内容に関するご質問は
ida@cc.u-tokyo.ac.jp
まで、お願いします。

[Oakleaf-FX(FX-10)編]

第62回　お試しアカウント付き
並列プログラミング講習会
「ライブラリ利用：科学技術計算の効率化入門」

スパコンへのログイン・テストプログラム起動

東京大学情報基盤センター　特任准教授　伊田 明弘

スパコンへのログイン・ファイル転送・基本コマンド

Oakleaf-FXへログイン

- ターミナルから、以下を入力する

  $ ssh oakleaf-fx.cc.u-tokyo.ac.jp -l tYYxxx

  「-l」はハイフンと小文字のL、

  「tYYxxx」は利用者番号（数字）

  “tYYxxx”は、利用者番号を入れる
- 接続するかと聞かれるので、 yes を入れる
- 鍵の設定時に入れた

  自分が決めたパスワード（パスフレーズ）

  を入れる
- 成功すると、ログインができる

PCのファイルをOakleaf-FXに置く

- ターミナルから、以下を入力する

```
$ scp ./a.f90  tYYxxx@oakleaf-fx.cc.u-tokyo.ac.jp:
```

「tYYxxx」は利用者番号（数字）
“tYYxxx”は、利用者番号を入れる

- PCのカレントディレクトリにある”a.f90”を、Oakleaf-FX上のホームディレクトリに置く
- ディレクトリごと置くにはには、”-r” を指定

```
$ scp -r ./SAMP tYYxxx@oakleaf-fx.cc.u-tokyo.ac.jp:
```

- PCのカレントディレクトリにあるSAMPフォルダを、その中身ごと、Oakleaf-FX上のホームディレクトリに置く

Oakleaf-FXのデータをPCに取り込む

- ターミナルから、以下を入力する

$ scp tYYxxx@oakleaf-fx.cc.u-tokyo.ac.jp:~/a.f90 ./

「tYYxxx」は利用者番号（数字）
“tYYxxx”は、利用者番号を入れる

- Oakleaf-FX上のホームディレクトリにある”a.f90”を、PCのカレントディレクトリに取ってくる
- ディレクトリごと取ってくるには、”-r” を指定

$ scp -r tYYxxx@oakleaf-fx.cc.u-tokyo.ac.jp:~/SAMP ./

- Oakleaf-FX上のホームディレクトリにあるSAMPフォルダを、その中身ごと、PCのカレントディレクトリに取ってくる

ＵＮＩＸ備忘録

- emacsの起動： emacs　編集ファイル名
  - ^x　^s　（^はcontrol）：テキストの保存
  - ^x　^c　：　終了
    （ ^z で終了すると、スパコンの負荷が上がる。絶対にしないこと。）
  - ^g　：　訳がわからなくなったとき。
  - ^k　：　カーソルより行末まで消す。
    消した行は、一時的に記憶される。
  - ^y　：　^kで消した行を、現在のカーソルの場所にコピーする。
  - ^s　文字列：　文字列の箇所まで移動する。
  - ^M x　goto-line：　指定した行まで移動する。

UNIX備忘録

- rm ファイル名： ファイル名のファイルを消す。
  - rm *~ ： test.c~ などの、~がついたバックアップファイルを消す。使う時は慎重に。*~ の間に空白が入ってしまうと、全てが消えます。
- ls ： 現在いるフォルダの中身を見る。
- cd フォルダ名： フォルダに移動する。
  - cd .. ：一つ上のフォルダに移動。
  - cd ~ ：ホームディレクトリに行く。訳がわからなくなったとき。
- cat ファイル名： ファイル名の中身を見る
- make：実行ファイルを作る
  （Makefile があるところでしか実行できない）
  - make clean：実行ファイルを消す。
    （clean がMakefileで定義されていないと実行できない）

ＵＮＩＸ備忘録

- less　ファイル名：　ファイル名の中身を見る(catでは画面がいっぱいになってしまうとき)
  - スペースキー：1画面スクロール
  - ／　：文字列の箇所まで移動する。
  - ｑ　：　終了（訳がわからなくなったとき）
- cp ファイル名　フォルダ名: ファイルをコピーする
- mvファイル名　フォルダ名:ファイルを移動させる

テストプログラムのコンパイルと実行 [Oakleaf-FX編]

サンプルプログラムのコンパイル

サンプルプログラム名

- C言語版・Fortran90版共通ファイル：

  Samples-fx.tar

- tarで展開後、C言語とFortran90言語のディレクトリが作られる
  - C/　：C言語用
  - F/　：Fortran90言語用
- 上記のファイルが置いてある場所

  /home/z30107

並列版Helloプログラムをコンパイルしよう (1/2)

1. /home/z30107 にある Samples-fx.tar を自分のディレクトリにコピーする
   $ cp /home/z30107/Samples-fx.tar ./
2. Samples-fx.tar を展開する
   $ tar xvf Samples-fx.tar
3. Samples フォルダに入る
   $ cd Samples
4. C言語 : $ cd C
   Fortran90言語 : $ cd F
5. Hello フォルダに入る
   $ cd Hello

並列版Helloプログラムをコンパイルしよう (2/2)

6. ピュアMPI用のMakefileをコピーする
   $ cp Makefile_pure　Makefile
7. make する
   $　make
8. 実行ファイル(hello)ができていることを確認する
   $　ls

サンプルプログラムの実行

FX10スーパコンピュータシステムでのジョブ実行形態

- 以下の2通りがあります
- インタラクティブジョブ実行
  - PCでの実行のように、コマンドを入力して実行する方法
  - スパコン環境では、あまり一般的でない
  - デバック用、大規模実行はできない
  - FX10では、以下に限定
    - 1ノード(16コア)(2時間まで)
    - 8ノード(128コア)(10分まで)
- バッチジョブ実行
  - バッチジョブシステムに処理を依頼して実行する方法
  - スパコン環境で一般的
  - 大規模実行用
  - FX10では、最大1440ノード(23,040コア)まで利用可能(24時間まで)

コンパイラの種類とインタラクティブ実行およびバッチ実行

- インタラクティブ実行、およびバッチ実行で、利用するコンパイラ（C言語、C＋＋言語、Fortran90言語）の種類が違います
- インタラクティブ実行では
  - オウンコンパイラ（そのノードで実行する実行ファイルを生成するコンパイラ）を使います
- バッチ実行では
  - クロスコンパイラ（そのノードでは実行できないが、バッチ実行する時のノードで実行できる実行ファイルを生成するコンパイラ）を使います
- それぞれの形式
  - オウンコンパイラ：＜コンパイラの種類名＞
  - クロスコンパイラ：＜コンパイラの種類名＞px
  - 例）富士通Fortran90コンパイラ
    - オウンコンパイラ：frt
    - クロスコンパイラ：frtpx

インタラクティブ実行の仕方（参考）

- コマンドラインで以下を入力
  - 1ノード実行用

    $ pjsub --interact

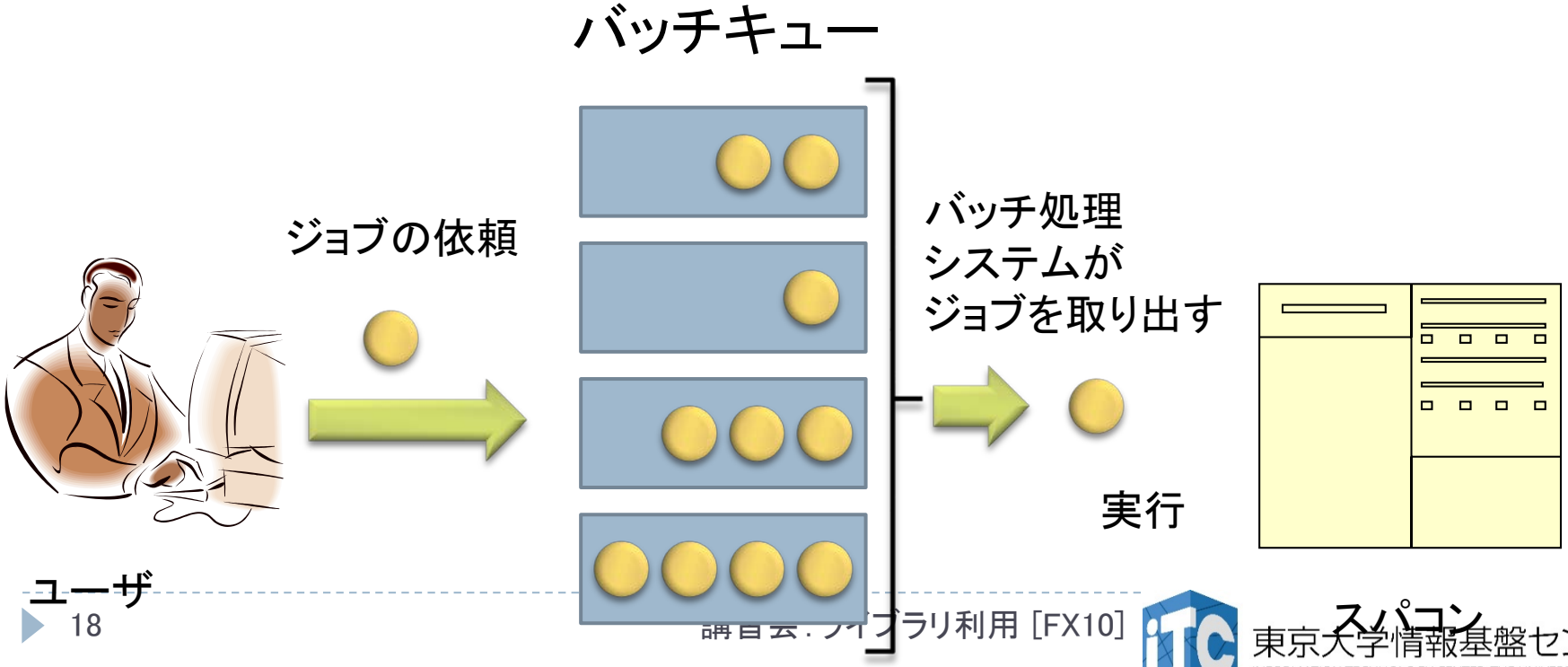
  - 8ノード実行用

    $ pjsub --interact -L “node=8”

※インタラクティブ用のノード総数は50ノードです。
もしユーザにより50ノードすべて使われている場合、
資源が空くまで、ログインできません。

バッチ処理とは

- スパコン環境では、通常は、インタラクティブ実行（コマンドラインで実行すること）はできません。
- ジョブはバッチ処理で実行します。
  - キュー: 待ち行列



バッチ処理を用いたジョブの実行方法

- Oakleaf-FXにおいてバッチ処理は、富士通製のバッチシステムで管理されています。
- ジョブの投入：
  pjsub 〈ジョブスクリプトファイル名〉

```
#!/bin/bash
#PJM -L "rscgrp=lecture"
#PJM -L "node=12"
#PJM --mpi "proc=192"
#PJM -L "elapse=1:00"
mpirun ./hello
```

キュー名
：lecture

ジョブスクリプトファイルの例

本講習会でのグループ名とキュー名

- グループ: gt00

  課金情報(財布)を管理するのに使用される

- キュー 名　: tutorial

  キューとは、スパコンにバッチジョブを
  投入する時の待ち行列の名前
  (詳細は後述)

本お試し講習会でのキュー名

- 本演習中のキュー名：
  - tutorial
  - 最大15分まで
  - 最大ノード数は12ノード(192コア) まで
- 本演習時間以外(24時間)のキュー名：
  - lecture
- 利用条件は演習中のキュー名と同様

Oakleaf-FXのバッチジョブキュー

■通常キューの一覧

代表キュー名	キュー名	最大ノード数	実行制限時間（経過時間）	ノード当りメモリー容量（GB）
debug	debug	1–240	30 min	28
short	short	1–72	6 h	28
regular	small medium large x-large	12–216 217–372 373–480 481–1,440	48 h 48 h 48 h 24 h	28 28 28 28

■講習会用の特別キュー

tutorial	tutorial	1–12	15 min	28
lecture	lecture	1–12	15 min	28

バッチ処理システムの使い方

- 主要コマンド（富士通製バッチ処理システムの場合）
  - ジョブの投入：
    pjsub 〈ジョブスクリプトファイル名〉 -g 〈プロジェクトコード〉
  - 自分が投入したジョブの状況確認： pjstat
  - 投入ジョブの削除： pjdel 〈ジョブID〉
  - バッチキューの状態を見る： pjstat --rsc
  - バッチキューの詳細構成を見る： pjstat -rsc -x
  - 投げられているジョブ数を見る： pjstat -b
  - 過去の投入履歴を見る： pjstat --history
  - 同時に投入できる数／実行できる数を見る：pjstat --limit

pjstat --rsc の実行画面例

```
$ pjstat --rsc
RSCGRP                STATUS              NODE:COORD
debug                 [ENABLE,START]      480:10x3x16
short                 [ENABLE,START]      480:10x3x16
regular
  |---- small         [ENABLE,START]      3840:20x12x16
  |---- medium        [ENABLE,START]      3840:20x12x16
  |---- large         [ENABLE,START]      3840:20x12x16
  `---- x-large       [ENABLE,START]      3840:20x12x16
interactive
  |---- interactive_n1  [ENABLE,START]      50
  `---- interactive_n8  [ENABLE,START]      50
```

使える
キュー名
(リソース
グループ)

現在
使えるか

ノードの
物理構成情報

pjstat --rsc -x の実行画面例

```
$ pjstat --rsc -x
RSCGRP    STATUS    MIN_NODE  MAX_NODE  ELAPSE   MEM(GB)  PROJECT
debug        [ENABLE,START]      1         240      00:30:00     28     gcXX, gcYY
short        [ENABLE,START]      1          72      06:00:00     28     gcXX, gcYY
regular
  |---- small   [ENABLE,START]     12        216      48:00:00     28     gcXX, gcYY
  |---- medium   [ENABLE,START]  217      372      48:00:00     28     gcXX, gcYY
  |---- large      [ENABLE,START]   373      480      48:00:00     28     gcXX, gcYY
  `---- x-large  [ENABLE,START]    481     1440     24:00:00     28     gcXX, gcYY
interactive
  |---- interactive_n1   [ENABLE,START]   1   1     02:00:00     28     gcXX, gcYY
  `---- interactive_n8   [ENABLE,START]   2    8     00:10:00     28     gcXX, gcYY
```

使える
キュー名
(リソース
グループ)

現在
使えるか

ノードの
実行情報

課金情報(財布)
実習では1つのみ

pjstat -b の実行画面例

```
$ pjstat –b
RSCGRP        STATUS       TOTAL    RUNNING   QUEUED   HOLD   OTHER NODE:COORD
debug     [ENABLE,START]       3          2        0      0       1       480:10x3x16
short     [ENABLE,START]       1          1        0      0       0       480:10x3x16
regular
  |---- small  [ENABLE,START]   165        81       84     0       0       3840:20x12x16
  |---- medium [ENABLE,START]   25         4        20     0       1       3840:20x12x16
  |---- large  [ENABLE,START]   0          0        0      0       0       3840:20x12x16
  `---- x-large [ENABLE,START]  4          0        4      0       0       3840:20x12x16
interactive
  |---- interactive_n1  [ENABLE,START]  2    2        0      0       0       50
  `---- interactive_n8  [ENABLE,START]  1    1        0      0       0       50
```

使える
キュー名
(リソース
グループ)

現在
使え
るか

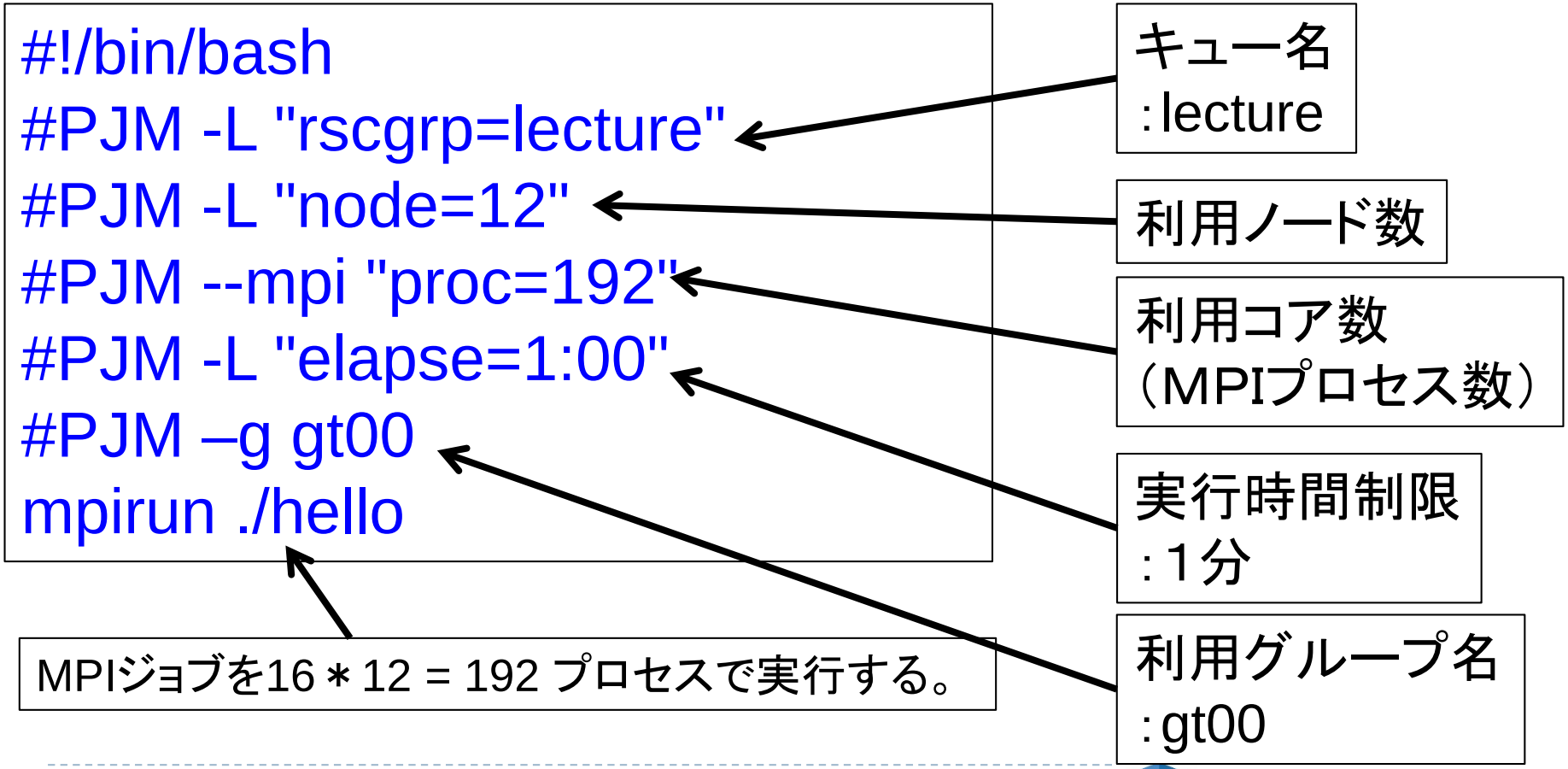
ジョブ
の総数

実行して
いるジョブ
の数

待たされて
いるジョブ
の数

ノードの
物理構成
情報

JOBスクリプトサンプルの説明
（hello-pure.bash, C言語、Fortran言語共通）



並列版Helloプログラムを実行しよう

- このサンプルのJOBスクリプトは
  hello-pure.bash
  です。
- 配布のサンプルでは、
  キューが”lecture”になっています
- $ emacs　hello-pure.bash
  で、“lecture” → “tutorial”
  に変更してください

並列版Helloプログラムを実行しよう

1. Helloフォルダ中で以下を実行する
   $ pjsub hello-pure.bash
2. 自分の導入されたジョブを確認する
   $ pjstat
3. 実行が終了すると、以下のファイルが生成される
   hello-pure.bash.eXXXXXX
   hello-pure.bash.oXXXXXX （XXXXXXは数字）
4. 上記の標準出力ファイルの中身を見てみる
   $ cat hello-pure.bash.oXXXXXX
5. “Hello parallel world!”が、
   16プロセス*12ノード=192表示されていたら成功。

バッチジョブ実行による標準出力、標準エラー出力

- バッチジョブの実行が終了すると、標準出力ファイルと標準エラー出力ファイルが、ジョブ投入時のディレクトリに作成されます。
- 標準出力ファイルにはジョブ実行中の標準出力、標準エラー出力ファイルにはジョブ実行中のエラーメッセージが出力されます。

ジョブ名.oXXXXX --- 標準出力ファイル
ジョブ名.eXXXXX --- 標準エラー出力ファイル
(XXXXX はジョブ投入時に表示されるジョブのジョブID)

並列版Helloプログラムの説明（C言語）

このプログラムは、全コアで起動される

```
#include <stdio.h>
#include <mpi.h>

int main(int argc, char* argv[]) {

    int    myid, numprocs;
    int    ierr, rc;

    ierr = MPI_Init(&argc, &argv);
    ierr = MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myid);
    ierr = MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &numprocs);

    printf("Hello parallel world!  Myid:%d ¥n", myid);

    rc = MPI_Finalize();

    exit(0);
}
```

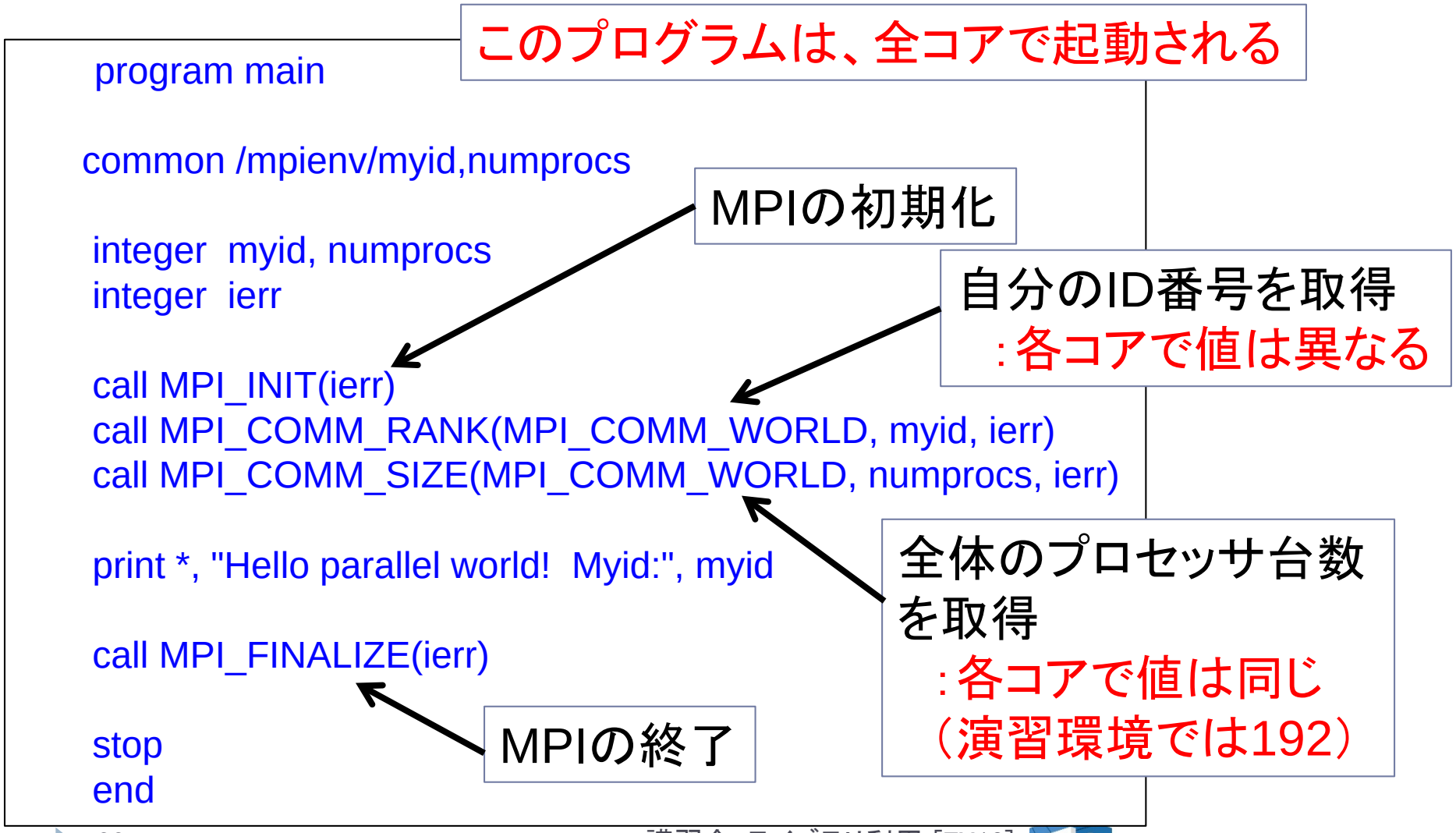
MPIの初期化

自分のID番号を取得
：各コアで値は異なる

全体のプロセッサ台数を取得
：各コアで値は同じ
（演習環境では192）

MPIの終了

並列版Helloプログラムの説明（Fortran言語）



時間計測方法（C言語）

```
double  t0, t1, t2, t_w;
..
ierr = MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);
t1 = MPI_Wtime();

＜ここに測定したいプログラムを書く＞

ierr = MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);
t2 = MPI_Wtime();

t0 =  t2 - t1;
ierr = MPI_Reduce(&t0, &t_w, 1,
       MPI_DOUBLE,MPI_MAX, 0,
       MPI_COMM_WORLD);
```

バリア同期後
時間を習得し保存

各プロセッサーで、t0の値は異なる。
この場合は、最も遅いものの値をプロセッサ0番が受け取る

時間計測方法（Fortran言語）

```
  double precision t0, t1, t2, t_w
  double precision MPI_WTIME
..
  call MPI_BARRIER(MPI_COMM_WORLD, ierr)
  t1 = MPI_WTIME(ierr)

  ＜ここに測定したいプログラムを書く＞

  call MPI_BARRIER(MPI_COMM_WORLD, ierr)
  t2 = MPI_WTIME(ierr)

  t0 =  t2 - t1
  call  MPI_REDUCE(t0, t_w, 1,
&       MPI_DOUBLE_PRECISION,
&       MPI_MAX, 0, MPI_COMM_WORLD, ierr)
```

バリア同期後
時間を習得し保存

各プロセッサーで、t0の値は異なる。
この場合は、最も遅いものの値をプロセッサ0番が受け取る

MPI実行時のリダイレクトについて

- FX10スーパーコンピュータシステムでは、
  MPI実行時の入出力のリダイレクトはできません
  - ×例）mpirun ./a.out < in.txt > out.txt

- リダイレクトを行う場合、以下のオプションを指定してください
  - ○例）mpirun --stdin ./in.txt --ofout out.txt ./a.out

依存関係のあるジョブの投げ方（ステップジョブ）

- あるジョブスクリプト go1.sh　の後に、go2.sh を投げたい
- さらに、go2.shの後に、go3.shを投げたい、ということがある
- 以上を、ステップジョブという。
- FX10におけるステップジョブの投げ方

1. $pjsub --step go1.sh

   [INFO] PJM 0000 pjsub Job 800967_0 submitted.
2. 上記のジョブ番号800967を覚えておき、以下の入力をする

   $pjsub --step --sparam jid=800967 go2.sh

   [INFO] PJM 0000 pjsub Job 800967_1 submitted
3. 以下同様

   $pjsub --step --sparam jid=800967 go3.sh

   [INFO] PJM 0000 pjsub Job 800967_2 submitted

おわり

お疲れさまでした