

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

第193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」

東京大学情報基盤センター 特任助教 河合 直聡

講習会概略

- ▶ **開催日**：2022年10月20日（木）13:00 - 16:30
場所：Online開催
- ▶ **講習会プログラム**：
- ▶ 10月20日（木）
 - ▶ 13:00 - 13:15 **システム紹介**（講師：河合）
 - ▶ 13:15 - 14:15 **スパコンと線形計算ライブラリ(BLAS, LAPACK)**（講師：河合）
 - ▶ 14:15 - 14:30 **休憩 & 質問**
 - ▶ 14:30 - 15:45 **Xcryptを用いたジョブ並列処理**（講師：平石）
 - ▶ 15:45 - 16:30 **実習 & 質問**

■講習会資料：

Webページ「**第193回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会**」
で**講習会資料をダウンロード**することができます

講習会の進め方

- ▶ Zoomを利用したオンライン講習会です
 - ✓ この講義は録画されています
 - ✓ 質問があるとき以外はミュートでお願いします
 - ✓ ビデオもオフを推奨します
- ▶ 基本的にはSlackを使って質問に対応します
 - ✓ Slackに未登録の場合はなるべく早く登録をお願いします
 - ✓ slackの登録メールの配送に小一時間かかることがあります
 - ✓ 「cc-lecture140.slack.com」のチャンネルを使ってください
 - ✓ 必要に応じてスクリーンショットなどで画像を共有してください
 - ✓ Windows: Alt + PrtScn で作業中ウィンドウのショットがクリップボードにコピーされます。Slackのチャット部分で貼り付け(Ctrl + V)
 - ✓ Mac : command + shift + control + 4 の同時押し、その後撮りたいウィンドウ上でspaceを押すことで、スクリーンショットがクリップボードにコピーされます。Slackのチャット部分で貼り付け(command + V)
 - ✓ こちらが気づくために、Zoomのチャットにも一言書いてください
 - ✓ 質問本体はSlackにお願いします。

アンケートへ回答のお願い

- ▶ 第193回講習会「科学技術計算の効率化入門」アンケートQRコード



東大センターのスパコン

3基の大型システム, 6年サイクル (?)

FY

11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22 23 24 25

**Yayoi: Hitachi SR16000/M1
IBM Power-7**
54.9 TFLOPS, 11.2 TB

JCAHPC:
Tsukuba, Tokyo

**T2K Tokyo
Hitachi**
140TF, 31.3TB

Oakforest-PACS (OPF)
Fujitsu, Intel Xeon Phi
25PFLOPS, 919.3TB

Big Data & Extreme
Computing

**Oakleaf-FX: Fujitsu PRIMEHPC
FX10, SPARC64 IXfx**
1.13 PFLOPS, 150 TB

Wisteria/BDEC-01
A64FX / Xeon + A100
33.1 PFLOPS

Oakbridge-FX
136.2 TFLOPS, 18.4 TB

Oakbridge-CX
Intel Xeon CLX
6.61 PFLOPS

Integrated Supercomputer
System for Data Analyses &
Scientific Simulations

Reedbush-U/H, HPE
Broadwell + Pascal
1.93 PFLOPS

Supercomputer System with
Accelerators for Long-Term
Executions

Reedbush-L HPE
1.43 PFLOPS



本講習会で利用するスーパーコンピュータ

■Oakbridge-CX (富士通, Intel Xeon Platinum 8280)

・6.61 PF ・全1,368ノードの内128ノードにSSDを搭載



スーパーコンピュータシステムの詳細

▶ 以下のページをご参照ください

- ▶ 利用申請方法
- ▶ 運営体系
- ▶ 料金体系
- ▶ 利用の手引

などがご覧になれます。

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/obcx/service/>

ログインしたら

```
$ pwd 
```

```
/home/t00***
```

```
$ cd /work/gt00/t00*** 
```

```
$ pwd 
```

```
/work/gt00/t00***
```

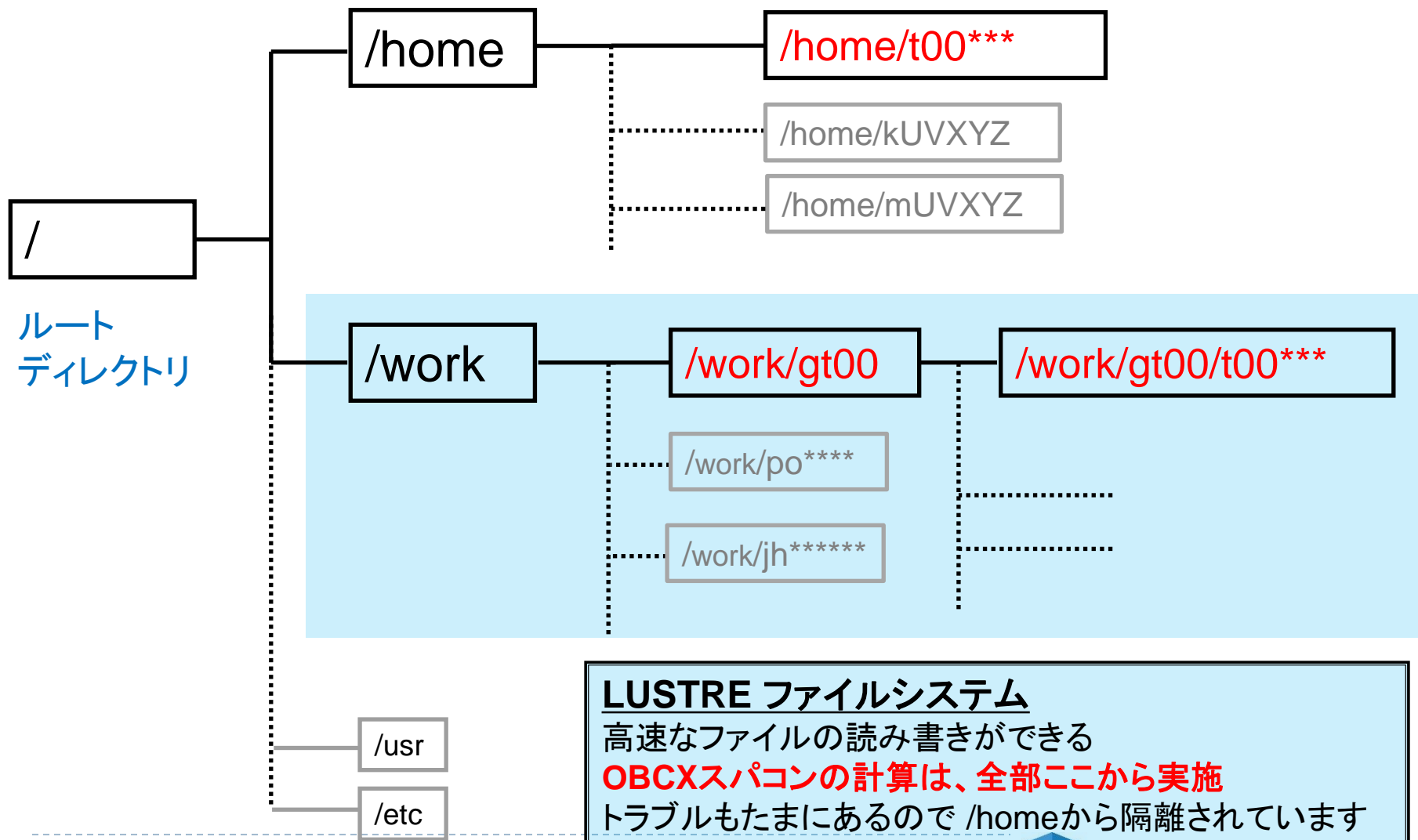
```
$ cd 
```

```
$ pwd 
```

```
/home/t00***
```

1. ログインしたら「/home/t00***」にいます
2. /homeは容量が少ないので「/work/gt00/t00***」に移動
3. 「cd」でhomeに戻れます

OBCXのディレクトリ構成



LUSTRE ファイルシステム

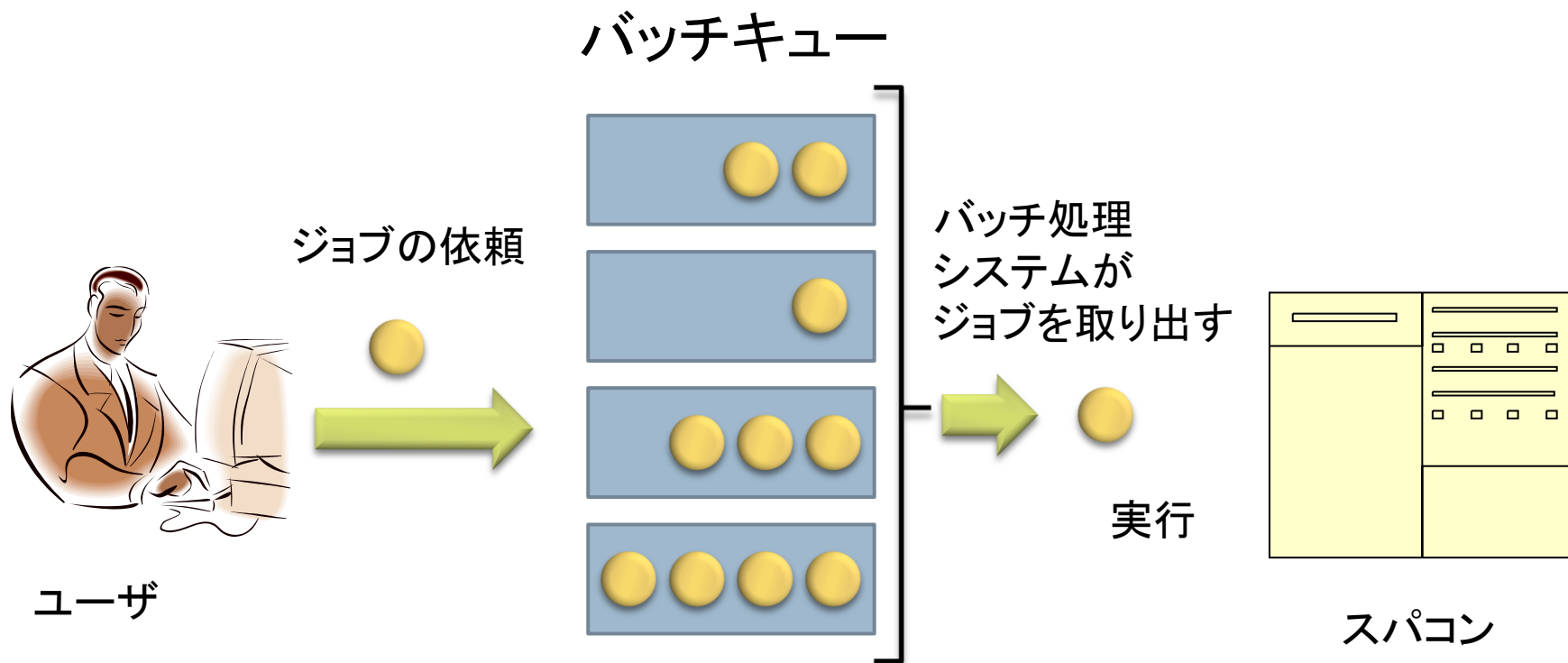
高速なファイルの読み書きができる

OBCXスパコンの計算は、全部ここから実施

トラブルもたまにあるので /homeから隔離されています

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。



バッチ処理を用いたジョブの実行方法

▶ 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 -g gt00
#PJM -L node=1
#PJM --omp thread=10
#PJM -L elapse=00:01:00
#PJM -j

./hello
```

キュー名
:lecture

利用グループ名
:gt00

ジョブスクリプトファイルの例: run.sh

ジョブ待ち時間を減らすポイント

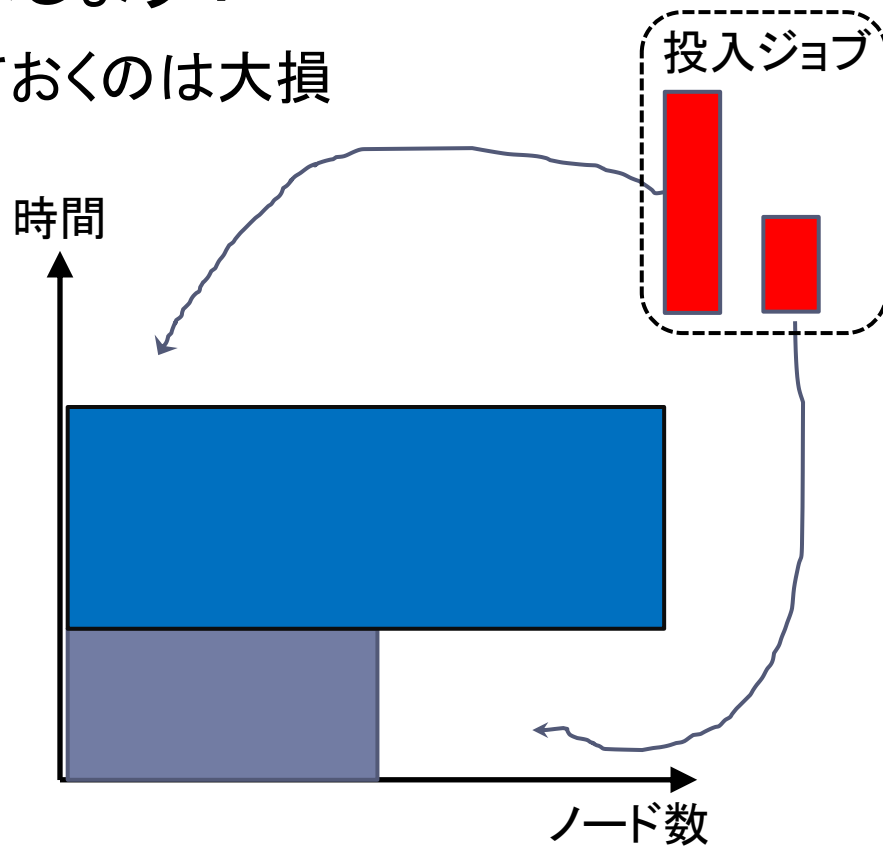
▶ 「elapse」を適切に設定しましょう！

- ・とりあえずと、最大時間を書いておくのは大損

```
#!/bin/bash
#PJM -L rscgrp=lecture
#PJM -g gt00
#PJM -L node=1
#PJM --omp thread=10
#PJM -L elapse=00:01:00
#PJM -j

./hello
```

ジョブスクリプトファイルの例



Backfillのイメージ図

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8ノード(448コア) まで

- ▶ **本演習時間以外のキュー名：**
 - ▶ **lecture**
 - ▶ 利用条件は演習中のキュー名と同様

ジョブの管理コマンド

以下のコマンドを使用して、ジョブの投入、削除、確認を行う

コマンド	内容	使い方
pjsub	ジョブの投入	\$pjsub “script.sh”
pjdel	ジョブの削除	\$pjdel “job ID”
pjstat	ジョブの状態	\$pjstat

注* これらのコマンドはスパコンによって異なる

pjstatのオプション

- -H : 終了したジョブの確認
- --rsc -b : 各リソースグループの混雑具合を確認可能
- --rsc -x : 各リソースグループで要求可能なリソース量を出力



pjstat --rsc -b の実行画面例

```
$ pjstat --rsc -b
```

RSCGRP	STATUS	TOTAL	RUNNING	QUEUED	HOLD	OTHER	NODE
debug	[ENABLE, START]	3	3	0	0	0	192
short	[ENABLE, START]	106	33	68	5	0	72
regular							
---- small	[ENABLE, START]	4614	90	4510	14	0	1031
---- medium	[ENABLE, START]	47	4	42	1	0	1031
---- large	[ENABLE, START]	7	0	7	0	0	1031
`---- x-large	[ENABLE, START]	1	1	0	0	0	1031
interactive							
---- interactive_n1	[ENABLE, START]	0	0	0	0	0	192
`---- interactive_n8	[ENABLE, START]	0	0	0	0	0	192
lecture	[ENABLE, START]	0	0	0	0	0	32
tutorial	[DISABLE, STOP]	0	0	0	0	0	97

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

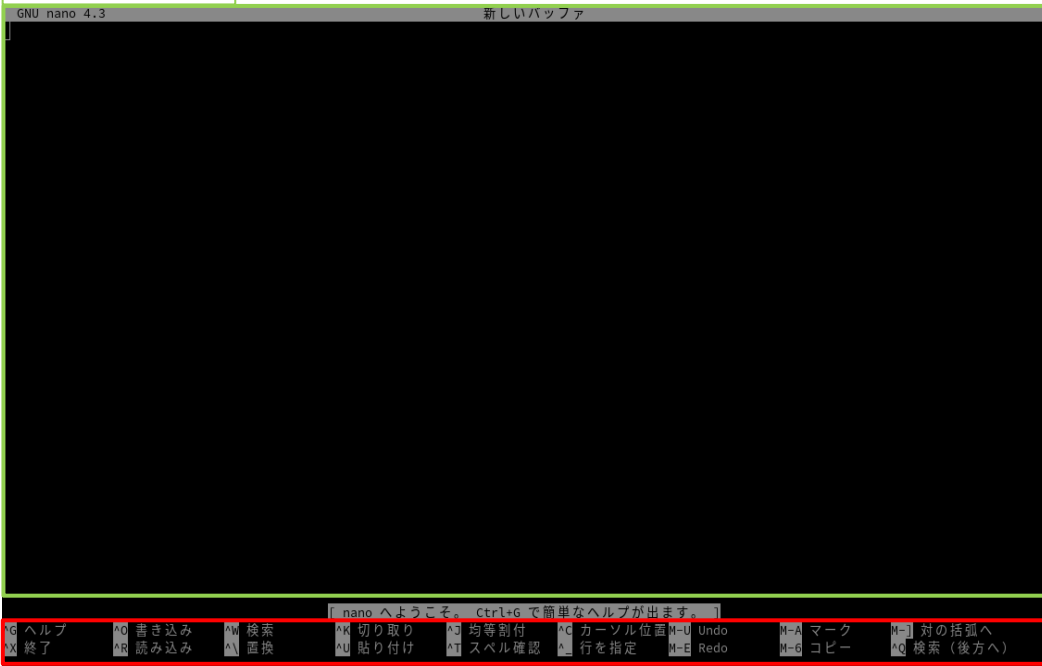
待たされて
いるジョブ
の数

ノードの
利用可能
数

Nano (OBCX上で使えるエディタ)

Nanoの基本的な操作方法について

編集画面



コマンド確認画面

- ^ → Ctrl
- M → Esc
- - → 順次押す

\$nano で起動

- ^G → CtrlとGキーを同時押し
- M-U → Escキー、Uキーを順番に押す

操作	コマンド
ファイルを開く	^R
別名保存	^O ファイル名 Ret
上書き保存	^O
マーク	M-A
マークキャンセル	M-A
コピー	M-6
切り取り	^K
貼り付け	^U
検索	^W
終了	^X