



オンライン講習会の手引き 「MPI基礎: 並列プログラミング入門」

東京大学情報基盤センター 2021年4月

質問は三木まで: ymiki(at)cc.u-tokyo.ac.jp

はじめに

- 東京大学情報基盤センター(以下,本センター)では 2021年4月28日に第153回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「MPI基礎:並列プログラミング入門」を開催します。
 - 本講習会ではOakforest-PACSシステムを利用した実習を実施します。
 - 本講習会は、ZoomおよびSlackを用いたオンライン講習会として実施します。
- 本資料は、オンライン講習会受講のための事前準備について記載します。
 - 本講習会においては、Oakforest-PACSシステムへログインできるようになっていることを前提とします。

お願い等

- ハンズオンのためのPC, Zoom及びスパコンへ接続するためのネットワーク環境は各受講者でご準備ください。
- PCは Windows/Microsoft Update, Apple Security Updateなどで最新のセキュリティアップデートを行ってください。
- 必ずウィルス対策ソフトウェアをインストールし、ウィルス検索を 実行して問題がないことを事前に確認してから受講してください。
 - セキュリティ対策未実施の場合はオンライン講習会受講を認めません。
- OSは、Windows、Macどちらでも構いませんが、SSHを用いて センターのスーパーコンピューターへ接続ができることが必要 です(後述)。
- 演習の実施に当たり、受講生にセンターのスーパーコンピューターを1月間利用できる無料アカウント(お試しアカウント)を発行します。

- PC上のソフトウェア類の準備
- ・スパコンへのログイン
- ・ログインしたら・・・
- 講習会で使うコミュニケーションツール (Zoom, Slack)の設定
- ・東大情報基盤センターのスパコン

Cygwin: Windows上のUNIXライクな環境

https://www.cygwin.com/

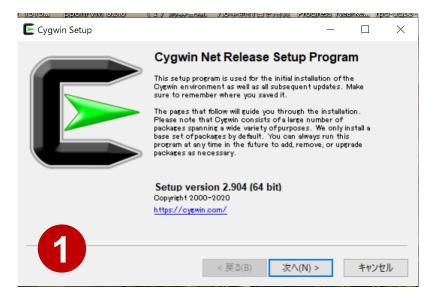
- 利用者ガイド
 - https://cygwin.com/cygwin-ug-net.html
- まずやるべきこと
 - インストーラ(setup-x86_64/32.exe)を予め入手
 - インターネットに接続し、インストーラをダブルクリック
 - 以下指示に従ってインストールを進めてください

以下しばらくはCygwinの話 Mac/Linuxの方はスキップしてください

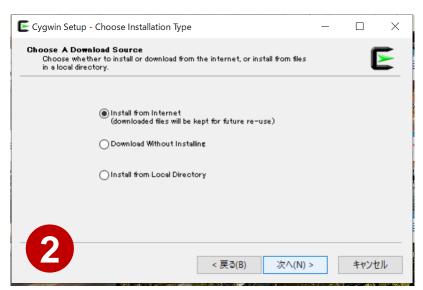


指示に従ってください

https://www.cygwin.com/







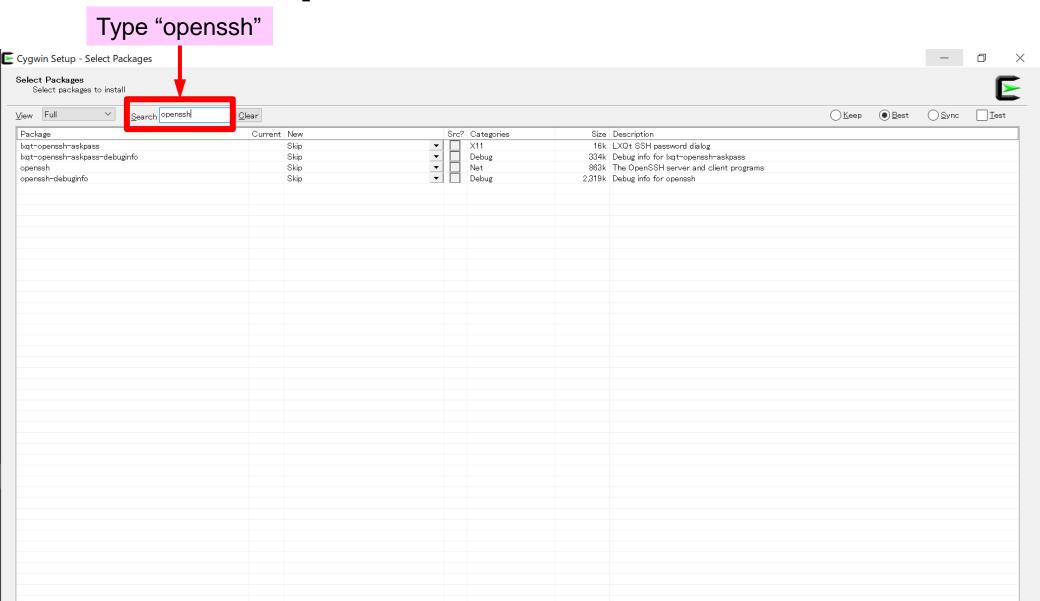
Choose A Do	wnload Site site from this list, or add your own sites to the	list
	Available Download Sites: ftp://ftpinftu-dresden.de http://ftpinftu-dresden.de http://cytwin.mbwarez.dk ftp://ftp.funet.fi ftp://ftp.funet.fi ftp://ftp.fsn.hu http://mirrors.uniri.hr ftp://bo.mirrors.garrit http://bo.mirror.garrit http://fbpiaist.ac.jp http://ftpiaist.ac.jp	ダウンロード元のサイトを選択してください。 「jp」ドメインの方がよ さそうです
User URL:	< 戻る	Add 次へ(N) > キャンセル

まずはデフォルト機能のインストールから

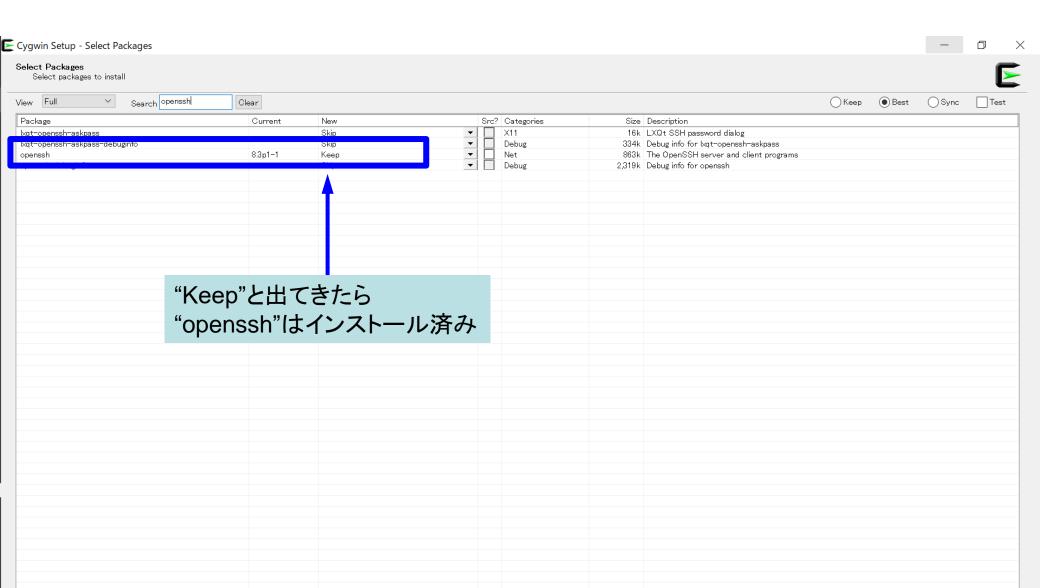
https://www.cygwin.com/

- 基本的な機能はデフォルトのインストールでOKですが、本講習会で必要なものが抜けている可能性があります。
 - 従ってマニュアルでインストールする必要があります
 - インストーラをダブルクリックすれば後で追加も可能です
- 本講習会では下記が必須です(デフォルトのインストールでは 抜けている可能性あり:特にopenssh)
 - openssh (for all users)
 - openssl (for all users)
- インストールされているかどうかは確認が可能です

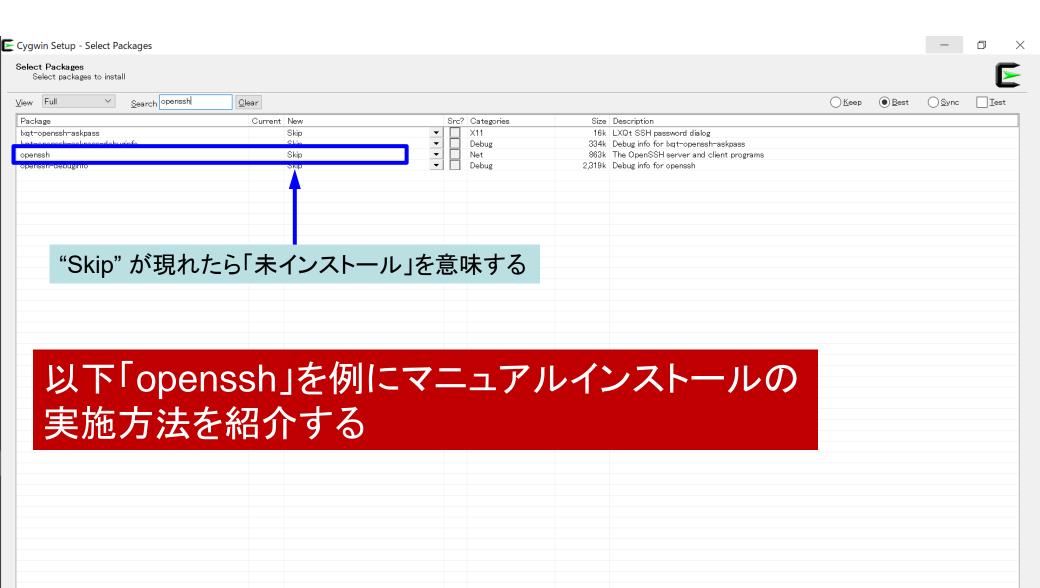
"openssh"の確認(1/3)



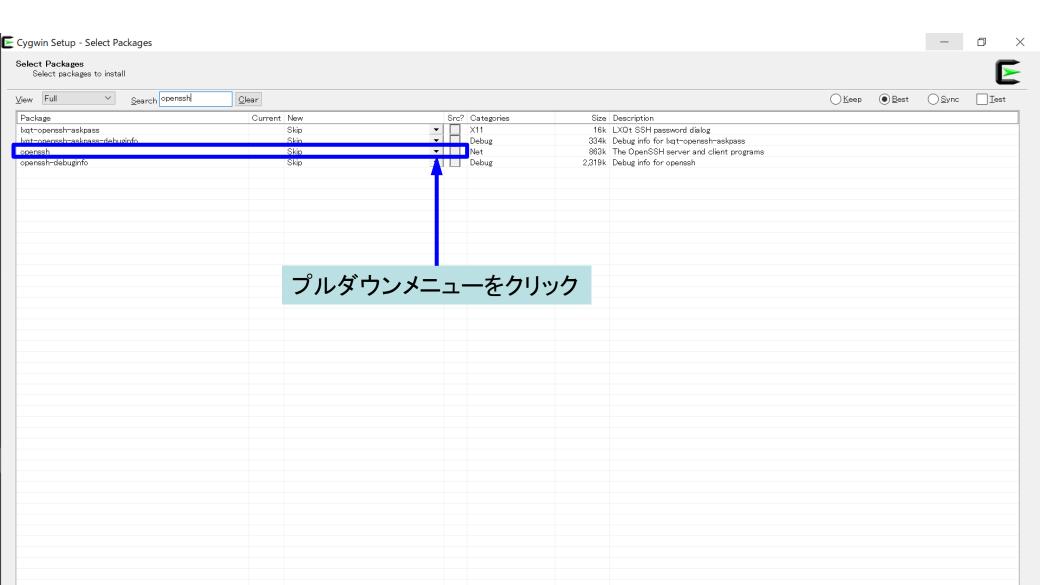
"openssh"の確認(2/3)



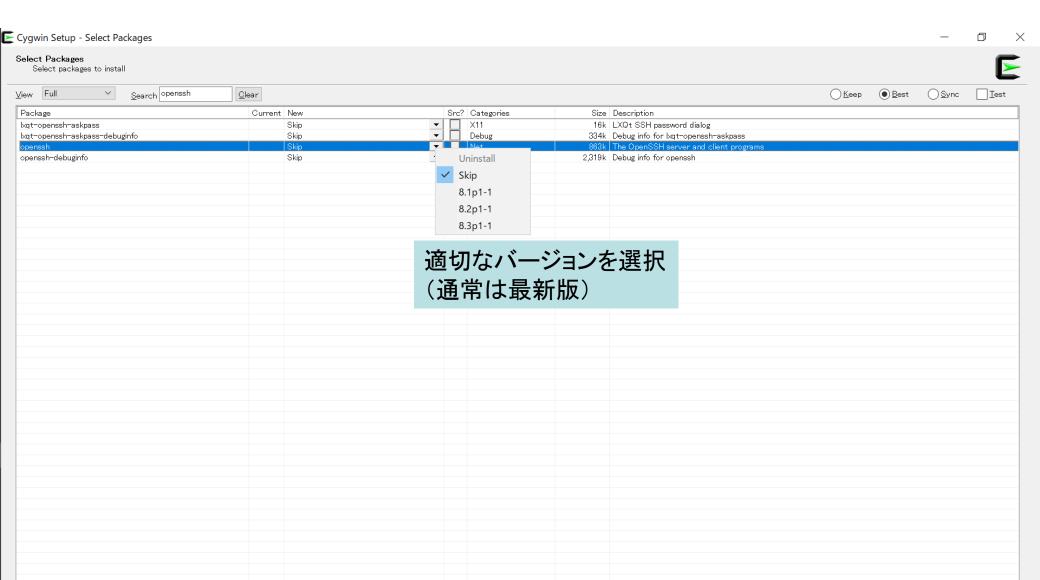
"openssh"の確認(3/3)



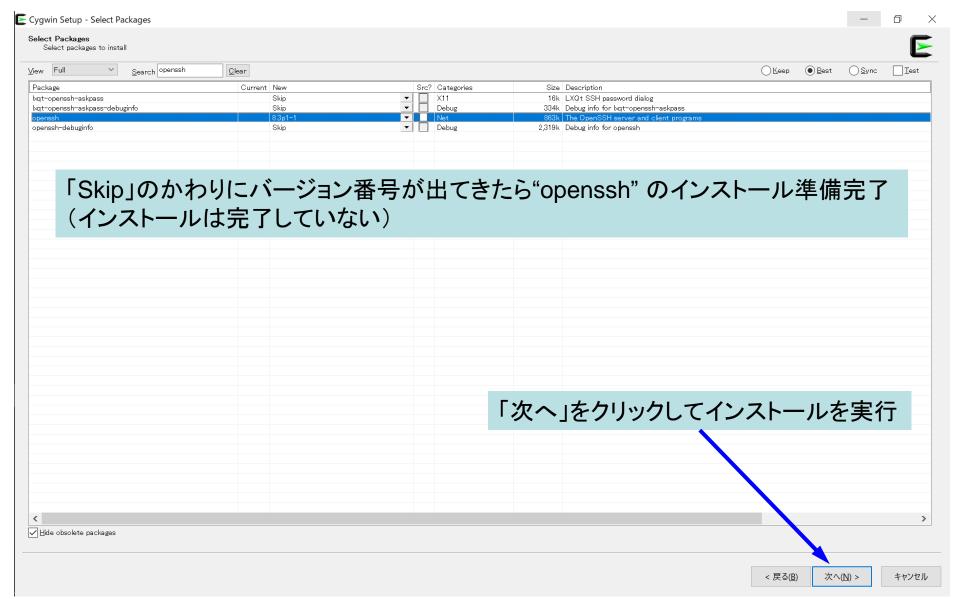
"openssh"のインストール(1/3)



"openssh"のインストール(2/3)



"openssh"のインストール(3/3)



"ssh-keygen (OpenSSH)":インストール の確認

```
$ ssh-keygen --h
ssh-keygen: unknown option -- -
usage: ssh-keygen [-q] [-b bits] [-C comment] [-f output_keyfile] [-m format]
                  [-t dsa | ecdsa | ecdsa-sk | ed25519 | ed25519-sk | rsa]
                  [-N new_passphrase] [-O option] [-w provider]
       ssh-keygen -p [-f keyfile] [-m format] [-N new_passphrase]
                   [-P old passphrase]
       ssh-keygen -i [-f input_keyfile] [-m key_format]
       ssh-keygen -e [-f input_keyfile] [-m key_format]
       ssh-keygen -y [-f input keyfile]
(···)
       ssh-keygen -L [-f input keyfile]
       ssh-keygen -A [-f prefix path]
       ssh-keygen -k -f krl_file [-u] [-s ca_public] [-z version_number]
                  file ...
       ssh-keygen -Q -f krl file file ...
       ssh-keygen -Y find-principals -s signature_file -f allowed_signers_file
       ssh-keygen -Y check-novalidate -n namespace -s signature file
       ssh-keygen -Y sign -f key_file -n namespace file ...
       ssh-keygen -Y verify -f allowed_signers_file -I signer_identity
                -n namespace -s signature file [-r revocation file]
```

"ssh (OpenSSH)":インストールの確認

その他

- Cygwinのインストールに60-90分程度かかる場合もあります
- 週末中にインストールしておくことをお勧めいたします

- Windows 10以降であればCygwinの替わりにWSL(Windows Subsystem for Linux)を使うことも考えられます。
 - Windows, Linuxに詳しい方はお試し頂いても結構ですが OpenSSH等の機能のインストールをご確認ください

- PC上のソフトウェア類の準備
- ・スパコンへのログイン
- ・ログインしたら・・・
- 講習会で使うコミュニケーションツール (Zoom, Slack)の設定
- ・東大情報基盤センターのスパコン

スパコンへのログイン

- SSH公開鍵認証(SSH Public Key Authentication, SSH=Secure Shell)に基づく
 - パスワード認証よりも安全、と言われている
- 手順
 - Windows: Cygwinを立ち上げる, Mac·Unix: Terminal起動
 - ①PC上で鍵(秘密鍵, 公開鍵)を生成する
 - 秘密鍵, 公開鍵
 - パスフレーズ(Passphrase):鍵認証のためのパスワード
 - 2スパコンポータルサイトにログインする
 - センターから供給された利用者ID(tVWXYZ)と「初期パスワード」を使用
 - ポータルサイトにログイン後、パスワード(Password)変更を求められる、字数、 使用文字等に色々規則があるので注意すること
 - ③スパコンポータルサイトに「公開鍵」を登録する
 - ④PCからsshによってスパコンにログインする

①PC上で鍵(秘密鍵, 公開鍵)を生成(1/3)

\$ ssh-keygen -t rsa

```
Generating public/private rsa key pair.

Enter file in which to save the key (/home/user/.ssh/id_rsa):

Enter passphrase (empty for no passphrase): Your Favorite Passphrase

Enter same passphrase again:

Same Passphrase

Your identification has been saved in /home/user/.ssh/id_rsa.

Your public key has been saved in /home/user/.ssh/id_rsa.pub.
```

The key fingerprint is:

SHA256; vt880+PTcscHkOyabvxGjeRsMWLAWds+ENsDcReNwKo nakajima@KNs-NEW-VAIO The key's randomart image is:

操作手順

- ssh-keygen –t rsa <Enter>
- <Enter>
- お好きなPassphrase <Enter>
- 同じPassphrase <Enter>

①PC上で鍵(秘密鍵, 公開鍵)を確認(2/3)

```
$ cd . ssh

$ ls

id_rsa
id_rsa, pub

⇒公開鍵(Private Key)
```

\$ cat id_rsa.pub

ssh-rsa

AAAAB3NzaC1yc2EAAAADAQABAAABAQDa6InmOYYaCrWjQDukjiNEfdW8veUwJyZtEI3oDuOA28 eey6pOwbtI7JB09xnI1707HG4yYvOM81+/nIAHy5tAfJIyOdsPzjTgdTBLdgi3cSf5pWEY6U96 yaEr0Ei8Wge1HkXrhcwUjGDVTzvTORefe6zLdRziL/KNmmesSQfR5IsZ/ihsjMgFxGaKsHHq/IErCtHIIIf9V/Ds2yj6vkAaWH6asBn+ZsRiRFvwHPhkYAnp/j3LY6b8QfqgOp4WZRenh/HgySWTYIGi8x67VzMaUIm9qIKOQFMCaK2rivX1fmbwyWJ/vrWDqiek6YXoxLDu+GPeQ4CPvxJcZnqF9gf3 nakajima@KNs-NEW-VAIO

①公開鍵をコピー(3/3)

```
$ cd .ssh
```

\$ Is

id_rsa id_rsa.pub

\$ cat id_rsa.pub

操作手順

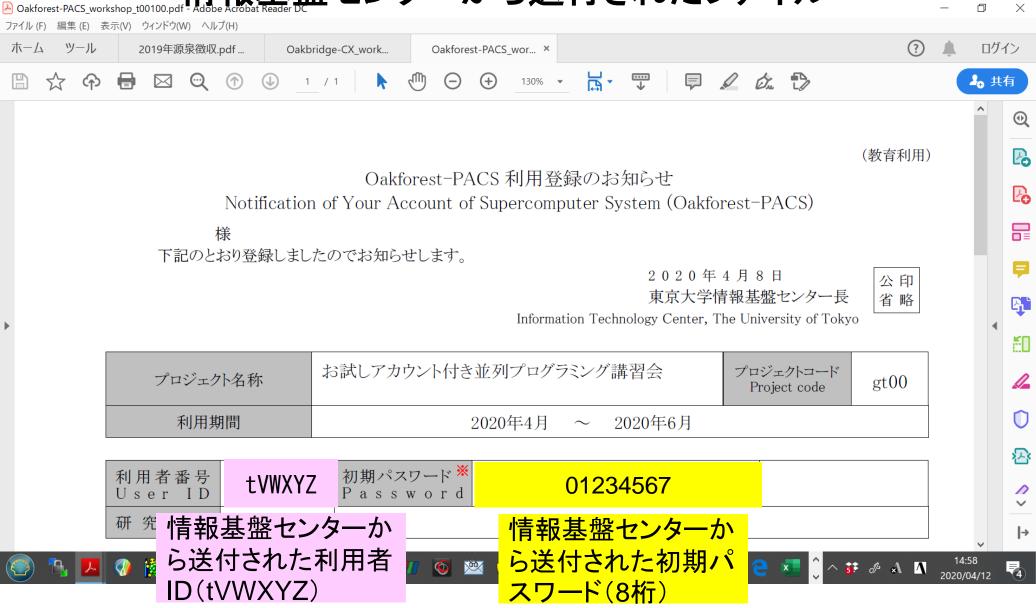
- cat id_rsa.pub <Enter>
- "ssh-rsa"にカーソルを合わせ
- 最後の行の"f3"までを選択して「Copy」によって記憶
- 最後の「nakaima@KNs-NEW-VAIO」まで含んでも良いが、ここに漢字が含まれていると登録に失敗する

ssh-rsa

AAAAB3NzaC1yc2EAAAADAQABAAABAQDa6InmOYYaCrWjQDukjiNEfdW8veUwJyZtEI3oDuOA28 eey6pOwbtI7JB09xnI1707HG4yYvOM81+/nIAHy5tAfJIyOdsPzjTgdTBLdgi3cSf5pWEY6U96 yaEr0Ei8Wge1HkXrhcwUjGDVTzvTORefe6zLdRziL/KNmmesSQfR5IsZ/ihsjMgFxGaKsHHq/IErCtHIIIf9V/Ds2yj6vkAaWH6asBn+ZsRiRFvwHPhkYAnp/j3LY6b8QfqgOp4WZRenh/HgySWTYIGi8x67VzMaUIm9qIKOQFMCaK2rivX1fmbwyWJ/vrWDqiek6YXoxLDu+GPeQ4CPvxJcZnqF9gf3 nakajima@KNs-NEW-VAIO

②スパコンポータルサイトにログイン(1/3)

情報基盤センターから送付されたファイル

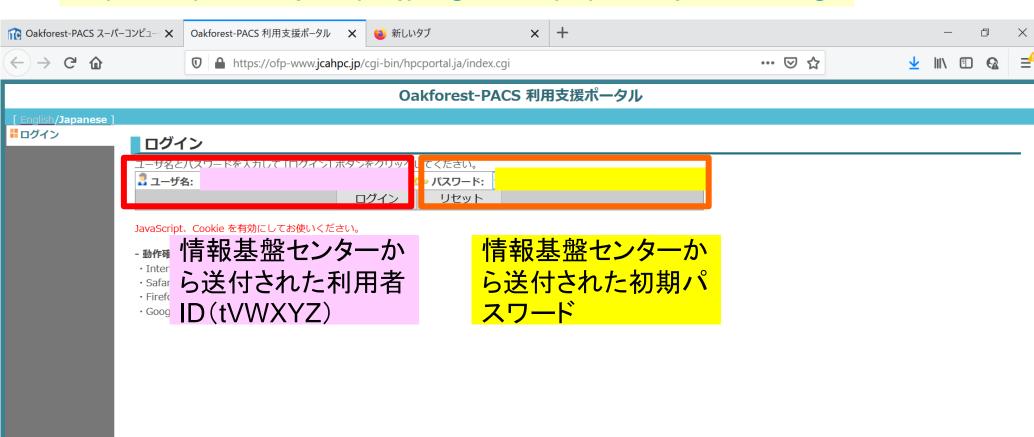


各システム情報・利用支援ポータルサイト

- Reedbush 日本語
 - https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/reedbush/service/
 - https://reedbush-www.cc.u-tokyo.ac.jp/
- Reedbush English
 - https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/en/supercomputer/reedbush/service/
 - https://reedbush-www.cc.u-tokyo.ac.jp/
- Oakforest-PACS(OFP)日本語
 - https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/ofp/service/
 - https://ofp-www.jcahpc.jp/cgi-bin/hpcportal.ja/index.cgi
- Oakforest-PACS(OFP) English
 - https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/en/supercomputer/ofp/service/
 - https://ofp-www.jcahpc.jp/cgi-bin/hpcportal.en/index.cgi
- Oakbridge-CX(OBCX) English
 - https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/
 - https://obcx-www.cc.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/hpcportal.ja/index.cgi
- Oakbridge-CX(OBCX) English
 - https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/en/supercomputer/obcx/service/
 - https://obcx-www.cc.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/hpcportal.en/index.cgi

②スパコンポータルサイトにログイン(2/3)

https://ofp-www.jcahpc.jp/cgi-bin/hpcportal.ja/index.cgi



















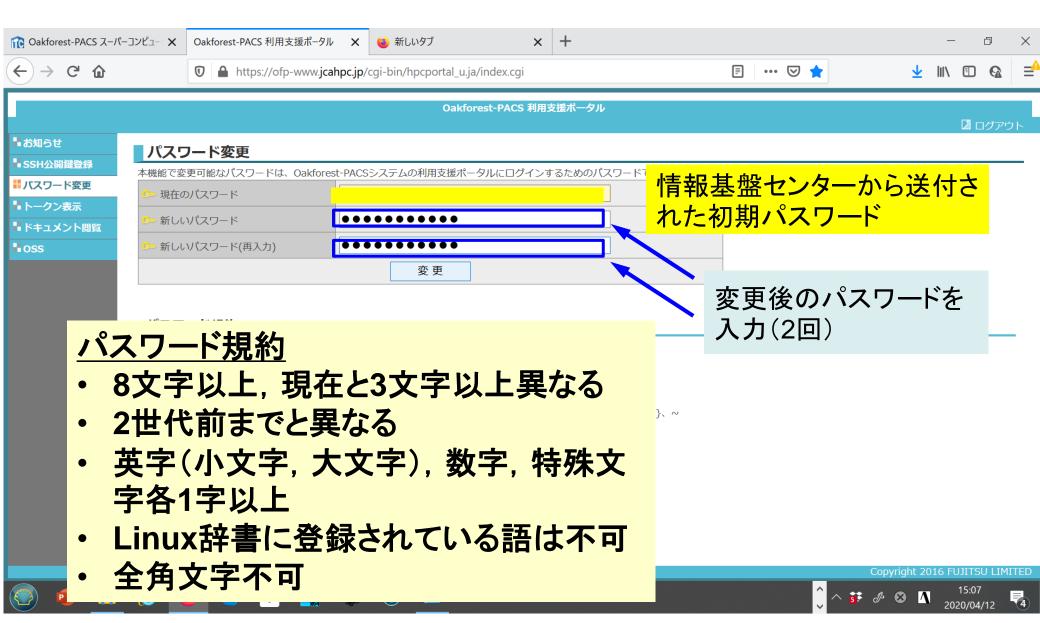




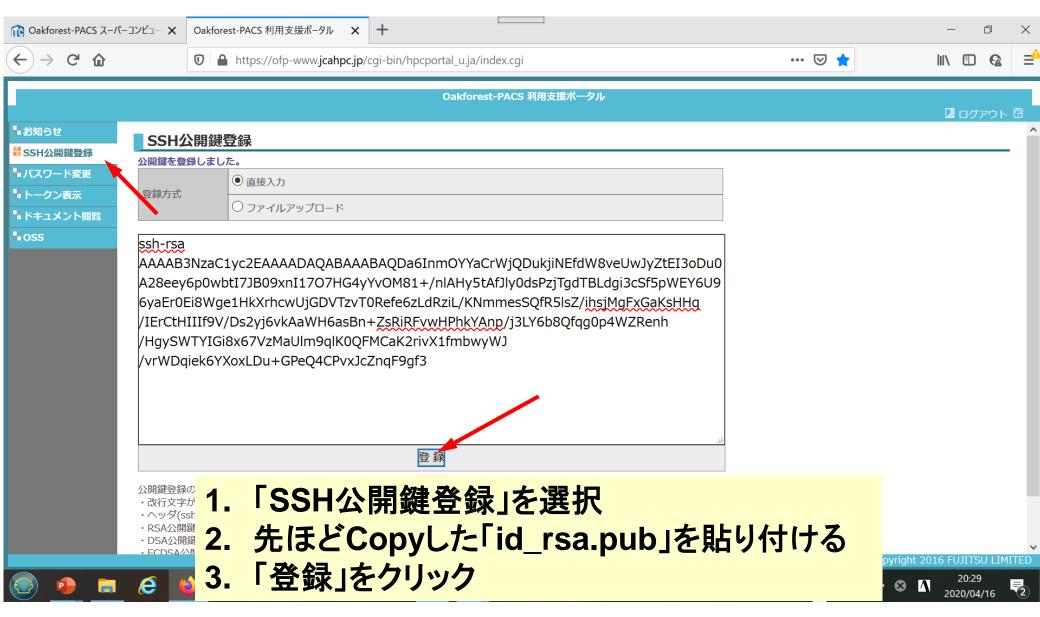




②初期パスワードの変更(3/3)



③ 公開鍵登録(id_rsa.pub)



④PCからログイン(1/2)

Enter

```
$ ssh tVWXYZ@ofp.jcahpc.jp
Enter passphrase for key '/home/user/.ssh/id_rsa: Your Passphrase
```

- 1. ssh tVWXYZ@ofp.jcahpc.jp <Enter>
- 2. 鍵生成時に打ち込んだPassphrase <Enter>

④PCからログイン(2/2)

Last login: Thu Apr 16 20:30:22 2020 from 133.11.59.131

Oakforest-PACS Information Date: Apr. 03, 2020

Welcome to Oakforest-PACS system

* Operation Schedule 04/03(Fri) 17:00 - 04/23(Thu) 09:00 Normal Operation 04/23(Thu) 09:00 - 04/24(Fri) 09:00 HPC Challenge 04/24(Fri) 09:00 - 04/24(Fri) 22:00 System Maintenance 04/24(Fri) 22:00 - Normal Operation

ログインに成功した ら、今後のメインテ ナンスのスケジュー ルなどが表示される

For more information about this service, see https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/schedule.php

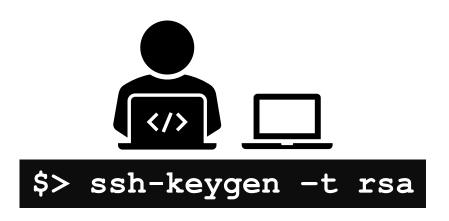
* How to use Users Guide can be found at the User Portal (https://ofp-www.jcahpc.jp/).

If you have any questions, please refer to the following URL and contact us:

https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supports/contact/

[tVWXYZ@ofp01 ~]\$

SSH公開鍵認証の手順(1/4) ①PC上での秘密鍵・公開鍵作成



id_rsa 秘密鍵/Private Key

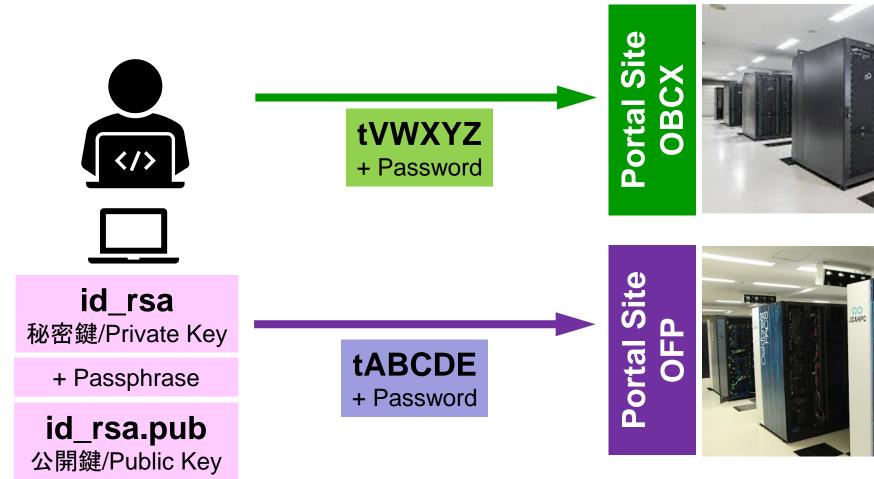
+ Passphrase

id_rsa.pub 公開鍵/Public Key





SSH公開鍵認証の手順(2/4) ②スパコンポータルサイトへのログイン



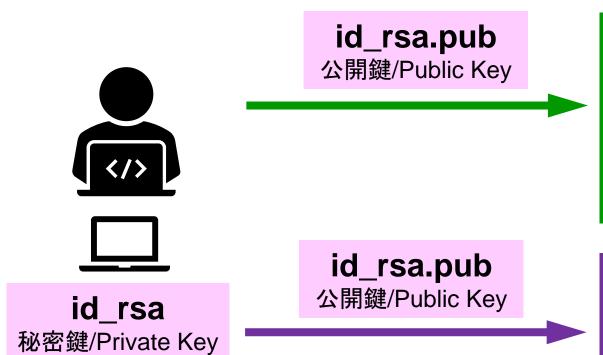
OBCX

OFP

SSH公開鍵認証の手順(3/4)

③公開鍵(id_rsa.pub)の登録

同じ公開鍵を複数のスパコンに登録可能



+ Passphrase

Portal Site OBCX



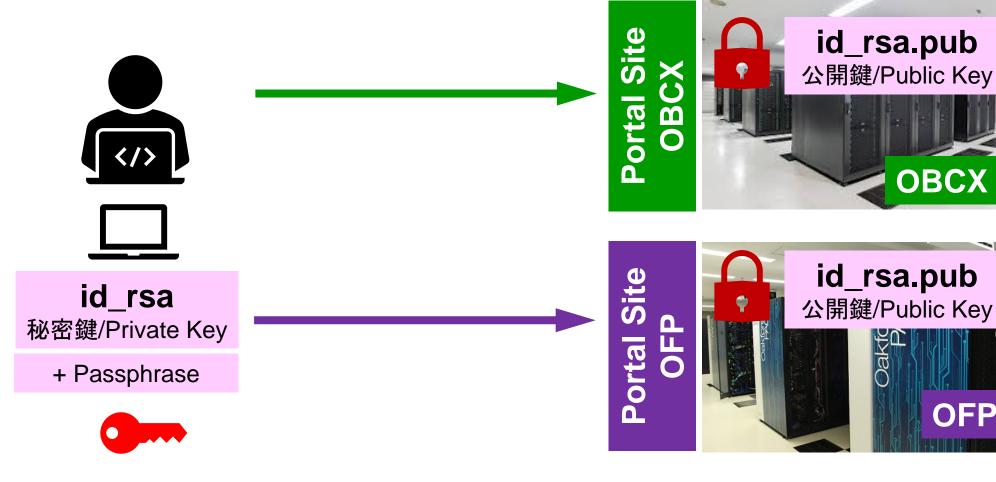
Portal Site OFP



SSH公開鍵認証の手順(3/4)

③公開鍵(id_rsa.pub)の登録

同じ公開鍵を複数のスパコンに登録可能



OBCX

OFP

SSH公開鍵認証の手順(4/4) ④PCからスパコンへのログイン

秘密鍵(id_rsa) + Passphrase







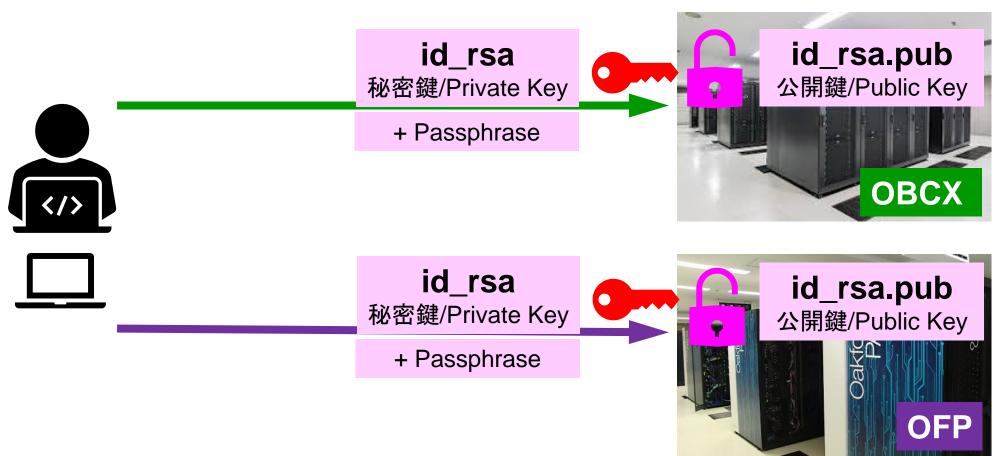
SSH Public Key Authentication SSH公開鍵認証

SSH= Secure Shell

- id_rsa
 - Private Key(秘密鍵):PC上
 - 文字通り「秘密」にしておくこと
 - ・ 他の人に送ってはいけない
 - 基本的には作成した場所からコピーしたり移動することもしないこと
- id_rsa.pub
 - Public Key(公開鍵):スパコン上
 - コピー可能, 他の人にe-mailで送ることも可能
- もし複数のPCからスパコンにログインする場合は、各PCごとに「公開鍵・秘密鍵」のペアをssh-keygenによって作成
 - 各スパコンに複数の公開鍵を登録することは可能
 - スパコン上の公開鍵のうちの一つがPC上の「秘密鍵+ Passphrase」とマッチすると確認されるとログインできる

SSH公開鍵認証の手順(4/4) ④PCからスパコンへのログイン

秘密鍵(id_rsa) + Passphrase



複数のPCからスパコンへログインする場合には各PCで「公開鍵・秘密鍵」のペア作成

\$> ssh-keygen -t rsa







id_rsa

秘密鍵/Private Key

+ Passphrase

id_rsa.pub 公開鍵/Public Key id_rsa

秘密鍵/Private Key

+ Passphrase

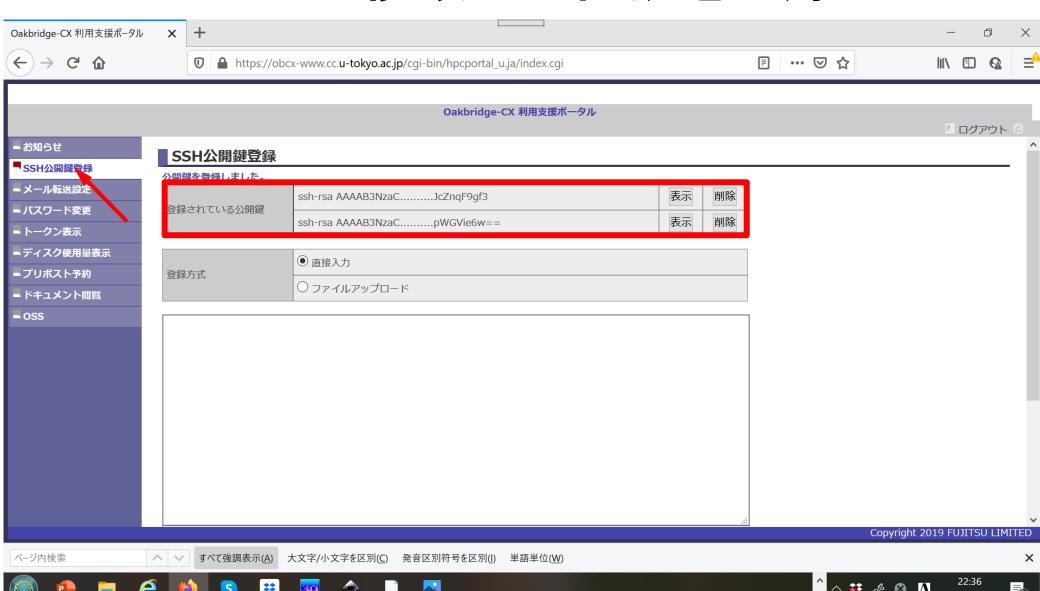
id_rsa.pub 公開鍵/Public Key Portal Site OBCX



Portal Site OFP



スパコンには複数の公開鍵を登録できる



スパコンには複数の公開鍵を登録できる

\$ cd .ssh \$ Is authorized_keys

.ssh/authorized_keysには登録された公開鍵が格納されてい る。このファイルの後ろに新たな公開鍵(new_public.key)を付 け加えることができる。

authorized keys

\$ cat authorized_keys

ssh-rsa

HGCAB3NzaC1yc2EAAAABIwAAAQEA1r0Hr8M1JIJB02n9S0GQm0xzGCwh3PpcJo7Z8oDr6HCAXhbK zHAOibRMJFCwDJCRGNJIYiHEYHWzouuXGNa9teso7aXYkq2Pxb076C60ZCPoLqf/jQRqnUSnjHJ4 UgmDdIQWaAks+q/2ExOwjBB6GZmaHGijTximOFGiM1DI78OHkHC8pFzjvP2kT9yRvykvOVvIG1OV Yi+5CawYfuR0iRBjfUS47RS0ICzjNP20pY057DUCf0v+/8B1+I1wiIbjKQHjuNp5XucIFfFdGaxf JchD/sB5sRxtYfz80xzwGmN8pVecpUjd//xAqdYYHmLAKUE2oH8MnBIRybpWGVie6w64

ssh-rsa

AAAAB3NzaC1yc2EAAAADAQABAAABAQDa6InmOYYaCrWjQDukjiNEfdW8veUwJyZtEI3oDuOA28ee y6p0wbtI7JB09xnI1707HG4yYv0M81+/nIAHy5tAfJIy0dsPzjTgdTBLdgi3cSf5pWEY6U96yaEr OEi8Wge1HkXrhcwUjGDVTzvTORefe6zLdRziL/KNmmesSQfR5IsZ/ihsjMgFxGaKsHHq/IErCtHI IIf9V/Ds2yj6vkAaWH6asBn+ZsRiRFvwHPhkYAnp/j3LY6b8Qfqg0p4WZRenh/HgySWTYIGi8x67 VzMaUlm9qlK0QFMCaK2rivX1fmbwyWJ/vrWDqiek6YXoxLDu+GPeQ4CPvxJcZnqF9gf3

\$ cp authorized_keys tmp
\$ cat tmp new_public.key > authorized_keys

各スパコンに複数の鍵を登録する

ssh-keygen -t rsa







id rsa 秘密鍵/Private Key

+ Passphrase

id_rsa.pub 公開鍵/Public Key id_rsa

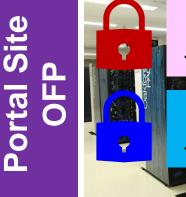
秘密鍵/Private Key

+ Passphrase

id_rsa.pub 公開鍵/Public Key









- PC上のソフトウェア類の準備
- ・スパコンへのログイン
- ・ログインしたら・・・
- 講習会で使うコミュニケーションツール (Zoom, Slack)の設定
- ・東大情報基盤センターのスパコン

PCからログイン

```
$ ssh tVWXYZ@ofp. jcahpc. jp
Enter passphrase for key '/home/user/. ssh/id_rsa:
```

Your Passphrase

Enter

- 1. ssh tVWXYZ@ofp.jcahpc.jp <Enter>
- 2. 鍵生成時に打ち込んだPassphrase <Enter>

ログインしたら

```
pwd
/home/tVWXYZ
 cd /work/gt00/tVWXYZ
/work/gt00/tVWXYZ
                 1. ログインしたら「/home/tVWXYZ」
                   に入る
                 2. /homeは容量が少ないので「
                   /work/gt00/tVWXYZ」に移動す
/home/tVWXYZ
                   ること
                 3. 「cd」でホームに戻れます
```

Copy: PC to OFP

```
$ scp . /a. dat tVWXYZ@ofp. jcahpc. jp:
PC上のCurrent Directoryにある「a. dat」をOFPのホームディレクトリ(
/home/tVWXYZ) の下にコピーする
$ scp . /a. dat tVWXYZ@ofp. jcahpc. jp:/work/gt00/tVWXYZ/test/
PC上のCurrent Directoryにある「a. dat」をOFP上のディレクトリ「
/work/gt00/tVWXYZ/test」の下にコピーする
$ scp -r ./testL tVWXYZ@ofp.jcahpc.jp:
PC上のCurrent Directory下にあるディレクトリ「testL」及びその中身をOFPのホー
ムディレクトリ (/home/tVWXYZ) の下にコピーする
$ scp -r ./testL tVWXYZ@ofp.jcahpc.jp:/work/gt00/tVWXYZ/test
```

PC上のCurrent Directory下にあるディレクトリ「testL」及びその中身をOFP上のデ

ィレクトリ「/work/gt00/tVWXYZ/test」の下にコピーする

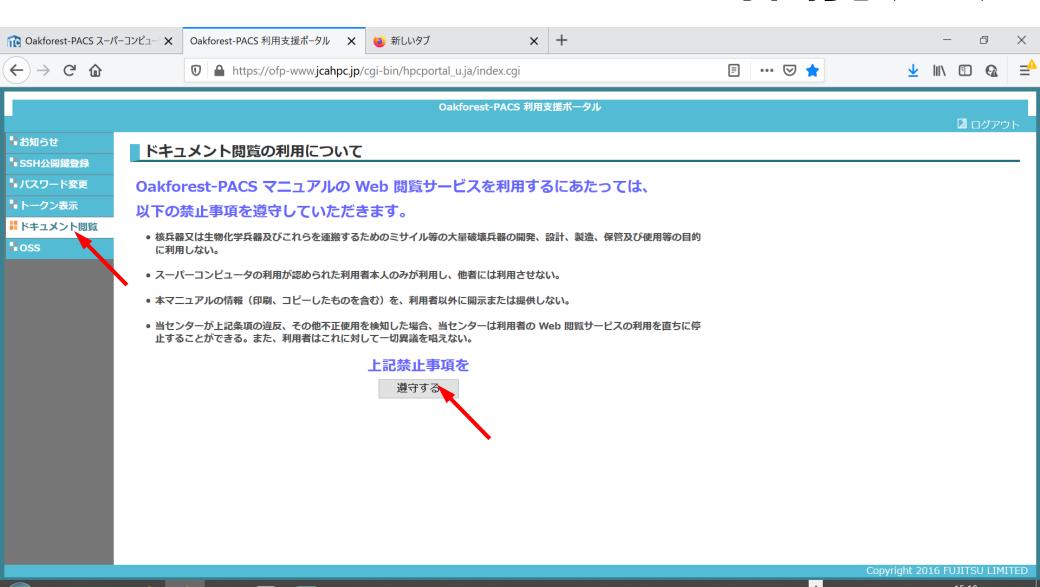
Copy: OFP to PC

```
$ scp tVWXYZ@ofp.jcahpc.jp:~/a.dat ./
OFPのホームディレクトリ (/home/tVWXYZ) 下にある「a. dat」を、PC上のCurrent
Directory下にコピーする
$ scp tVWXYZ@ofp.jcahpc.jp:/work/gt00/tVWXYZ/test/a.dat ./
OFP上のディレクトリ「/work/gt00/tVWXYZ/test/」下にある「a.dat」をPC上の
Current Directory下にあるディレクトリ「L1」にコピーする
$ scp -r tVWXYZ@ofp. jcahpc. jp:~/L1 ./
OFPのホームディレクトリ (/home/tVWXYZ) 下にあるディレクトリ「
/home/tVWXYZ/L1」とその中身を,PC上のCurrent Directory下にあるディレクトリ
「L1」にコピーする
$ scp -r tVWXYZ@ofp.jcahpc.jp:/work/gt00/tVWXYZ/test/L1 ./
```

OFP上のディレクトリ「/work/gt00/tVWXYZ/test/L1」とその中身をPC上のCurrent

Directory下にあるディレクトリ「L1」にコピーする

ポータルサイトでのマニュアル等閲覧(1/2)



ポータルサイトでのマニュアル等閲覧(2/2)



- PC上のソフトウェア類の準備
- ・東大情報基盤センターのスパコン
- ・スパコンへのログイン
- ・ログインしたら・・・
- ・講習会で使うコミュニケーションツール (Zoom, Slack)の設定

Zoomの準備

- ダウンロード:
 https://zoom.us/download#client_4meeting
- クライアントを事前にインストールしてください。
 - 今回、各自のZoomアカウントを作る必要はありません。
- インストール済みの方は、必ず最新バージョンに更新してください。
 - 4/20現在、5.6.3
 - バージョン5でないと接続できません!!
- 使い方:
 https://utelecon.adm.u-tokyo.ac.jp/zoom/how_to_use

Slackの登録

- 質疑応答には、Slackを使います。
- ・ 講習会開始2時間前までに準備してください。
 - 会議室に入室するためのリンクは事前にお送りしています。
 - 専用アプリもありますが、今回の講習会のみであれば、 Webブラウザで十分です。
- 本講習会に関連する質問は、Slack中の #第153回-mpi基礎 チャンネルでお願いします。

- PC上のソフトウェア類の準備
- ・スパコンへのログイン
- ・ログインしたら・・・
- 講習会で使うコミュニケーションツール (Zoom, Slack)の設定
- ・東大情報基盤センターのスパコン

3システム: 利用者2,600+, 学外55+%

- Reedbush (HPE, Intel BDW + NVIDIA P100 (Pascal))
 - データ解析・シミュレーション融合スーパーコンピュータ
 - 3.36 PF, 2016年7月~ 2021年11月末(予定)
 - Reedbush-H(2GPU's/n), Reedbush-L(4GPU's)
 - 東大ITC初GPUクラスタ (2017年3月より), DDN IME (Burst Buffer)



- JCAHPC (筑波大CCS&東大ITC)
- 25 PF, TOP500で22位(日本4位)(2020年11月)
- Omni-Path アーキテクチャ, DDN IME (Burst Buffer)
- Oakbridge-CX (富士通, Intel Xeon Platinum 8280)
 - 大規模超並列スーパーコンピュータシステム
 - 6.61 PF, 2019年7月 ~ 2023年6月,
 TOP500で69位(2020年11月)
 - 全1,368ノードの内128ノードにSSDを搭載



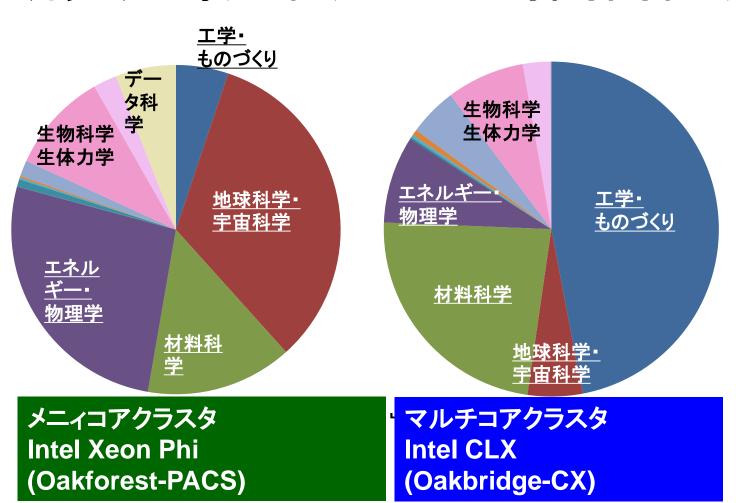




GFLOPS当たり利用負担(円):電気代, GFLOPS/W(Green 500)

System	JPY/GFLOPS Small is Good	GFLOPS/W Large is Good
Oakleaf-FX/Oakbridge-FX (Fujitsu) (Fujitsu SPARC64 IXfx)	125	0.8663
Reedbush-U (HPE) (Intel BDW)	61.9	2.310
Reedbush-H (HPE) (Intel BDW+NVIDIA P100x2/node)	15.9	8.575
Reedbush-L (HPE) (Intel BDW+NVIDIA P100x4/node)	13.4	10.167
Oakforest-PACS (Fujitsu) (Intel Xeon Phi/Knights Landing)	16.5	4.986
Oakbridge-CX (Fujitsu) (Intel Cascade Lake (CLX))	20.7	5.076

研究分野別利用CPU時間割合(2020年度)



- 工学・ものつくり
- 地球科学・宇宙科学
- ■材料科学
- ■エネルギー・物理学
- 情報科学:システム
- 情報科学:アルゴリズム
- 情報科学:AI
- ■教育
- 産業利用
- 生物科学・生体力学
- バイオインフォマティクス
- 社会科学・経済学
- データ科学・データ同化

研究分野別利用CPU時間割合(2020年度)

