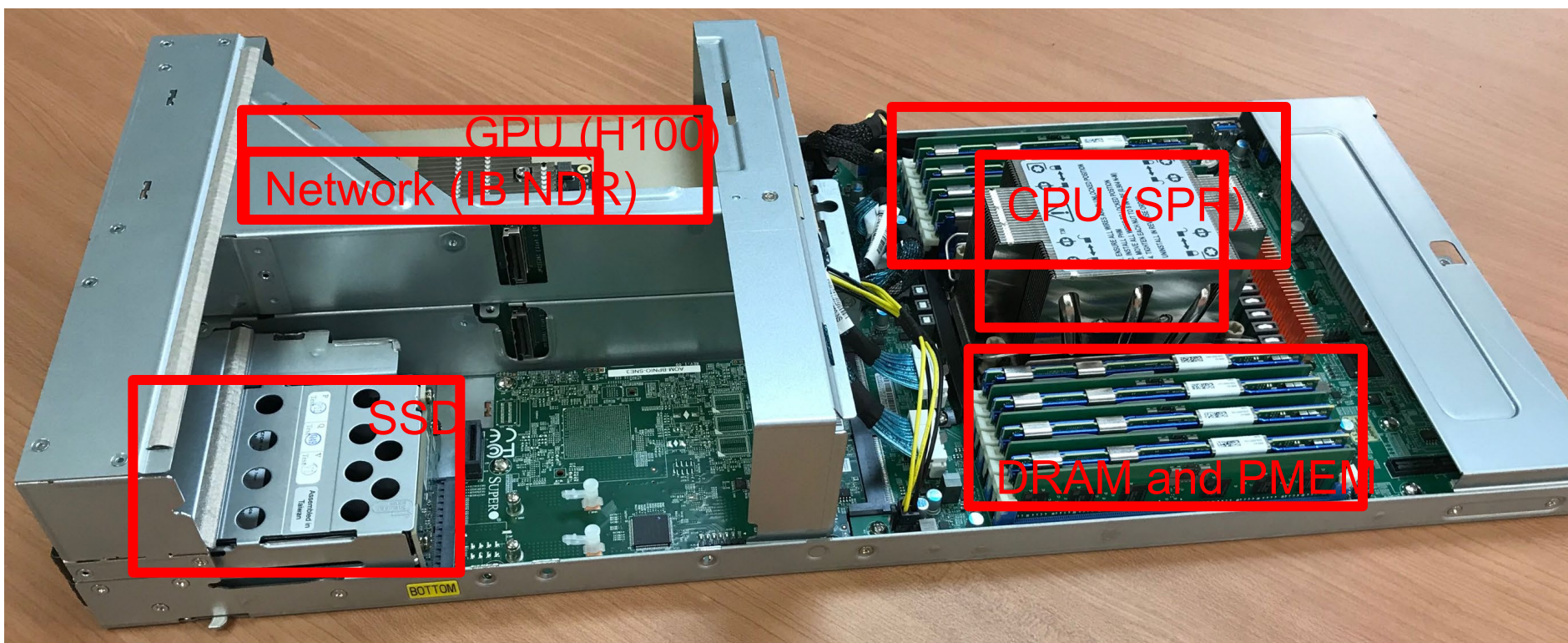
Pegasusシステム全体



設置場所：筑波大学計算科学研究センター・計算機別棟



計算ノード(ブレード)





Pegasusシステムのソフトウェア

- ソフトウェア環境
 - OS: Ubuntu 22.04
 - コンパイラ: GCC, NVHPC, Intel
 - MPI: Open MPI, Intel MPI
 - ライブラリ: Intel MKL, cuDNN, NCCL
 - ジョブ管理: NEC NQSV



ストレージ

- ホーム領域 (Lustre)
 - /home/EDU1/<ユーザ名>
 - 基本あまり使わない
- ワーク領域 (Lustre)
 - **/work/EDU1/<ユーザ名>**
 - 計算に必要なファイル、実行ファイル
- スクラッチ領域 (計算ノード内)
 - /pmem [不揮発性メモリ領域]
 - /scr [NVMe SSD]



MPIプログラムのコンパイル

- MPI

- % module load openmpi/5.0.7/gcc11.4.0-cuda12.8.1

- # GCC

- % module load openmpi/nvhpc-hpcx-cuda12/25.1

- # NVHPC

- % module load intmpi/2025.0.1

- # Intel

- コンパイラドライバ

- mpicc, mpicxx, mpif77, mpif90

- 利用の手引き

- <https://www2.ccs.tsukuba.ac.jp/ccs-sc/>



利用可能キュー

- バッチキュー
 - edu-1 1ノードジョブ最大1時間
 - edu-2 2ノードジョブ最大30分
 - edu-4 4ノードまでのジョブ最大15分
 - edu-8 8ノードまでのジョブ最大7.5分
- 会話キュー
 - debug 2ノードまで最大1時間



Pure MPIのバッチスクリプト

```
#!/bin/bash
#PBS -A EDU1
#PBS -q edu-2
#PBS -b 2
#PBS -l elapstim_req=00:30:00
#PBS -T openmpi
#PBS -v NQSV_MPI_VER=5.0.7/gcc11.4.0-cuda12.8.1

module load openmpi/$NQSV_MPI_VER
cd ${PBS_O_WORKDIR}

mpirun ${NQSV_MPI_OPTS} -np 96 -npernode 48 ./prog
```



MPI+OpenMP (各ノード1プロセス48スレッド)

```
#!/bin/bash
#PBS -A EDU1
#PBS -q edu-2
#PBS -b 2
#PBS -l elapstim_req=00:30:00
#PBS -T openmpi
#PBS -v NQSV_MPI_VER=5.0.7/gcc11.4.0-cuda12.8.1

module load openmpi/$NQSV_MPI_VER
cd ${PBS_O_WORKDIR}

mpirun ${NQSV_MPI_OPTS} -np 2 -npernode 1 --bind-to none ./prog
```



ジョブの投入

qsub スクリプト

qstat

sstat

qdel ジョブID

qlogin -A EDU1 -q debug 会話リクエスト投入

ジョブの投入

投入したリクエストの確認

実行開始時間の確認

ジョブの削除