

# *Суперкомпьютерный комплекс МГУ: "Ломоносов"*



## *Кластеры и суперкомпьютеры*

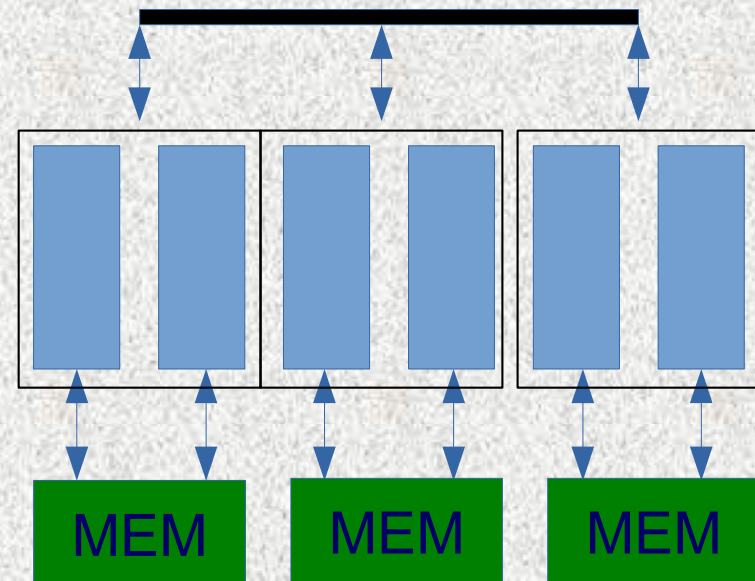
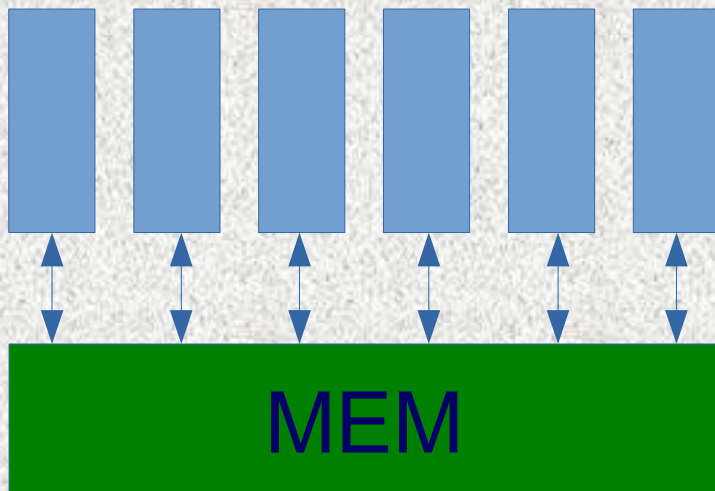
Кластер:

- Распределённая память
- Не привязан к производителю

Альтернативы:

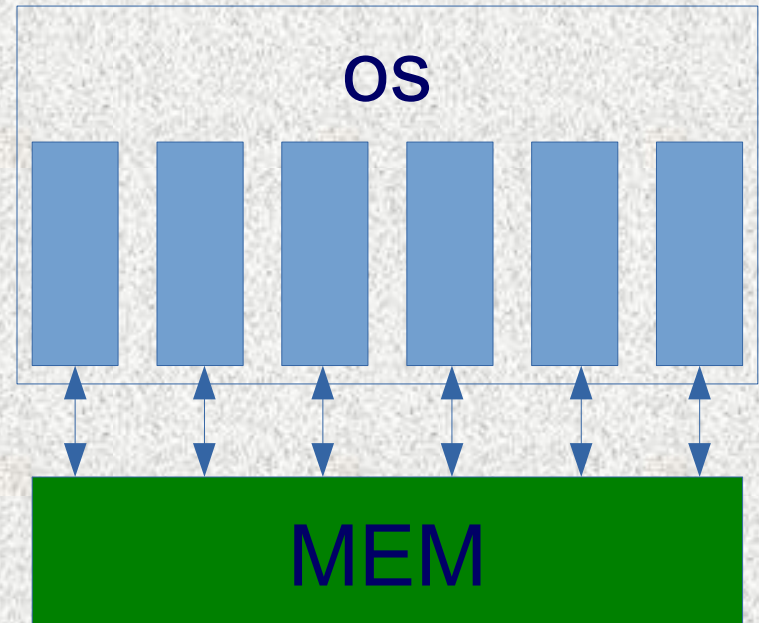
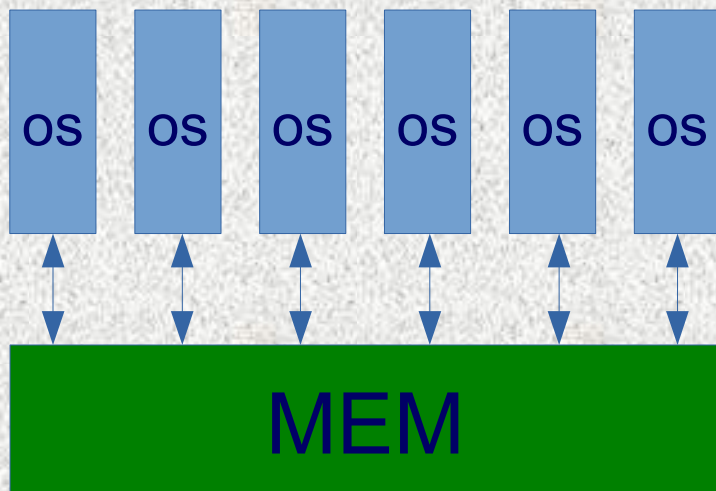
- Общая память
- «Кластерная архитектура»

## Общая память



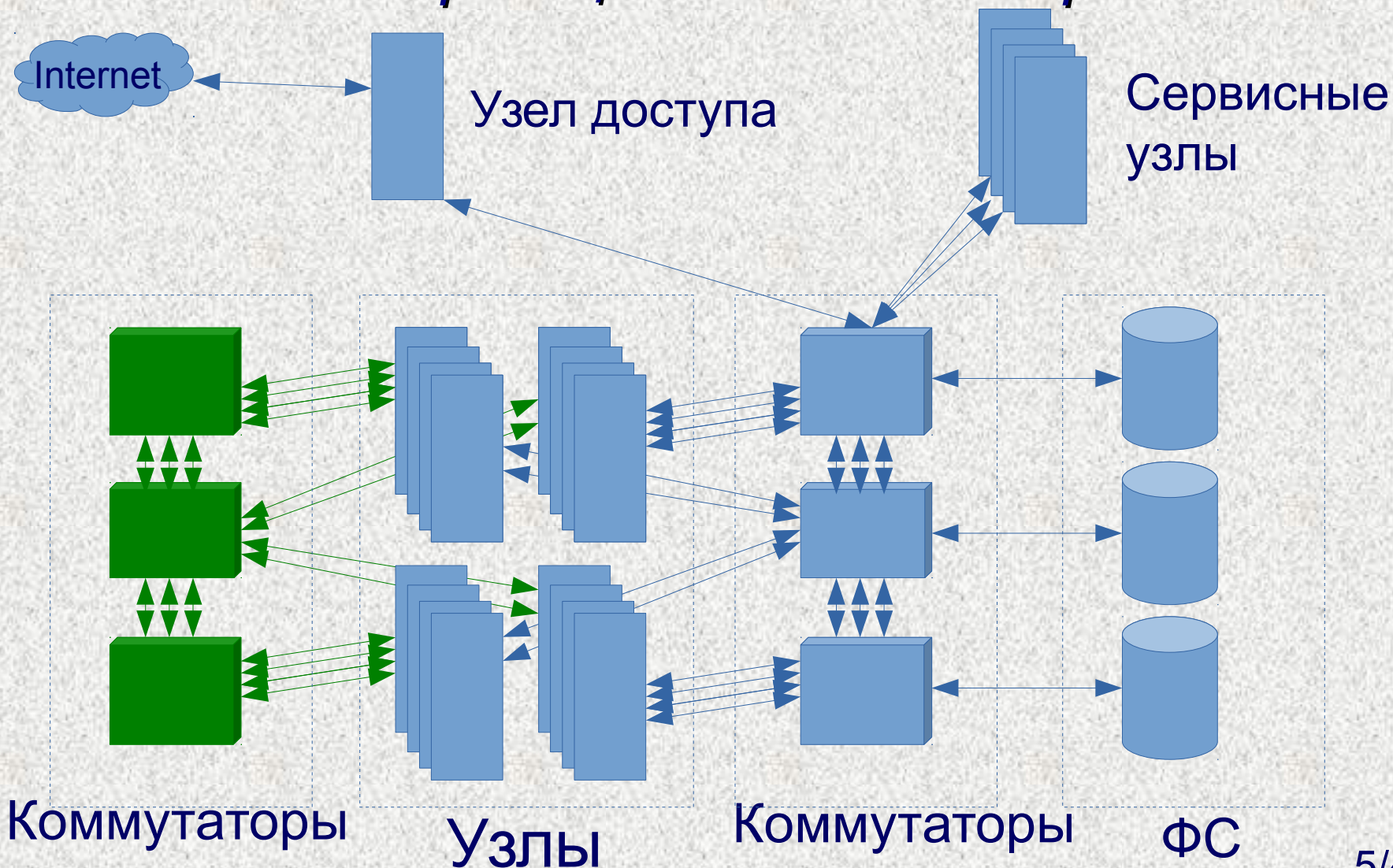


# *Операционная система*





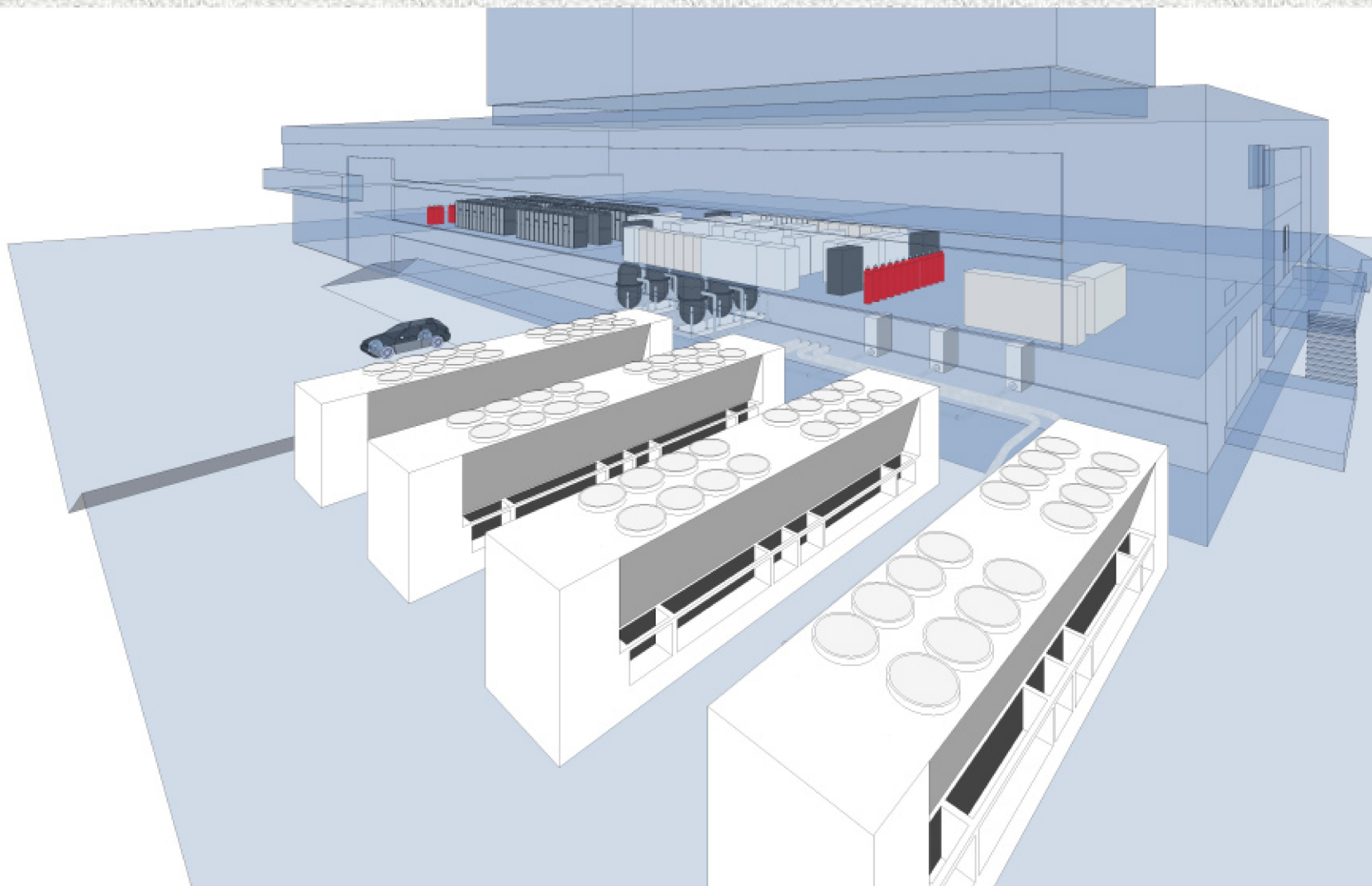
## «Традиционный» кластер



# Суперкомпьютер «Ломоносов», 2015 год

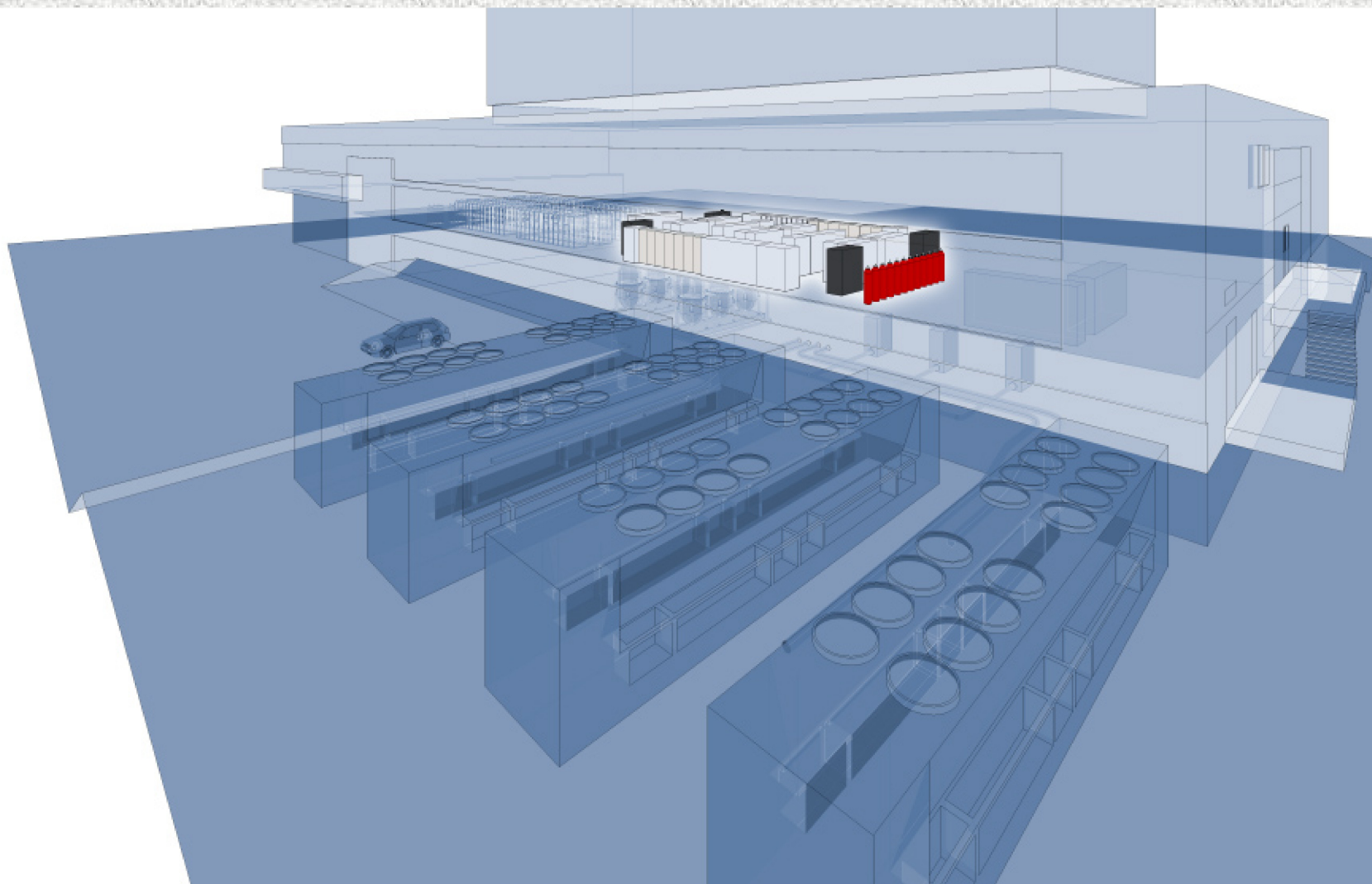
|                                  |                              |      |
|----------------------------------|------------------------------|------|
| Пиковая производительность       | 1700.21 TFlop/s              |      |
| Производительность (Linpack)     | 901.90 TFlop/s               |      |
| Эффективность                    | 53%                          |      |
| Вычислительных узлов (Intel)     | 5 104                        |      |
| Вычислительных узлов (ГПУ)       | 1 065                        |      |
| Процессоры Intel Xeon 5570, 5670 | 12 346                       |      |
| NVIDIA Tesla X2070               | 2 130                        |      |
| Число процессорных ядер (x86)    | 52 168                       |      |
| Число процессорных ядер (ГПУ)    | 954 240                      |      |
| Оперативная память               | 92 ТБайт                     |      |
| Коммуникационная сеть            | QDR Infiniband / 10 GE       |      |
| Система хранения данных          | 1.75 ПБайт, Lustre, NFS, ... |      |
| Операционная система             | Clusrtx T-Platforms Edition  |      |
| Занимаемая площадь (вычислитель) | 252 м <sup>2</sup>           |      |
| Энергопотребление (вычислитель)  | 2.8 МВт                      | 6/48 |

# Суперкомпьютер «Ломоносов»

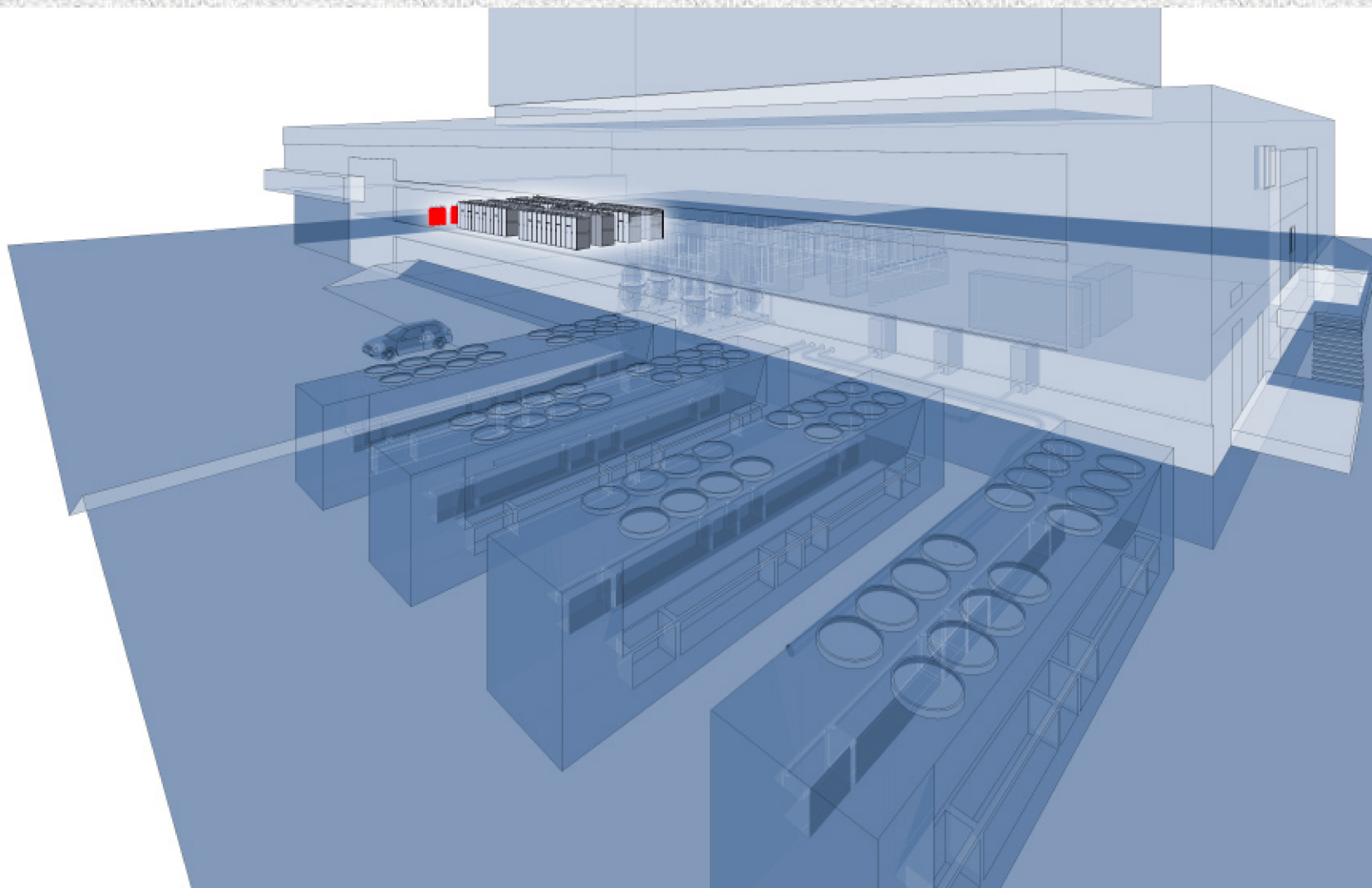


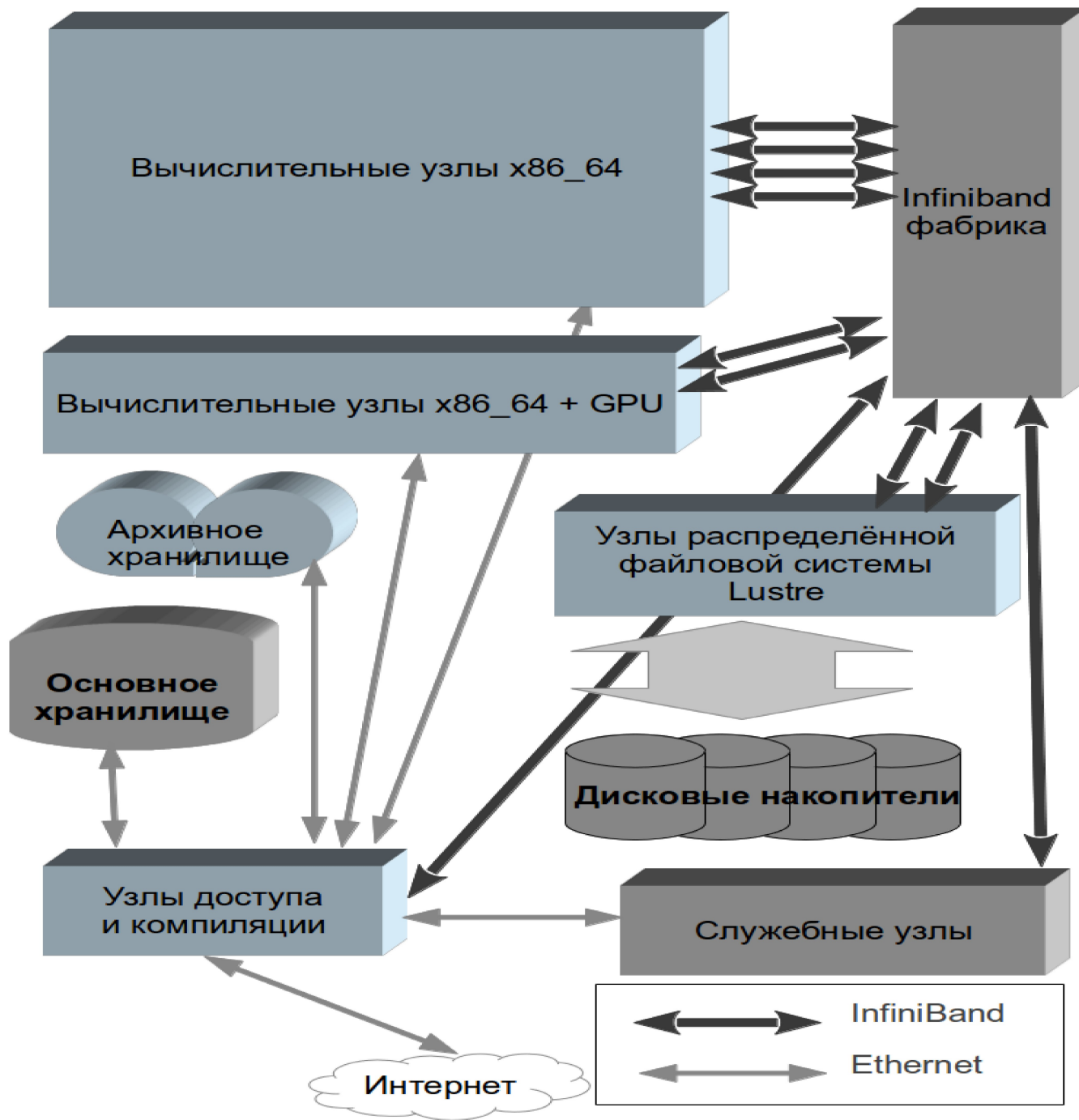


# Суперкомпьютер «Ломоносов»



# Суперкомпьютер «Ломоносов»







# Получение доступа

Octoshell

Справка

Регистрация

Вход

## Octoshell

Система управления доступом к Суперкомпьютерному комплексу МГУ имени М.В. Ломоносова

Войти

Зарегистрироваться

НИВЦ МГУ имени М.В. Ломоносова

Created by Evrone

# Получение доступа

Octoshell    Справка

## Регистрация

---

Email

Пароль

Минимум 6 символов

Подтверждение пароля

Зарегистрироваться

## *Получение доступа*

Здравствуйте!

Для активации аккаунта пройдите по ссылке [активировать](#).

Если у Вас возникли проблемы с переходом по ссылке скопируйте и вставьте её в браузер `http://users.parallel.ru/auth/users/activate/g4s1RnQNWQ4apf28ksW`.

С уважением, Octoshell.



# Получение доступа

[Octoshell](#) [Рабочий кабинет](#) [Справка](#)  [Выход](#)

[Проекты](#) [Перерегистрации](#) [Поддержка](#) [Профиль](#)

Пользователь активирован. [×](#)

## Проекты

Вы не можете участвовать в проектах, так как Вы не заполнили «Место работы» и не прикрепили Ваш публичный ssh-ключ. Пожалуйста, перейдите в ваш профиль и заполните требуемые поля.

[Перейти в профиль.](#)

# Получение доступа

## Профиль

Имя

Отчество

Фамилия

☒ Использовать мой email для информационных рассылок

Отметьте, если вы согласны получать информационные рассылки о будущих семинарах и другой полезной информации.

☒ Использовать мой email для служебных рассылок

Отметьте, если вы согласны получать рассылку о состоянии кластеров, профилактических работах и прочей служебной информации.

Сохранить

## Места работы

Добавьте место работы!

[Добавить место работы](#)

## ssh-ключи

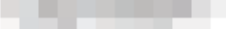
Если Вы не знаете как добавить публичный ssh-ключ, перейдите по ссылке: [Добавление публичного ssh-ключа.](#)

[Добавить публичный ключ](#)

Добавьте свой публичный ssh-ключ!

Не ppk!!!

# Получение доступа

| Проекты с моим участием                                                          |                                                                                                      |                                                                                                                                                                                                                                                                      |                          |
|----------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------|
| №                                                                                | Наименование                                                                                         | Руководитель                                                                                                                                                                                                                                                         | Статус доступа к проекту |
|  | <br><b>завершён</b> | <br><br>    | <b>разрешён</b>          |
|  | <br><b>активен</b>  | <br><br> | <b>разрешён</b>          |

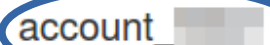


## Получение доступа

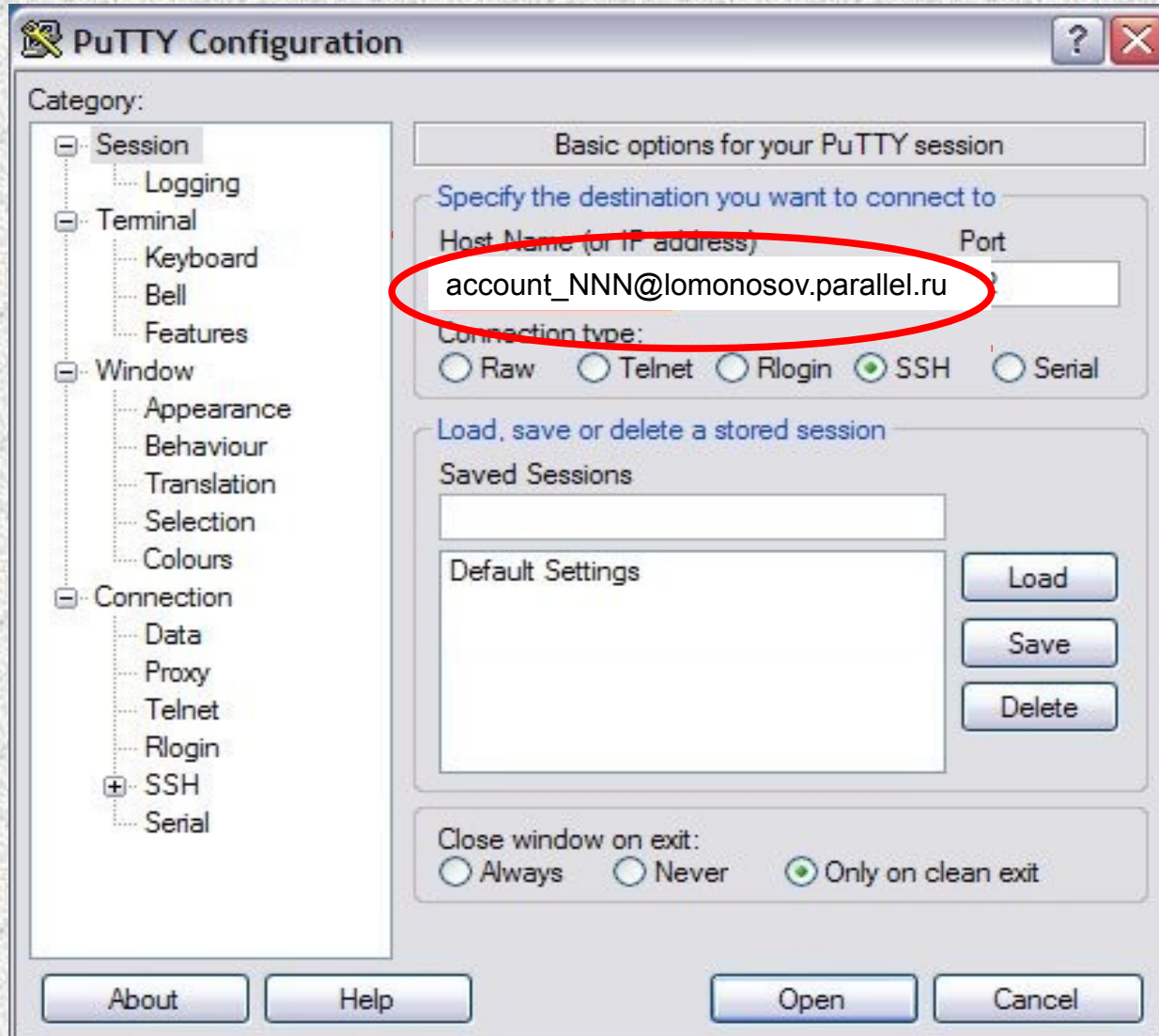
Доступ к ресурсам СКЦ МГУ

| Наименование | Хост                  | Выделено ресурсов                                | Выдан      | Последняя синхронизация |
|--------------|-----------------------|--------------------------------------------------|------------|-------------------------|
| Ломоносов    | lomonosov.parallel.ru | Место на HDD: 0 Гб   GPU: 0 часов   CPU: 0 часов | 13.01.2015 | 03.02.2015              |

Участники данного проекта

| email                                                                                                                                                                                                                  | Login                                                                                        | Есть доступ к проекту | Есть доступ к ресурсам |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|------------------------|
| <br><a href="#">✉ Отправить email участнику</a>                                                                                        |             | ✓                     | ✓                      |
| <br><br><a href="#">✉ Отправить email участнику</a> | account_  | ✓                     | ✓                      |

# Получение доступа



PAgent

# Генерация ключей



Putty

puttygen



# Генерация ключей

**PuTTY Key Generator** [?] [X]

File Key Conversions Help

**Key**

Public key for pasting into OpenSSH authorized\_keys file:

ssh-dss

Key fingerprint: ssh-dss 2048 15:22:ee:5f:e0:3f:18:c3:8e:83:02:30:5b:dd:db:1e

Key comment: dsa-key-20090716

Key passphrase:

Confirm passphrase:

**Actions**

Generate a public/private key pair

Load an existing private key file

Save the generated key

**Parameters**

Type of key to generate:

☐ SSH-1 (RSA) ☐ SSH-2 RSA ☒ SSH-2 DSA

Number of bits in a generated key: 2048

**PuTTY Key Generator** [?] [X]

File Key Conversions Help

**Key**

Public key for pasting into OpenSSH authorized\_keys file:

ssh-dss

Key fingerprint: ssh-dss 2048 15:22:ee:5f:e0:3f:18:c3:8e:83:02:30:5b:dd:db:1e

Key comment: dsa-key-20090716

Key passphrase:

Confirm passphrase:

**Actions**

Generate a public/private key pair

Load an existing private key file

Save the generated key

**Parameters**

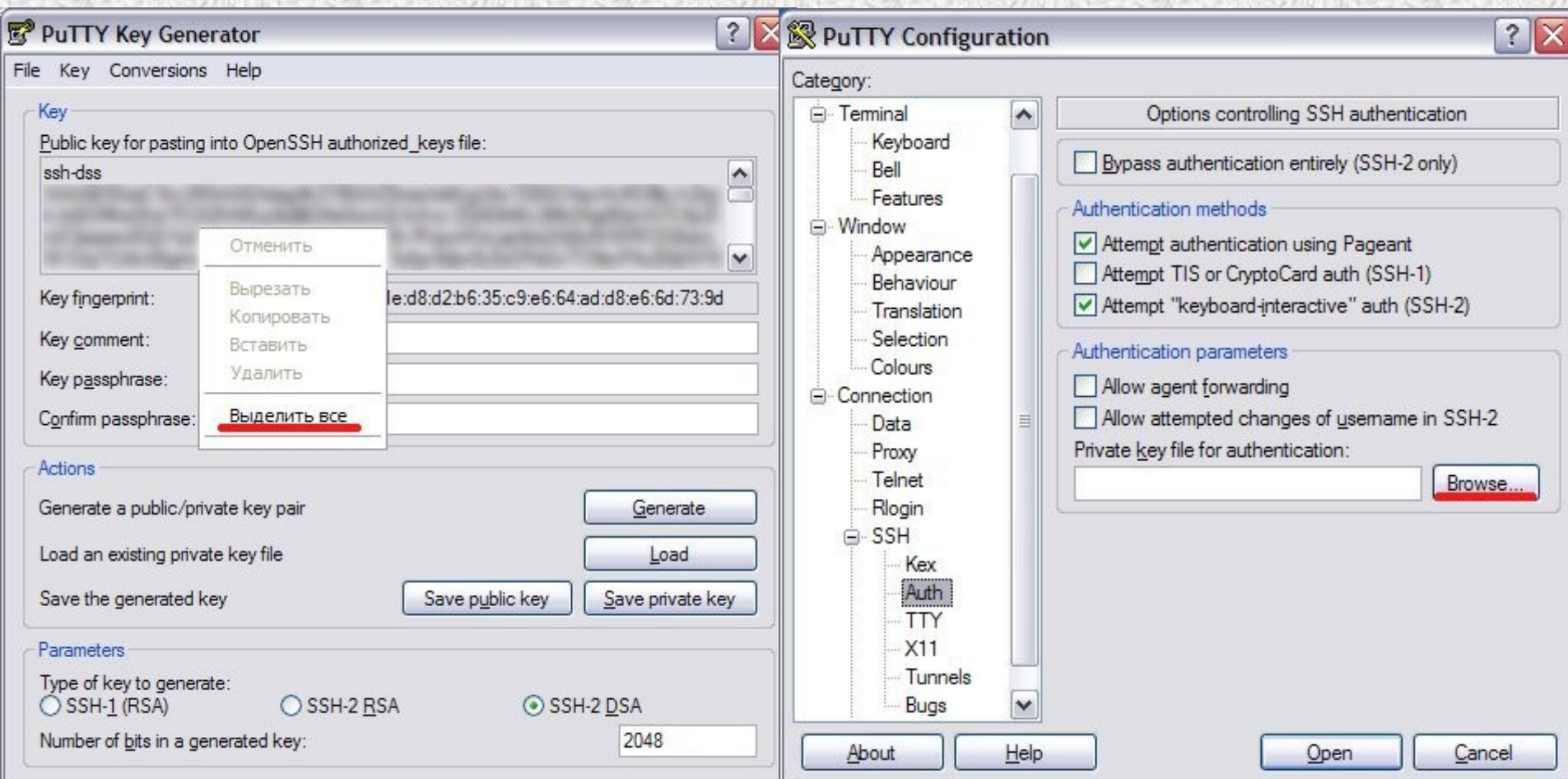
Type of key to generate:

☐ SSH-1 (RSA) ☐ SSH-2 RSA ☒ SSH-2 DSA

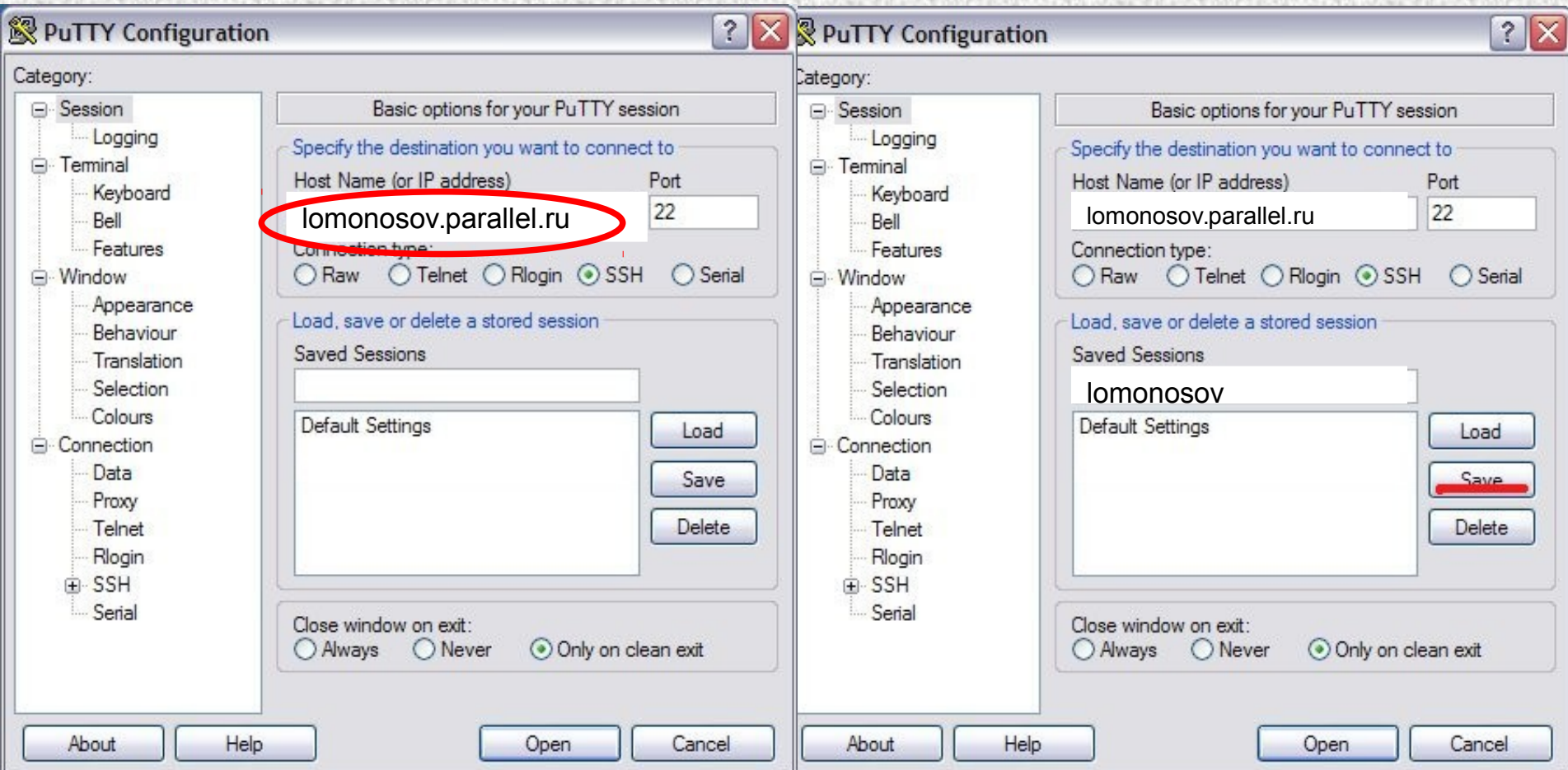
Number of bits in a generated key: 2048



# Генерация ключей



# Удалённый доступ



# Вопросы, проблемы, ...

Octoshell

Рабочий кабинет

Справка

Выход

Проекты

Перерегистрации

Поддержка

Профиль

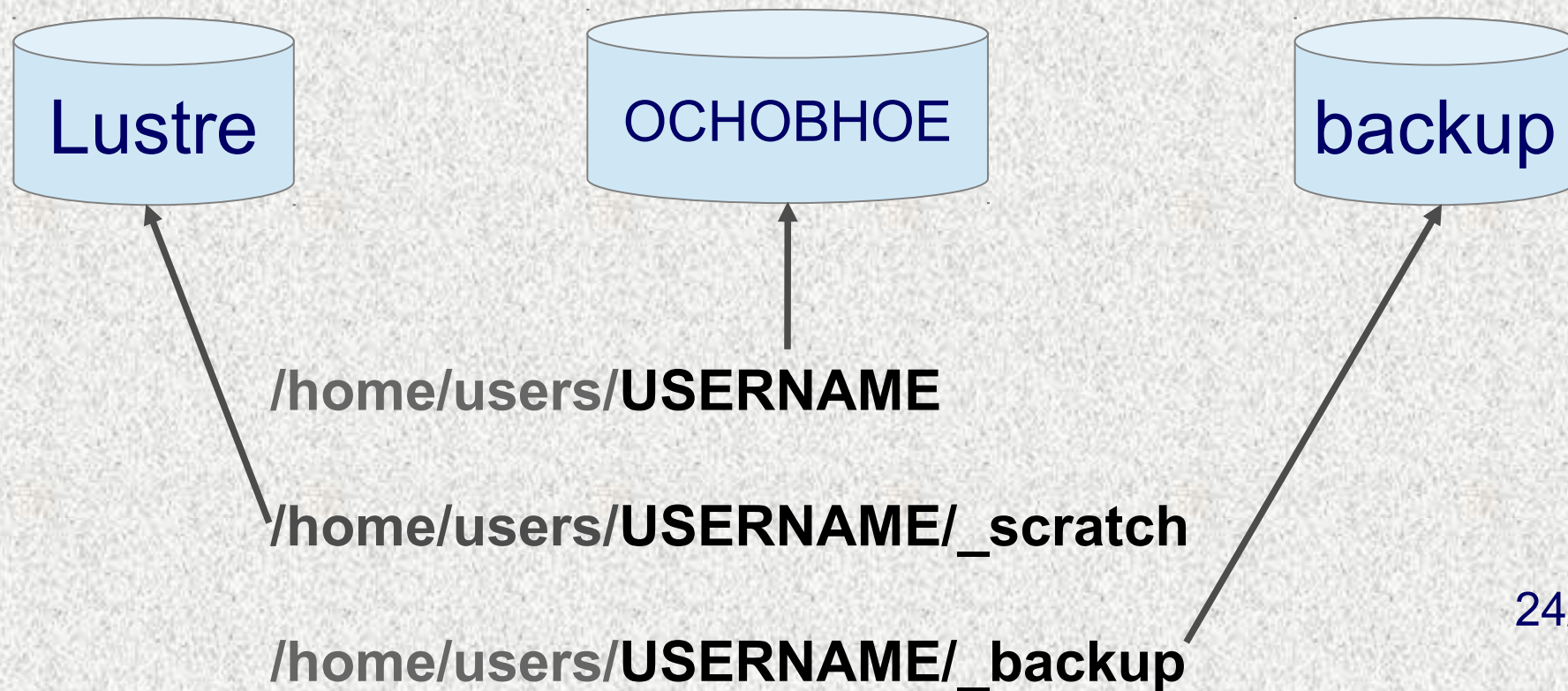
Пользователь активирован.





# "Ломоносов" — файловая система

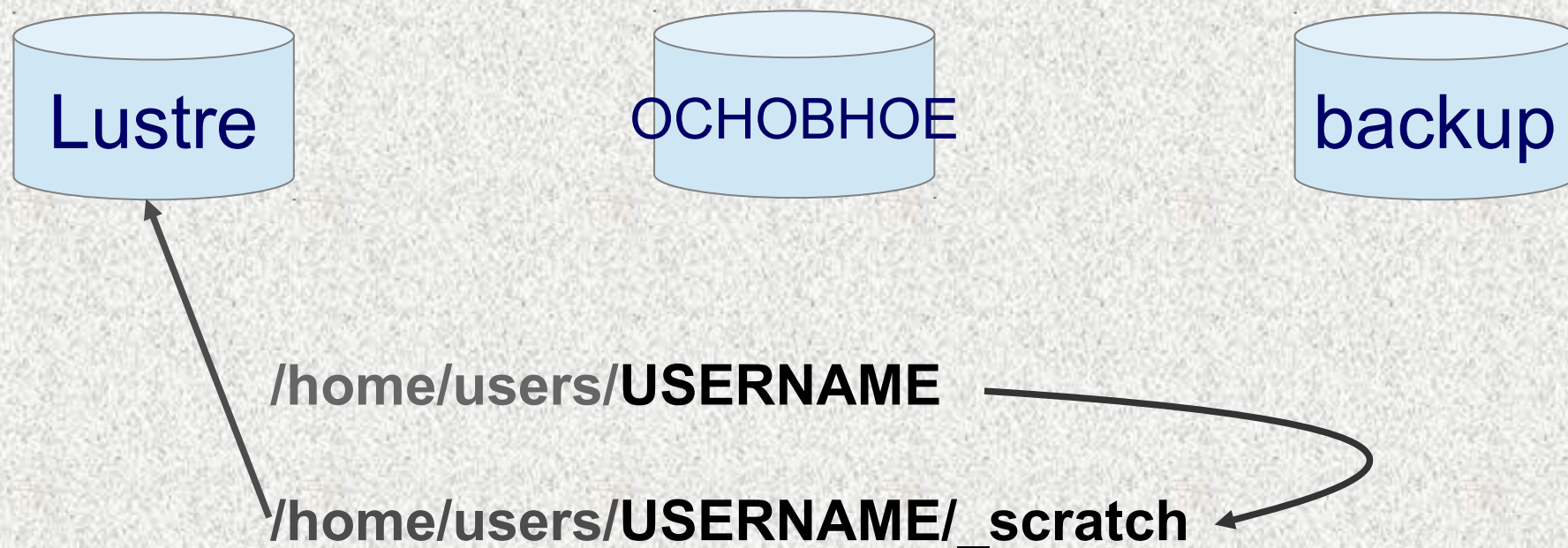
## Домашний каталог на access





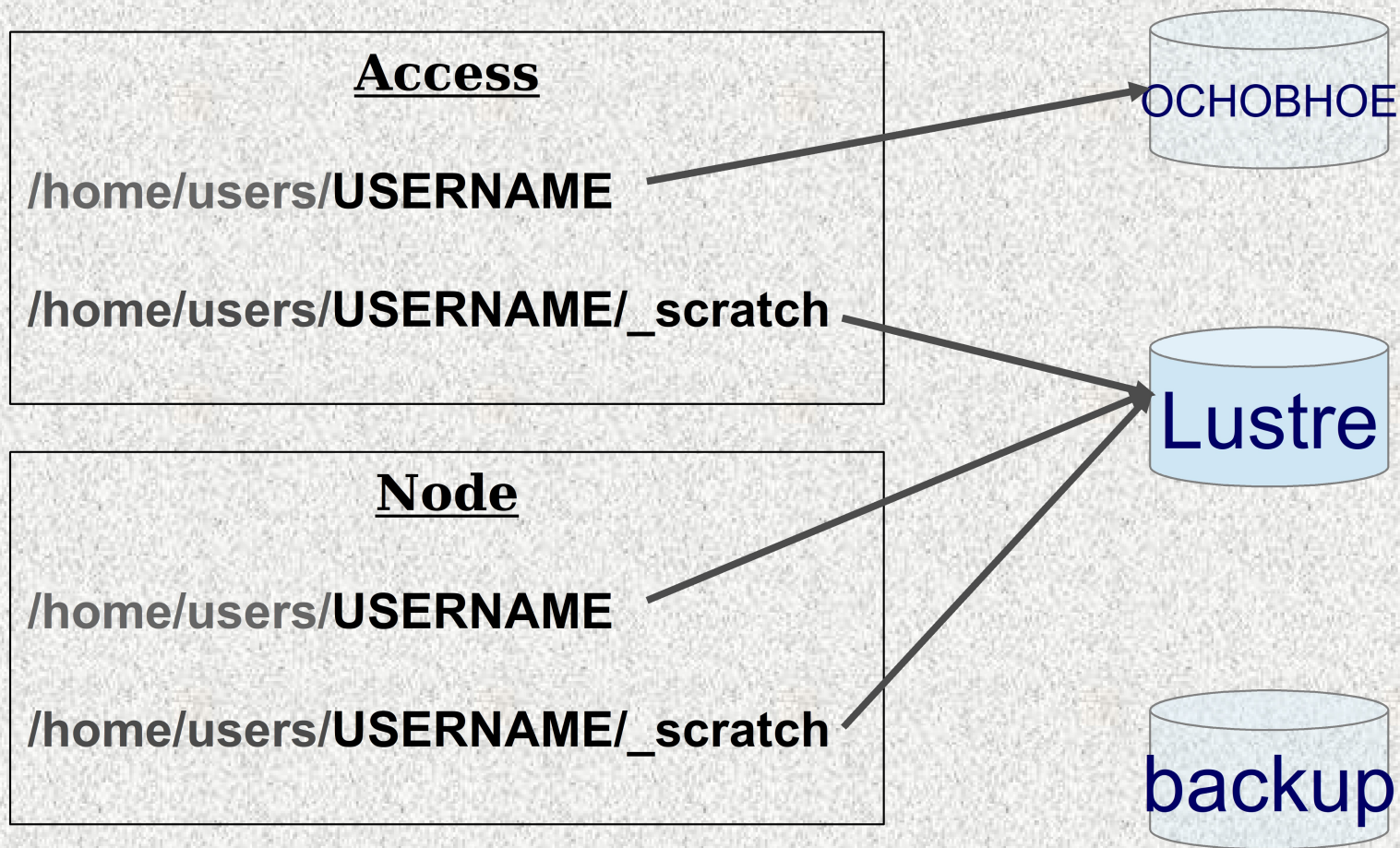
# "Ломоносов" — файловая система

*Домашний каталог  
на узле*



# "Ломоносов" — файловая система

## Запуск задачи





# "Ломоносов" — файловая система

## Node

/home/users/USERNAME ← =

/home/users/USERNAME/\_scratch

/home/users/USERNAME/\_scratch/\_scratch

/home/users/USERNAME/\_scratch → .



# Modules

\$ module available

```
----- /opt/modulefiles -----
PrgEnv-pgi/15.7 impi/4.1.0 intel/15.0.090 openfoam/2.2.2 openmpi/1.6.5-icc slurm/2.5.6
cuda/5.5      impi/4.1.0-32bit itac/9.0.1 openfoam/2.3.1 openmpi/1.8.4-gcc totalview
cuda/6.5.14   impi/4.1.0-ofa mkl/11.2.0 openmpi/1.10.2-icc openmpi/1.8.4-icc
ekopath/4.0.11 impi/5.0.1 mkl/4.0.2.146 openmpi/1.5.5-gcc paraview/3.12.0
gcc/5.2.0     impi/5.0.1-ofa molpro/2009 openmpi/1.5.5-icc pgi/12.9
impi/4.0.3    intel/13.1.0 octave/4.0.1 openmpi/1.6.5-gcc slurm/15.08
```

```
----- /opt/ccoe/modulefiles -----
abinit/7.10.2 amber12/mpi espresso/5.1.2 gromacs/plumed magma/1.7.0 nwchem/6.3-mpi
abinit/7.10.2-cuda cp2k espresso/5.3.0 lammps-cuda namd/2.11 nwchem/6.6-cuda
amber12/cuda espresso/5.1.1 gromacs/5.0.4-gpu magma/1.6.1 namd-cuda nwchem/6.6-openmpi
```

## *«Ломоносов» - очередь задач*

SLURM

Modules

**module av[ailable]** — список модулей

**module add impi/4.1.0**

**module add intel**

**module add cuda**

## *«Ломоносов» - очередь задач*

**module li[st] — загруженные**

**module rm impi/4.1.0**

**module add openmpi/1.5.5-icc**



## *«Ломоносов» - очередь задач*

`sbatch` — поставить задачу в очередь

**`sbatch -n16 -N2 -p test impi ./mytask`**

Число процессов      Число узлов      Очередь      Скрипт-обёртка

The diagram consists of four red arrows pointing from the labels below to the corresponding options in the command above. The first arrow points from 'Число процессов' to '-n16'. The second arrow points from 'Число узлов' to '-N2'. The third arrow points from 'Очередь' to '-p test'. The fourth arrow points from 'Скрипт-обёртка' to 'impi ./mytask'.

**Submitted batch job 632822** ← Номер задачи

## *«Ломоносов» - очередь задач*

**impi = Intel MPI**

**ompi = OpenMPI**

**run = NO MPI**

Не забудьте загрузить нужный module!

## ***«Ломоносов» - очередь задач***

queue — просмотр задач

sinfo — состояние очередей

scancel — удалить задачу



## *«Ломоносов» - очередь задач*

\$ sbatch

-n = число процессов

-N = число узлов

--cpus-per-task = число процессоров на процесс

--no-requeue (по умолчанию)

--requeue

-t Д-ЧЧ:ММ:сс = лимит времени.

## «Ломоносов» - очередь задач

\$ sbatch -d ...

|                              |                 |
|------------------------------|-----------------|
| after:job_id[:jobid...]      | после старта    |
| afterany:job_id[:jobid...]   | после окончания |
| afternotok:job_id[:jobid...] | после неуспеха  |
| afterok:job_id[:jobid...]    | после успеха    |

-J имя

-i входной\_файл

-o выходной\_файл

-e поток\_ошибок

## «Ломоносов» - очередь задач

\$ queue

| JOBID   | PARTITION | NAME    | USER     | ST | TIME | CPUS | NODE | NODELIST    |
|---------|-----------|---------|----------|----|------|------|------|-------------|
| 1319269 | gpu       | ompi    | tsukanov | PD | 0:00 | 128  | 1    | (Resources) |
| 1319281 | gpu       | ep_run7 | kot-addi | PD | 0:00 | 256  | 32   | (Resources) |
| 1319317 | gpu       | impi    | kulakova | PD | 0:00 | 256  | 32   | (Resources) |
| 1319420 | gpu       | ep_run2 | kot-addi | PD | 0:00 | 256  | 32   | (Resources) |
| 1319433 | gpu       | impi    | ibryukha | PD | 0:00 | 72   | 1    | (Resources) |
| 1319434 | gpu       | impi    | ibryukha | PD | 0:00 | 72   | 1    | (Resources) |



## «Ломоносов» - очередь задач

```
$ queue --user my_name
```

```
$squeue -o "%i;%3C;%L;%p %.9P " |head
```

```
JOBID;CPU;TIME_LEFT;PRIORITY PARTITION
```

```
1319269;128;2-23:40:00;0.02327379026061
```

gpu

```
1319281;256;3-00:00:00;0.02327378746664
```

gpu

```
1319317;256;2-23:59:00;0.02327377908474
```

gpu

```
1319420;256;3-00:00:00;0.02327375510318
```

gpu

```
1319433;72 ;1-00:00:00;0.02327375207638
```

gpu

## «Ломоносов» - очередь задач

```
$ sinfo
```

| PARTITION | AVAIL | TIMELIMIT  | NODES | STATE  | NODELIST                   |
|-----------|-------|------------|-------|--------|----------------------------|
| compute*  | up    | 7-00:00:00 | 58    | drain* | n[48001-48032]             |
| compute*  | up    | 7-00:00:00 | 13    | down*  | n[48626,51306]             |
| compute*  | up    | 7-00:00:00 | 14    | drain  | n[52101,52103]             |
| compute*  | up    | 7-00:00:00 | 1016  | alloc  | n[48101-48132,48201-48210] |
| compute*  | up    | 7-00:00:00 | 167   | idle   | n[48211-48216]             |

```
$ sinfo --summarize
```

| PARTITION | AVAIL | TIMELIMIT  | NODES(A/I/O/T)  | NODELIST       |
|-----------|-------|------------|-----------------|----------------|
| compute*  | up    | 7-00:00:00 | 1118/77/85/1280 | n[48001-52732] |

## *«Ломоносов» - пример*

`scp file.c user@lomonosov.parallel.ru:`

`ssh user@lomonosov.parallel.ru`

`ssh compiler`



## *«Ломоносов» - пример*

```
module add intel openmpi/1.8.4-icc
```

```
mpicc file.c -o _scratch/mytask
```

```
cd _scratch
```

```
sbatch -n16 -p test impi ./mytask
```

## *Modules*

```
$ module add slurm
```

```
$ sinfo -p test
```

```
$ squeue
```

```
$ sbatch -n 16 -p test myscript.sh
```

## *Компиляция*

```
$ ssh compiler
```

```
$ module add intel mkl openmpi cuda
```

```
$ mpicc my_prog.c
```

```
$ mpicxx myprog.cpp
```

```
$ mpif90 myprog.F
```



## Запуск

```
$ cp myexe __scratch/
```

```
$ cd __scratch
```

```
$ sbatch -n NNN ompi ./myexe
```

ompi = openmpi

impi = intel mpi

run = no mpi

```
$ scancel NN
```

## Скачивание файлов

Windows:

- WinSCP
- FAR (winscp plugin)
- FileZilla

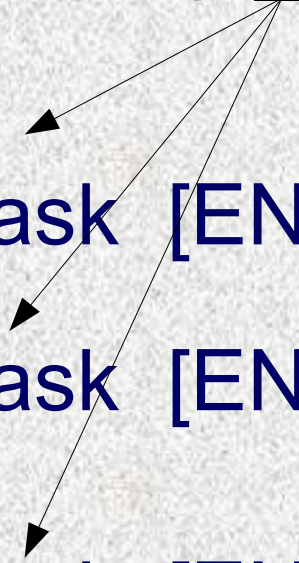
Linux:

- mc - sh://user@server
- Nautilus/... - Connect Server
- FileZilla
- sshfs

## Запуск *MPI*-программ

```
mpirun -n 10 --hostfile fff ./mytask
```

```
ssh node01 -> mpi_runtime (mpd, hydra, ...)
```



```
node01: ./mytask [ENV1]
```

```
node02: ./mytask [ENV2]
```

■ ■ ■

```
node10: ./mytask [ENV10]
```



## *Запуск MPI-программ: SLURM*

```
sbatch -n 10 ompi ./mytask
```

```
=> node01 -> slurmd
```

```
HOSTFILE=${TMPDIR}/hostfile.${SLURM_JOB_ID}
```

```
srun hostname -s|sort|uniq -c|awk '{print $2" slots="$1}' >  
$HOSTFILE || { rm -f $HOSTFILE; exit 255; }
```

```
mpirun --hostfile $HOSTFILE "$@"
```

```
rc=$?
```

```
rm -f $HOSTFILE
```

```
exit $rc
```

## Запуск MPI-программ: SLURM

node01 -> slurmd

node01 -> slurmstepd —> ./mytask [ENV1]

node02 -> slurmstepd —> ./mytask [ENV2]

■ ■ ■

node10 -> slurmstepd —> ./mytask [ENV10]

<http://users.parallel.ru>

1.Справка

2.Поддержка