

第207回 お試しアカウント付き
並列プログラミング講習会

UTokyo N-Ways to GPU Programming Bootcamp

東京大学 情報基盤センター

担当：下川辺 隆史

shimokawabe @ cc.u-tokyo.ac.jp

(内容に関するご質問はこちらまで)

講習会スケジュール

■ プログラム

✓ 6月21日 (水) 10:00 - 17:00

- ✓ 10:00 - 10:05 事務連絡
- ✓ 10:05 - 10:30 Wisteria/BDEC-01 使い方講座
- ✓ 10:30 - 11:00 GPU コンピューティング入門
- ✓ 11:00 - 12:00 C++ および Fortran 標準言語プログラミング
- ✓ 12:00 - 13:00 昼食
- ✓ 13:00 - 14:30 OpenACC プログラミング
- ✓ 14:30 - 16:30 CUDA C/Fortran プログラミング
- ✓ 16:30 - 16:45 コードチャレンジの説明
- ✓ 16:45 - 17:00 質疑応答、事務連絡

✓ 7月5日 (水) 10:00 - 11:00 (参加任意)

- ✓ 10:00 - 11:00 コードチャレンジの解説と質疑

■ 形態

ZoomとSlackを用いたオンライン講習会

講習会について

■その他の講習会

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/>

- ✓ 他の講習会も開催しております。
- ✓ 他の多くの講習会はサンプルコードを用いて座学と実習を行うものです。

■スパコンイベント情報メール配信サービス

<https://regist.cc.u-tokyo.ac.jp/announce/>

- ✓ 講習会や研究会の案内、トライアルユースの実施のお知らせなどを配信しています。

■GPU移行ポータルサイト

https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/gpu_porting.php

■GPU移行相談会

https://jcahpc.github.io/gpu_porting/#gpu移行相談会

- ✓ QFP-IIの利用開始（2025年1月運用開始予定、NVIDIA H100またはその後継機種搭載）に向け、GPU移行に関する様々な疑問をGPU計算に実際に取り組んでいる研究者や技術者（チューター）と直接相談できる相談会を定期的を開催します。
- ✓ 次回は、**7月5日（水）13時-15時**

お願い等

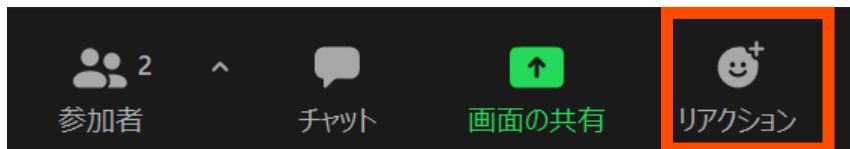
- ハンズオンのためのPC, Zoom及びスパコンへ接続するためのネットワーク環境は各受講者でご準備ください。
- PCは Windows/Microsoft Update, Apple Security Updateなどで最新のセキュリティアップデートを行ってください。
- 必ずウィルス対策ソフトウェアをインストールし, ウィルス検索を実行して問題がないことを事前に確認してから受講してください。
 - セキュリティ対策未実施の場合はオンライン講習会受講を認めません。
- OSは、Windows、Macどちらでも構いませんが、SSH (Secure Shell)を用いてセンターのスーパーコンピ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2か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。

Zoom関連

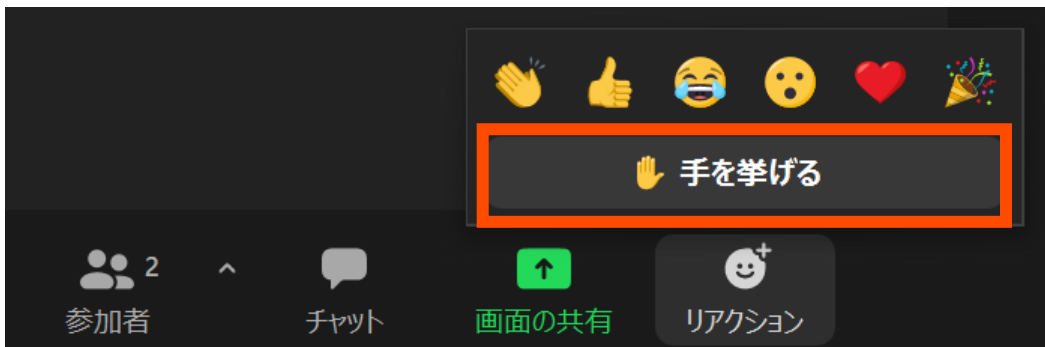
- 「手をあげる」機能
 - 質問がある際, 全体の状況を確認するため使用
- ブレークアウトセッション
 - 画面を共有しながらエラー対応する際に使用
 - (なるべく口頭でのやりとりやSlackで対応する予定)
- https://utelecon.adm.u-tokyo.ac.jp/zoom/how_to_use

「手を挙げる」方法

1. Zoomメニュー中の「リアクション」をクリック

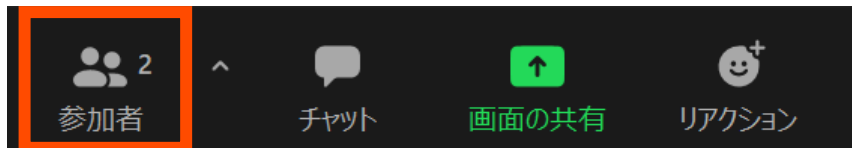


2. ポップアップで表示された「手を挙げる」をクリック

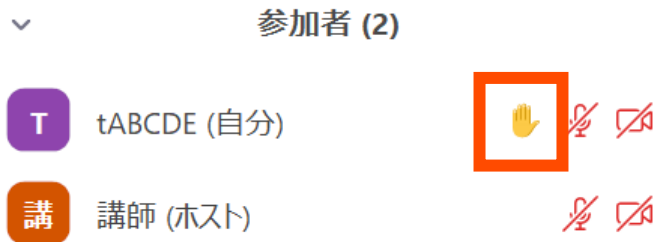


手が挙がっていることの確認方法

1. Zoomメニュー中の「参加者」をクリックして、参加者一覧を表示

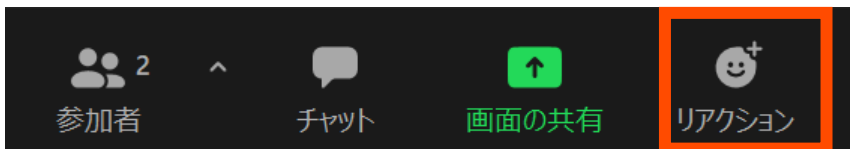


2. 表示された参加者一覧の、自分のところを見ると手が挙がっている



「手を降ろす」方法

1. Zoomメニュー中の「リアクション」をクリック

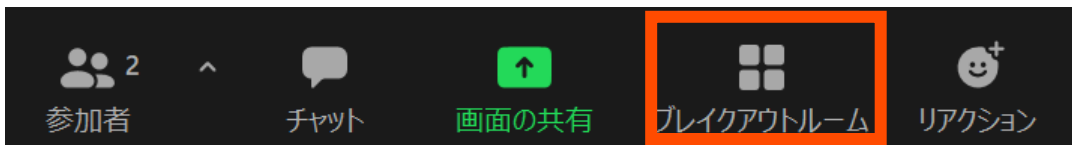


2. ポップアップで表示された「手を降ろす」をクリック



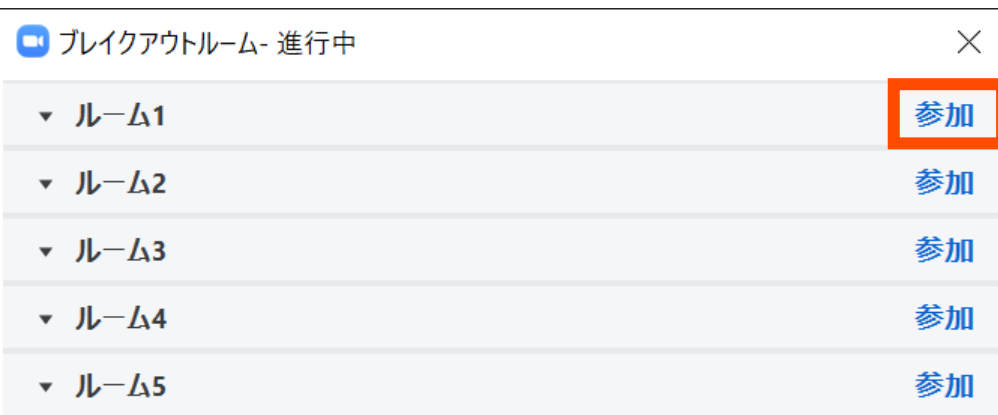
ブレイクアウトルーム (1/6)

- 演習時に使用するかもしれません
- 演習中に「ヘルプを求める」ことができます
 - ホストを招待した後に「画面を共有」することで、皆さんの記述したプログラムを一緒に見ながら問題解決にあたります
- Zoomメニュー中の「ブレイクアウトルーム」をクリック



ブレイクアウトルーム (2/6)

- 進行中のブレイクアウトルームのリストが表示されるので、空いている部屋に「参加」してください
 - 左の例では5部屋がすべて空室、右の例ではルーム1のみ参加者がいる



ブレイクアウトルーム- 進行中

▼ ルーム1	参加
▼ ルーム2	参加
▼ ルーム3	参加
▼ ルーム4	参加
▼ ルーム5	参加



ブレイクアウトルーム- 進行中

▼ ルーム1	参加
● tABCDE	
▼ ルーム2	参加
▼ ルーム3	参加
▼ ルーム4	参加
▼ ルーム5	参加

ブレイクアウトルーム (3/6)

- 「参加」をクリックすると確認画面が出てくるので、「はい」を選択すると入室できます



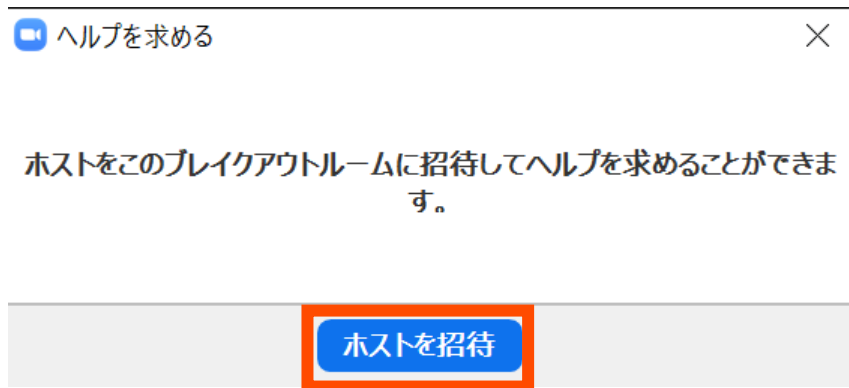
ブレイクアウトルーム (4/6)

- 再度メニュー中の「ブレイクアウトルーム」をクリックすると、「ヘルプを求める」が増えているのでクリックしてください




ブレイクアウトルーム (5/6)

- ポップアップで出てきた「ホストを招待」をクリック
- ホスト（講師）の参加待ちに移行します（画面はそのまま）
 - 他の受講者のヘルプ中など、直ちに対応できない場合もあります



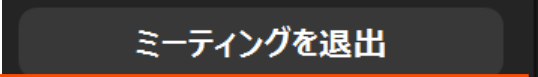
ブレイクアウトルーム (6/6)

- 問題解決後は、Zoomメニュー中の「ルームを退出する」

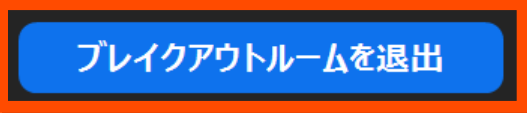


ルームを退出する

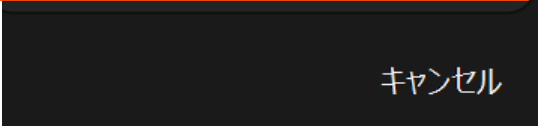
- 「ブレイクアウトルームを退出」が表示されるのでクリックして、元の講習会会場にお戻りください
 - 間違えて「ミーティングを退出」すると講習会から退出します



ミーティングを退出



ブレイクアウトルームを退出



キャンセル

Slack関連

- ブラウザ上で使う場合には：
 - <https://w1590055008-bgo338004.slack.com/archives/C05CMBRG3QB>
 - 注：ログインには，事前にお配りしたリンクからの登録が必要です
- 質問対応に使用
- コードの貼り付け方
- スレッドの確認方法

- 以下，ブラウザ版で説明しますがアプリ版でも操作は同じです



🔍 スレッド
🗂️ すべてのDM
@ メンション & リアクション
🔗 Slack コネクト
⋮ その他

▼ チャンネル

general
random
第133回-gpuプログラミン...
第141回-mpi基礎
第153回-mpi基礎
第156回-wisteria実践
第161回-wisteria実践
第165回-mpi基礎
第170回-wisteria実践
第207回-utokyo-n-ways-...

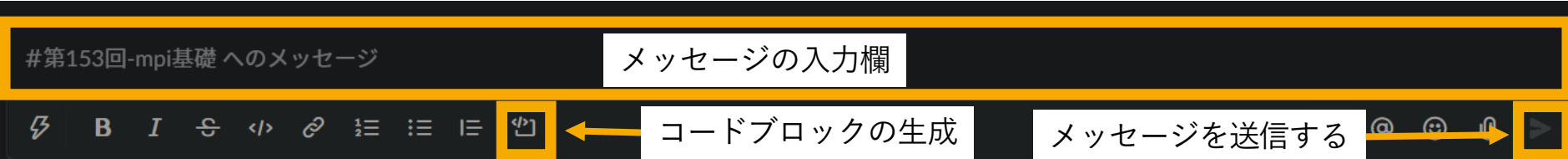
+ チャンネルを追加する

質疑応答チャンネルへの移動

- 左側のメニューバーのチャンネル一覧内に「第207回-」があるので、クリック
- 表示されていない場合
 1. 「チャンネルを追加する」をクリック
 2. 「チャンネル一覧を確認する」をクリック
 3. 「**第207回-utokyo-n-ways-to-gpu-programming-bootcamp**」があるので、「参加する」をクリック

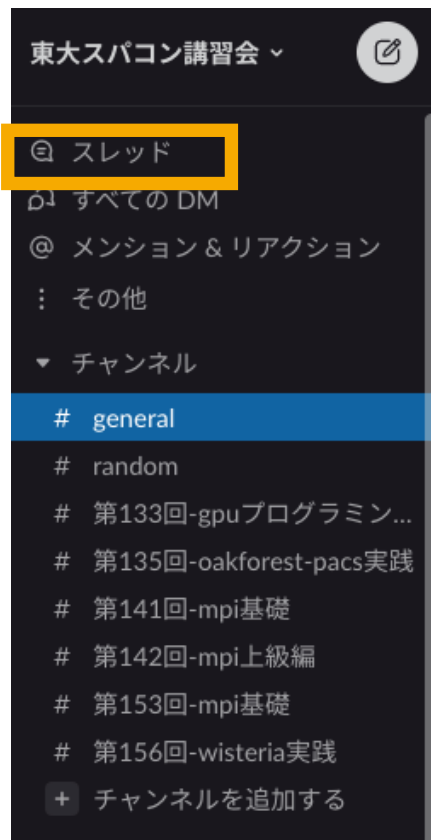
メッセージの入力方法

- 最下部に入力欄があるので、質問内容を記載して Ctrl+Enter
 - 入力後に右下の「メッセージを送信する」をクリックしても同じ（メッセージ入力前には、「メッセージを送信する」は押せない）



- コードを入力する際には、「コードブロック」がおすすめ
 - 枠が生成されるので、この中にコピペするのが簡単かつ見やすい
 - `` (JIS配列ならばShift+@を3連打) しても枠が生成される

自分が参加したスレッドのみの表示方法



- 左上の「スレッド」をクリックすると、自分が参加しているスレッドの一覧が表示されます
- 質問内容には、「スレッドで返信する」形式で回答するので、自分が聞いた内容のみが表示できます

Wisteria/BDEC-01

2001-2005

2006-2010

2011-2015

2016-2020

2021-2025

2026-2030

Hitachi SR8000
1,024 GF

Hitachi SR11000
J1, J2
5.35 TF, 18.8 TF

Hitachi SR16K/M1
Yayoi
54.9 TF

Hitachi SR2201
307.2GF

Hitachi SR8000/MPP
2,073.6 GF

OBCX
(Fujitsu)
6.61 PF

Hitachi HA8000
T2K Today
140 TF

Oakforest-PACS
(Fujitsu)
25.0 PF

OFF-II
150+ PF

Fujitsu FX10
Oakleaf-FX
1.13 PF

Wisteria
BDEC-01 Fujitsu
33.1 PF

BDEC-02
250+ PF

東京大学情報基盤
センターのスパコン
利用者2,600+名
55%は学外

Reedbush-
U/H/L (SGI-
HPE)
3.36 PF

Ipomoea-01 25PB

Ipomoea-03

Ipomoea-02

2001-2005

2006-2010

2011-2015

2016-2020

2021-2025

2026-2030

Hitachi SR8000

1.024 PF
SR8000

Hitachi SR11000
J1, J2

IBM Power5+

Hitachi SR16K/M1
Yvesi

IBM Power7

Hitachi SR2201

HARP-1E

Hitachi SR8000/MPP

SR8000

Hitachi HA8000
T2K Today
140 TF

AMD Opteron

Oakforest-PACS (Fujitsu)
25.0 PF

Intel Xeon Phi

OFF-II
150+ PF

Accelerators

疑似ベクトル

汎用CPU

加速装置付

Fujitsu FX10
Oakleaf-FX
1.13 PF

SPACR64 IXfx

Reedbush-U/H/L (SGI-HPE)
3.36 PF

Intel BDW +
NVIDIA P100

Wisteria BDEC-01 Fujitsu
33.1 PF

A64FX,
Intel Icelake+
NVIDIA A100

BDEC-02
250+ PF

Accelerators

Ipomoea-01 25PB

Ipomoea-03

Ipomoea-02



**Wisteria
BDEC-01**

Platform for Integration of (S+D+L)
Big Data & Extreme Computing

Shared File System (SFS)
25.8 PB, 500 GB/s

Simulation Nodes: Odyssey

Fujitsu/Arm A64FX
25.9PF, 7.8 PB/s

2.0 TB/s

Data/Learning Nodes: Aquarius

Intel Ice Lake + NVIDIA A100
7.20 PF, 578.2 TB/s

800 Gbps

Fast File System (FFS)
1 PB, 1.0 TB/s

External Resources



External Network



External Resources



**Wisteria
BDEC-01**



**Wisteria
BDEC-01**

Simulation Nodes (Odyssey)

2023/02/1

Data/Learning Nodes (Aquarius)

UTokyo N-Ways to GPU Programming Bootcamp



東京大学
THE UNIVERSITY OF TOKYO



東京大学情報基盤センター
INFORMATION TECHNOLOGY CENTER, THE UNIVERSITY OF TOKYO

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
- 2016年7月～2021年11月末(引退)
- 東大ITC初のGPUクラスタ, ピーク性能3.36 PF

Oakforest-PACS (OFP) (Fujitsu, Intel Xeon Phi (KNL))

- JCAHPC (筑波大CCS・東大ITC), 2016年10月～2022年3月末(予定)
- 25 PF, #39 in 58th TOP 500 (November 2021)

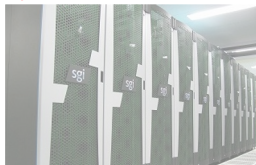
Oakbridge-CX (OBCX) (Fujitsu, Intel Xeon CLX)

- 2019年7月～2023年9月末(予定)
- 6.61 PF, #110 in 58th TOP500-Sep 2023 (Plan)



Wisteria/BDEC-01 (Fujitsu)

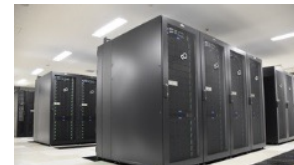
- シミュレーションノード群(Odyssey) : A64FX (#17)
- データ・学習ノード群(Aquarius) : Intel Icelake+NVIDIA A100) (#106)
- 33.1 PF, #13 in 57th TOP 500, 2021年5月14日運用開始
- 「計算・データ・学習(S+D+L)」融合のためのプラットフォーム
- 革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」
(科研費基盤(S) 2019年度～2023年度)



Reedbush



Oakforest-PACS



Oakbridge-CX

★ 柏キャンパス
OFF, OBCX

★ 柏IIキャンパス
Wisteria/BDEC-01, mdx
ABCI/ABCI-II

★ 柏の葉キャンパス

TX「柏の葉キャンパス」駅

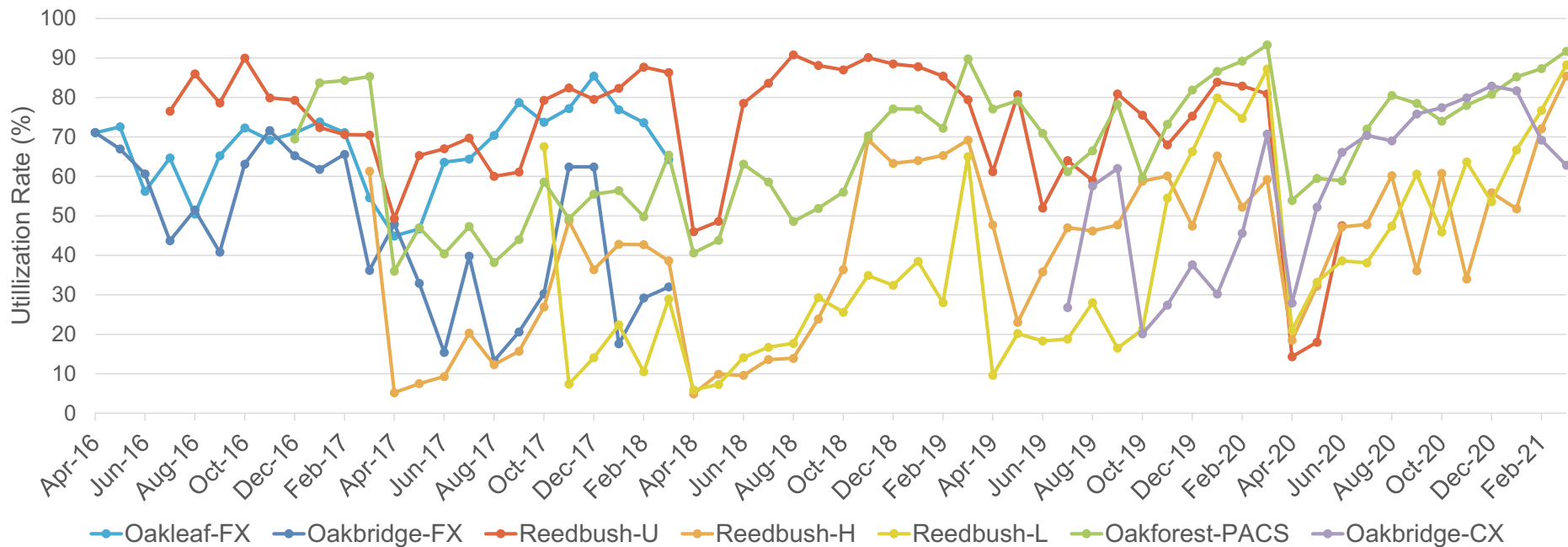


2023/6/21

Google

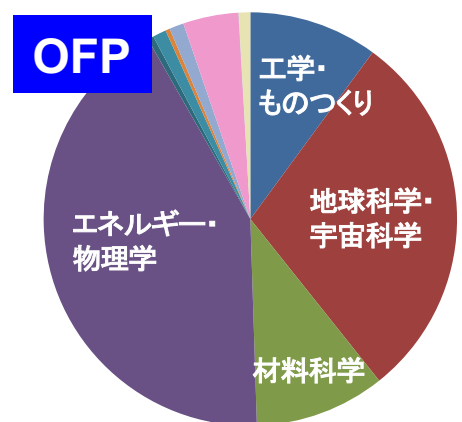
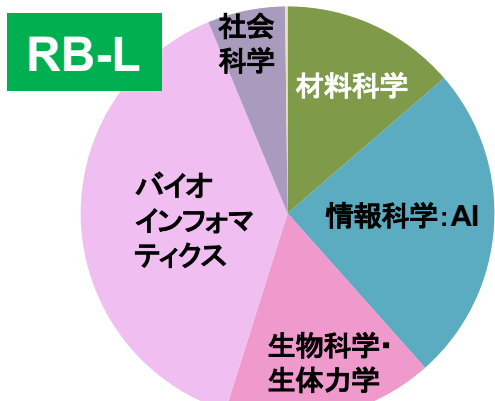
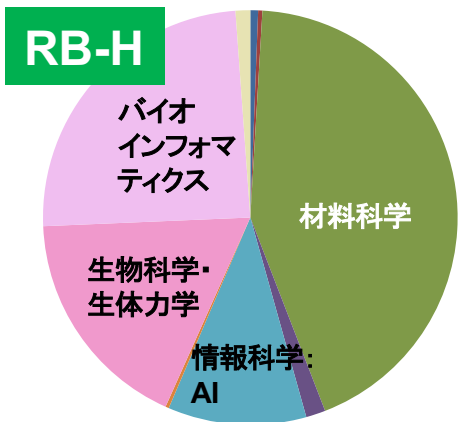
Map navigation controls including a compass, 3D view toggle, location pin, zoom in (+) and zoom out (-) buttons, and a scale bar showing 23 meters.

各システムの月平均利用率履歴

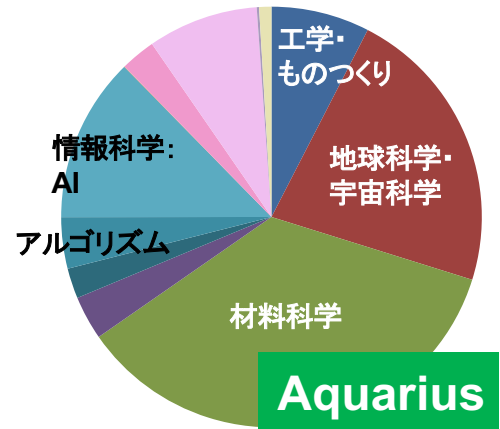
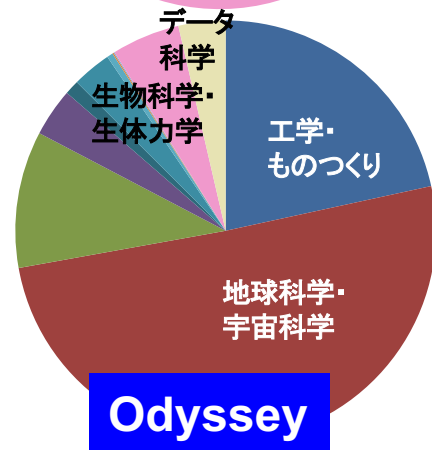
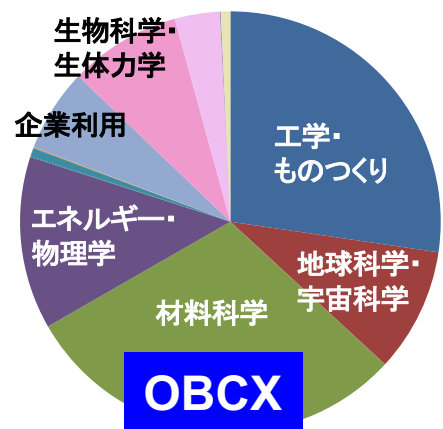


2021年度分野別 ■汎用CPU, ■GPU

Odyssey, Aquariusは8月以降, RB-H, RB-Lは11月末時点



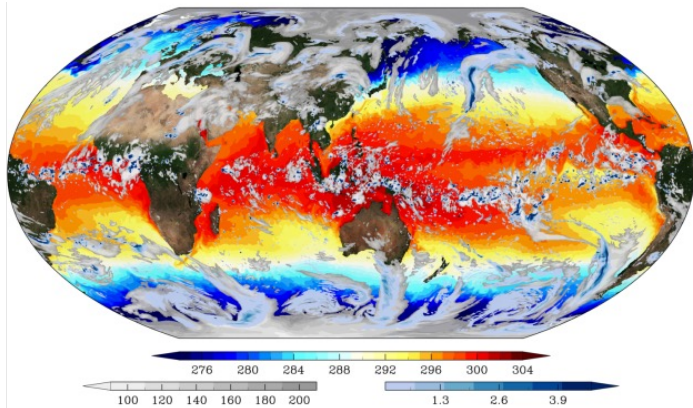
- 工学・ものづくり
- 地球科学・宇宙科学
- 材料科学
- エネルギー・物理学
- 情報科学: システム
- 情報科学: アルゴリズム
- 情報科学: AI
- 教育
- 産業利用
- 生物科学・生体力学
- バイオインフォマティクス
- 社会科学・経済学
- データ科学・データ同化



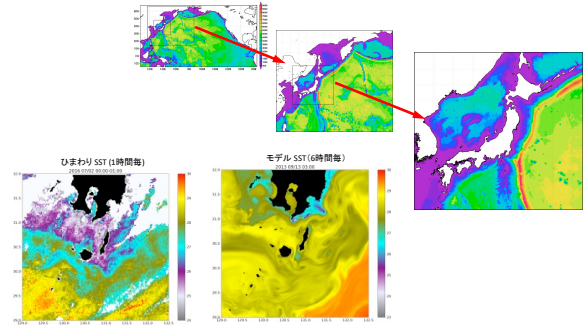
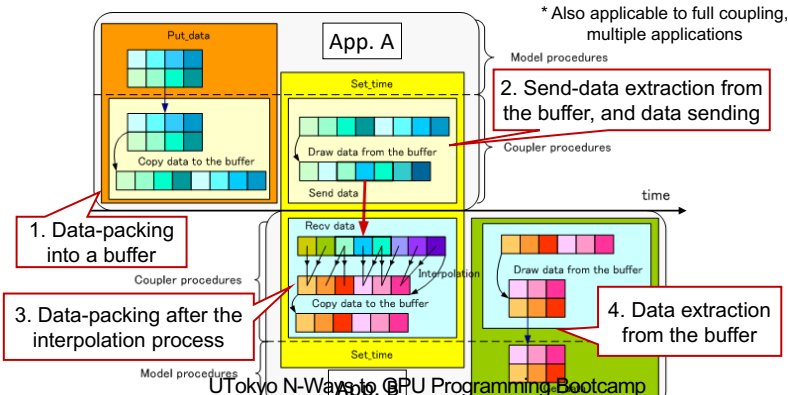
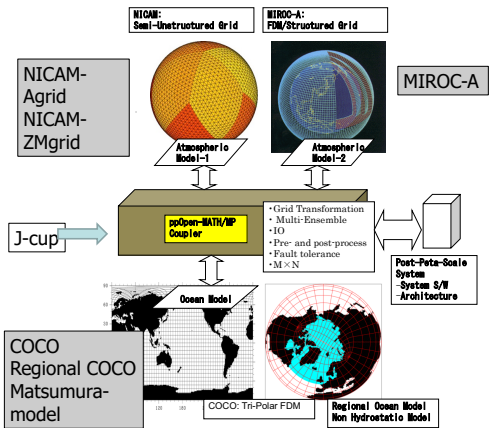
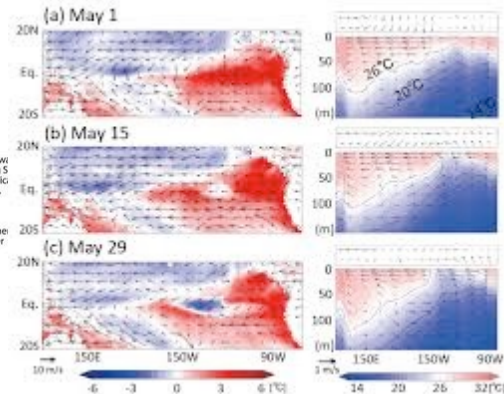
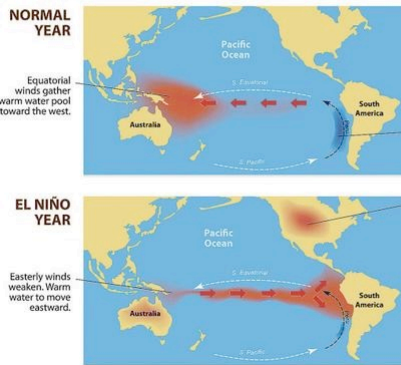
地球科学・宇宙科学分野ではOFP ⇒ Wisteria/BDEC-01への移行が順調に進んでいる

全地球大気環境シミュレーション

東大大気海洋研究所, 東大理学系研究科等



THE EL NIÑO PHENOMENON



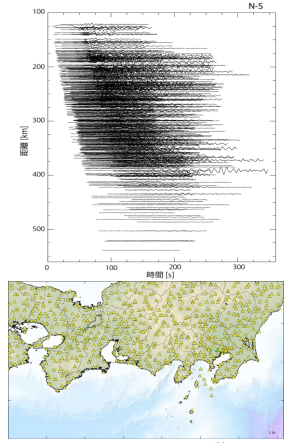
[画像提供: 佐藤正樹教授・羽角博康教授(東大・大気海洋研)]

地震シミュレーション・地殻変動

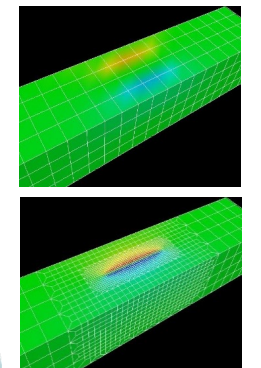
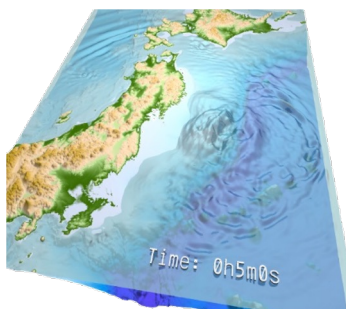
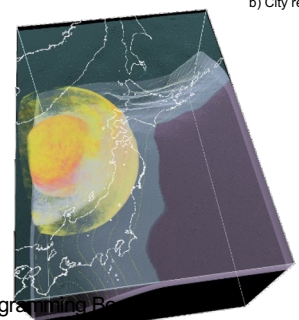
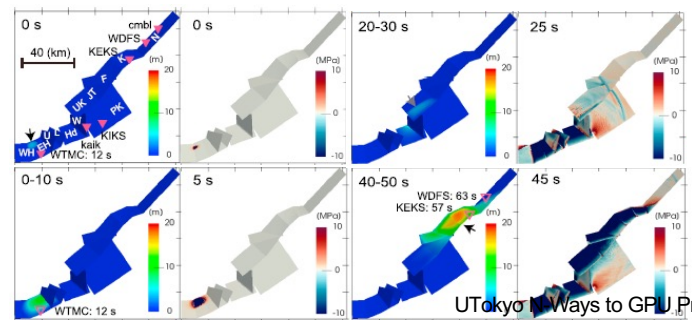
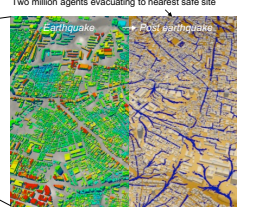
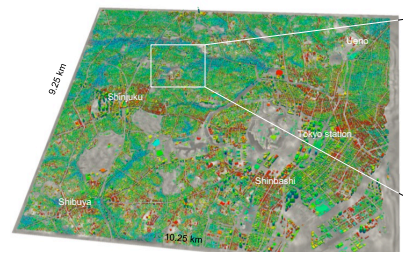
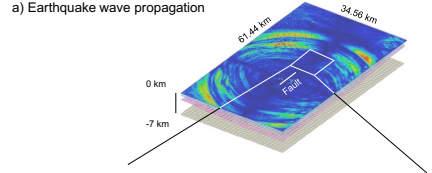
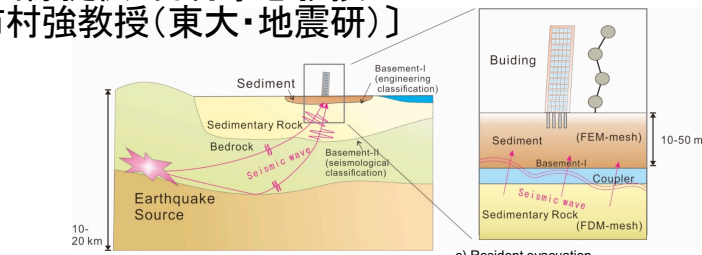
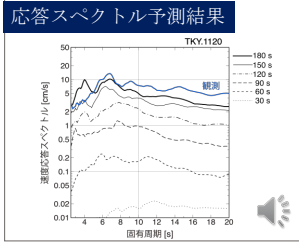
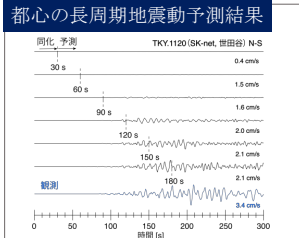
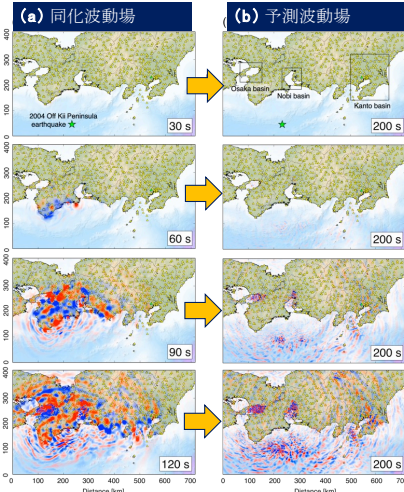
東大地震研究所, 東大理学系研究科等

[画像提供: 古村孝志教授・市村強教授(東大・地震研)]

○ 使用データ(K-NET, KIK-net 446点)



90秒間の同化→予測計算



[画像提供: 安藤亮輔准教授(東大・理学系)]

二酸化炭素地下貯留シミュレーション

大成建設, 理化学研究所等

〔画像提供:
山本肇博士(大成建設)〕

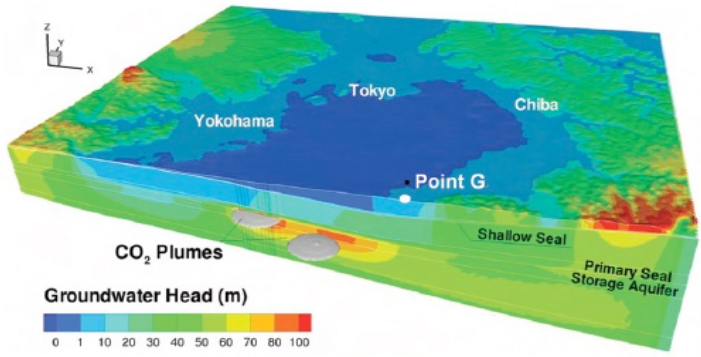
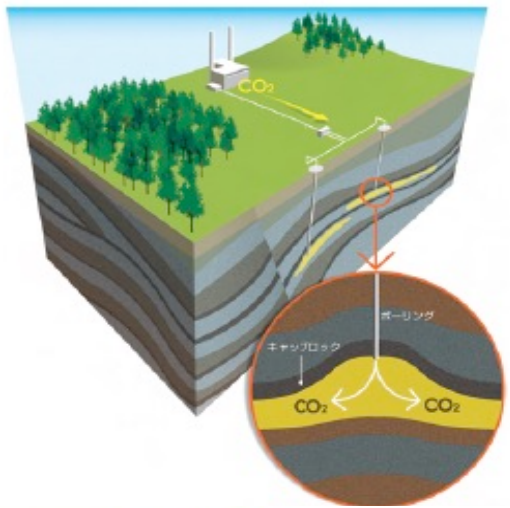
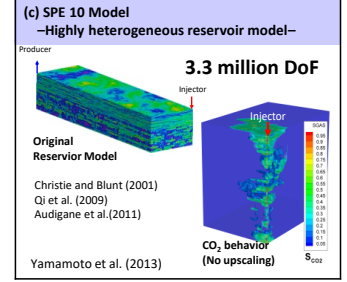
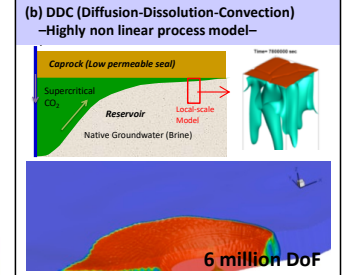
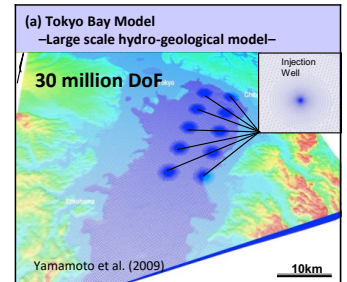
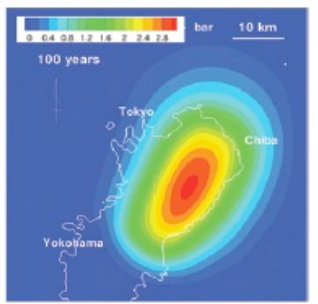
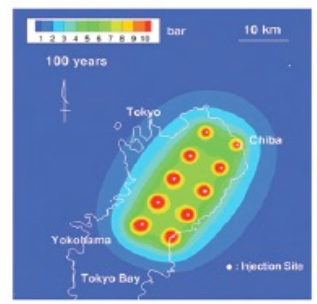
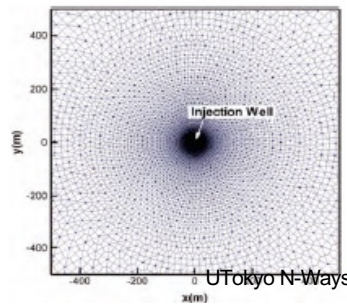
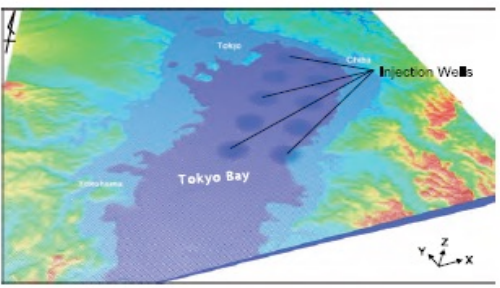


図-4 CO₂ 注入後の地下水圧 (全水頭換算) の分布 (100 年後)



※DOF: degrees of freedom



(a) 深部遮蔽層下面 (b) 浅部遮蔽層下面

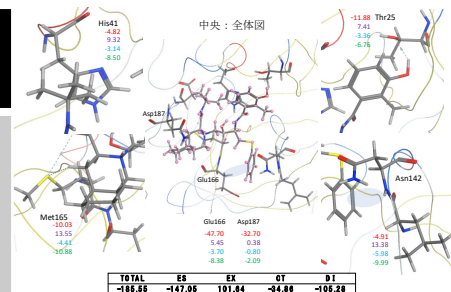
図-5 地上見景の平面分布 (初期状態からの増分、注入開始から100年後)

「COVID-19」対応HPCI臨時公募課題

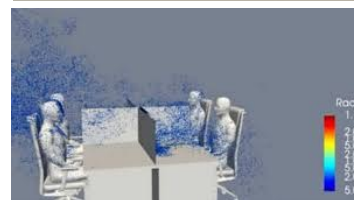
全14のうち6課題が東大システムを利用(2020年度)



課題名	代表者(所属)	使用システム
新型コロナウイルスの主要プロテアーゼに関するフラグメント分子軌道計算	望月 祐志 (立教大学)	Oakforest PACS
COVID-19治療の候補薬: chloroquine、hydroxychloroquine、azithromycinの催不整脈リスクの評価ならびにその低減策に関する研究	久田 俊明(株式会社UT-Heart研究所 / 東大)	
新型コロナウイルス表面のタンパク質動的構造予測	杉田 有治 (理化学研究所)	
計算機解析によるSARS-CoV-2増殖阻害化合物の探索	星野 忠次 (千葉大学)	Oakbridge CX
室内環境におけるウイルス飛沫感染の予測とその対策: 富岳大規模解析に向けたケーススタディ	坪倉 誠 (神戸大学)	
Spreading of polydisperse droplets in a turbulent puff of saturated exhaled air	Marco Edoardo Rosti (OIST)	



[資料提供: 望月祐志教授(立教大学)]

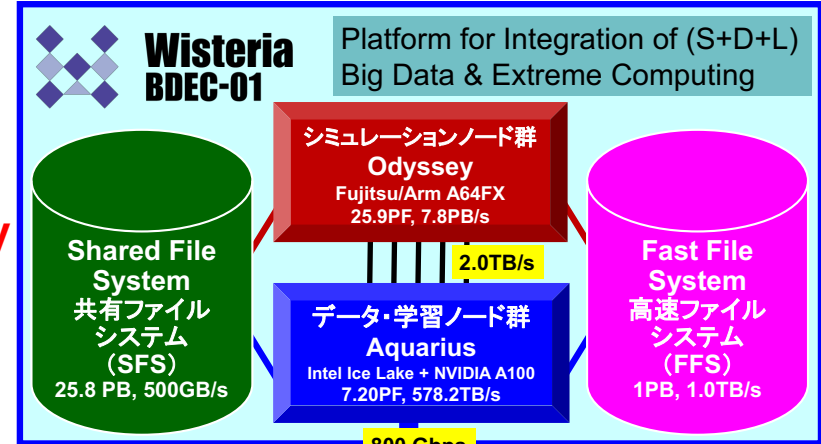


[資料提供: 坪倉誠教授(神戸大学)]

Wisteria/BDEC-01

BDEC:「計算・データ・学習(S+D+L)」
融合のためのプラットフォーム
(Big Data & Extreme Computing)

- 2021年5月14日運用開始
 - 東京大学柏Ⅱキャンパス
- 33.1 PF, 8.38 PB/sec. , **富士通製**
 - ~4.5 MVA (空調込み) , ~360m²
- Hierarchical, Hybrid, Heterogeneous (h3)
- **2種類のノード群**
 - シミュレーションノード群 (S, SIM) : **Odyssey**
 - 従来のスパコン
 - Fujitsu PRIMEHPC FX1000 (A64FX), 25.9 PF
 - 7,680ノード (368,640 コア) , 20ラック, Tofu-D
 - データ・学習ノード群 (D/L, DL) : **Aquarius**
 - データ解析, 機械学習
 - Intel Xeon Ice Lake + NVIDIA A100, 7.2 PF
 - 45ノード (Ice Lake: 90基, A100: 360基) , IB-HDR
 - 一部は外部リソース(ストレージ, サーバー, センサーネットワーク他)に直接接続
- ファイルシステム: 共有(大容量) + 高速



**Wisteria
BDEC-01**



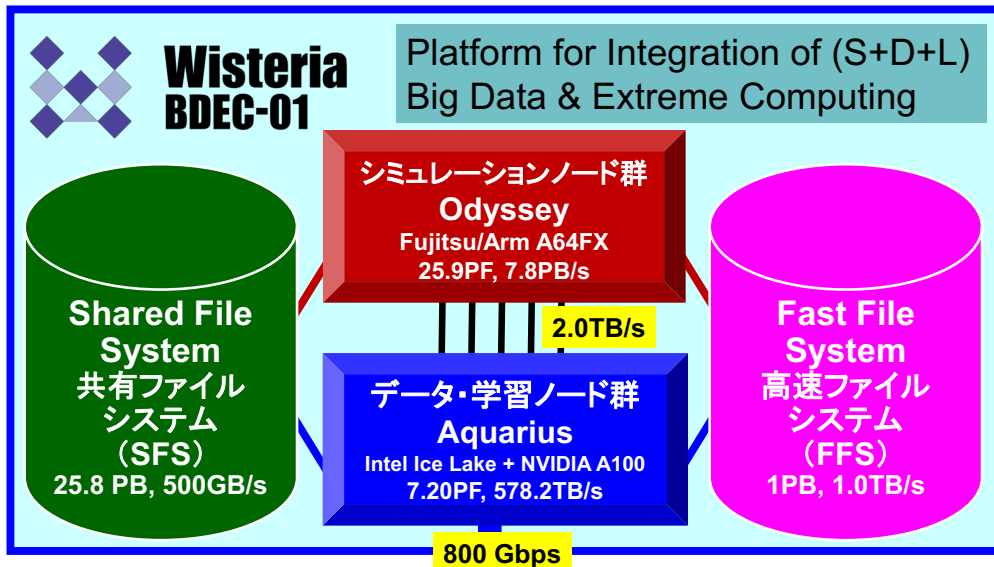
**Wisteria
BDEC-01**

Wisteria/BDEC-01 (S+D+L) 融合プラットフォーム

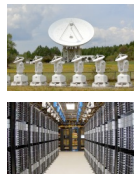


**Wisteria
BDEC-01**

Platform for Integration of (S+D+L)
Big Data & Extreme Computing



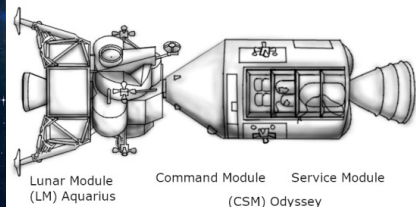
External Network
外部ネットワーク



External Resources

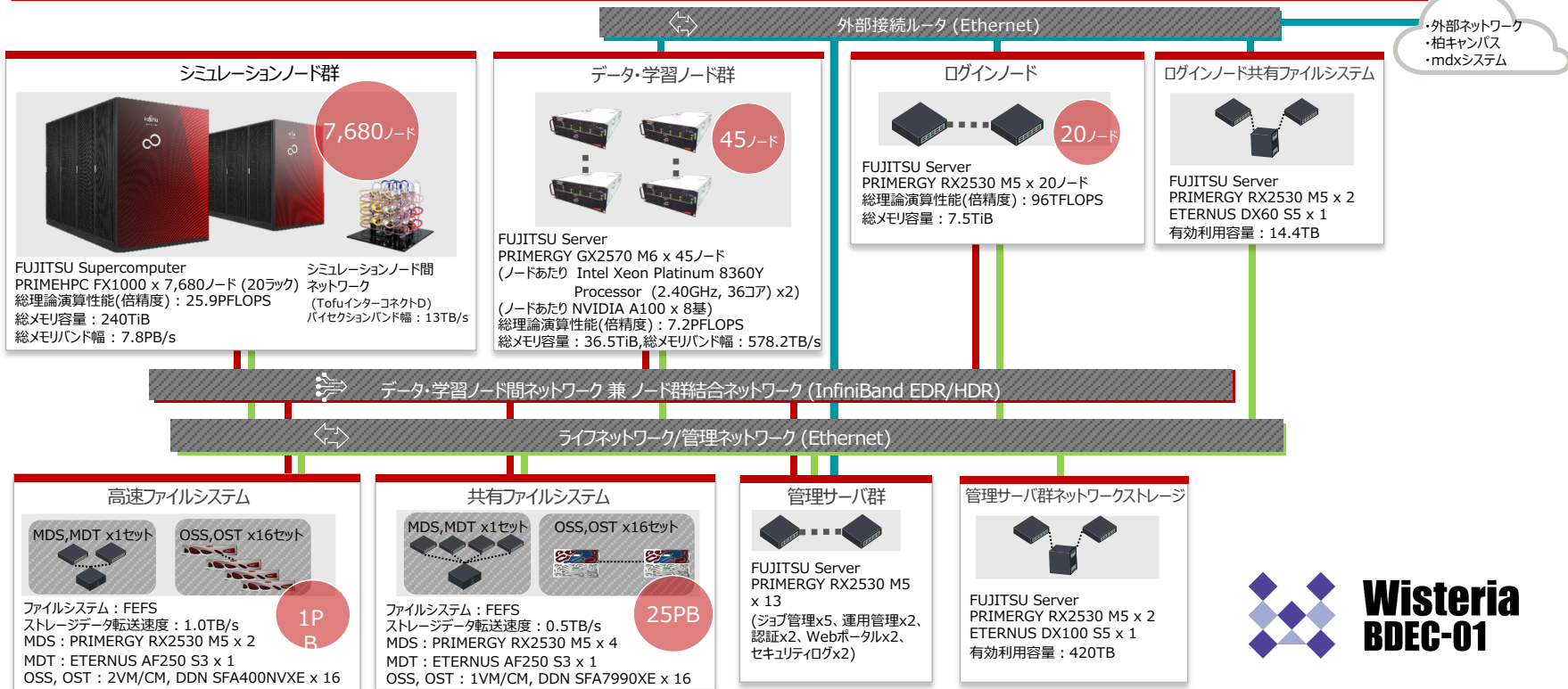
外部リソース

- Wisteria (紫藤)
 - 手賀沼(柏市)に伝わる「藤姫伝説」
- Odyssey
 - アポロ13号・司令船(Command Module, CM)のコールサイン
- Aquarius
 - アポロ13号・月着陸船(Lunar Module, LM)のコールサイン
- 人類と地球を護る



システム構成図

シミュレーションノード : 7,680ノード (総理論演算性能 25.9 PFLOPS、総メモリバンド幅 7.8 PB/s)
データ・学習ノード : 45ノード (総理論演算性能 7.2 PFLOPS、総メモリバンド幅 578.2 TB/s)



**Wisteria
BDEC-01**

項目		Wisteria-O (Odyssey)	Wisteria-A (Aquarius)
総理論演算性能		25.9 PFLOPS	7.2 PFLOPS
総ノード数		7,680	45
総主記憶容量		240.0 TiB	36.5 TiB
ネットワークポロジ		6次元メッシュ / トーラス	Full-bisection Fat Tree
共有ファイルシステム	システム名	FEFS (Fujitsu Exabyte File System)	
	サーバ(OSS)	DDN SFA7990XE	
	サーバ(OSS)数	16	
	ストレージ容量	25.8 PB	
	ストレージデータ転送速度	504 GB/s	
高速ファイルシステム	システム名	FEFS (Fujitsu Exabyte File System)	
	サーバ(OSS)	DDN SFA400NVXE	
	サーバ(OSS)数	16	
	ストレージ容量	1.0 PB	
	ストレージデータ転送速度	1.0 TB/s	

項目		Wisteria-O (Odyssey)	Wisteria-A (Aquarius)
マシン名		FUJITSU Supercomputer PRIMEHPC FX1000	FUJITSU Server PRIMERGY GX2570 M6
CPU	プロセッサ名	A64FX	Intel Xeon Platinum 8360Y (開発コード名: Ice Lake)
	プロセッサ数 (コア数)	1 (48+アシスタントコア2 or 4)	2 (36+36)
	周波数	2.2 GHz	2.4 GHz
	理論演算性能	3.3792 TFLOPS	5.53 TFLOPS
	メモリ容量	32 GB	512 GiB
	メモリ帯域幅	1,024 GB/s	409.6 GB/s
GPU	プロセッサ名	-	NVIDIA A100
	SM数(単体)		108
	メモリ容量(単体)		40 GB
	メモリ帯域幅(単体)		1,555 GB/s
	理論演算性能(単体)		19.5 TFLOPS
	搭載数		8
	CPU-GPU間接続		PCI Express Gen4 x 16レーン (1レーンあたり片方向32 GB/s)
	GPU間接続		NVLink x 12本 (1本あたり片方向25GB/s)
インターコネク		Tofuインターコネク	InfiniBand HDR(200Gbps) x 4

GFLOPS (ピーク性能) 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	0.866
Reedbush-U (HPE) (Intel Xeon Broadwell (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/KNL)	16.5	4.986
Oakbridge-CX (Fujitsu) (Intel Xeon Cascade Lake)	20.7	5.076
Wisteria-Odyssey (Fujitsu/Arm A64FX)	17.8	15.069
Wisteria-Aquarius (Intel Xeon Ice Lake + NVIDIA A100x8)	9.00	24.06

YouTubeチャンネルのご紹介



研究事例紹介や、セミナー・講習会の録画などをご覧になれます。

- 「東京大学情報基盤センター」チャンネル

<https://www.youtube.com/channel/UC2CHaGp1AO-vqRIV7wmU0-w>

- Wisteria/BDEC-01システム紹介

https://www.youtube.com/watch?v=SXjYtatzo-4&list=PLobjSv_ny85IW03OAPUJ9DWJoHhNiQgvY&index=3&t=104s

- 第10回JCAHPCセミナー

https://www.youtube.com/playlist?list=PLobjSv_ny85mfPTuCC2i7r_sPQYKZvy2e

- 柏キャンパス一般公開

https://www.youtube.com/playlist?list=PLobjSv_ny85kr1lg2m-bUiMC2a9W6k53u
<https://www.youtube.com/watch?v=q-0QtU7Ops4&t=116s>

- JCAHPCセミナー:「人類と地球を護るスーパーコンピューティング」

https://www.youtube.com/playlist?list=PLobjSv_ny85l-z-VJCy690ZjIAA04xCRA

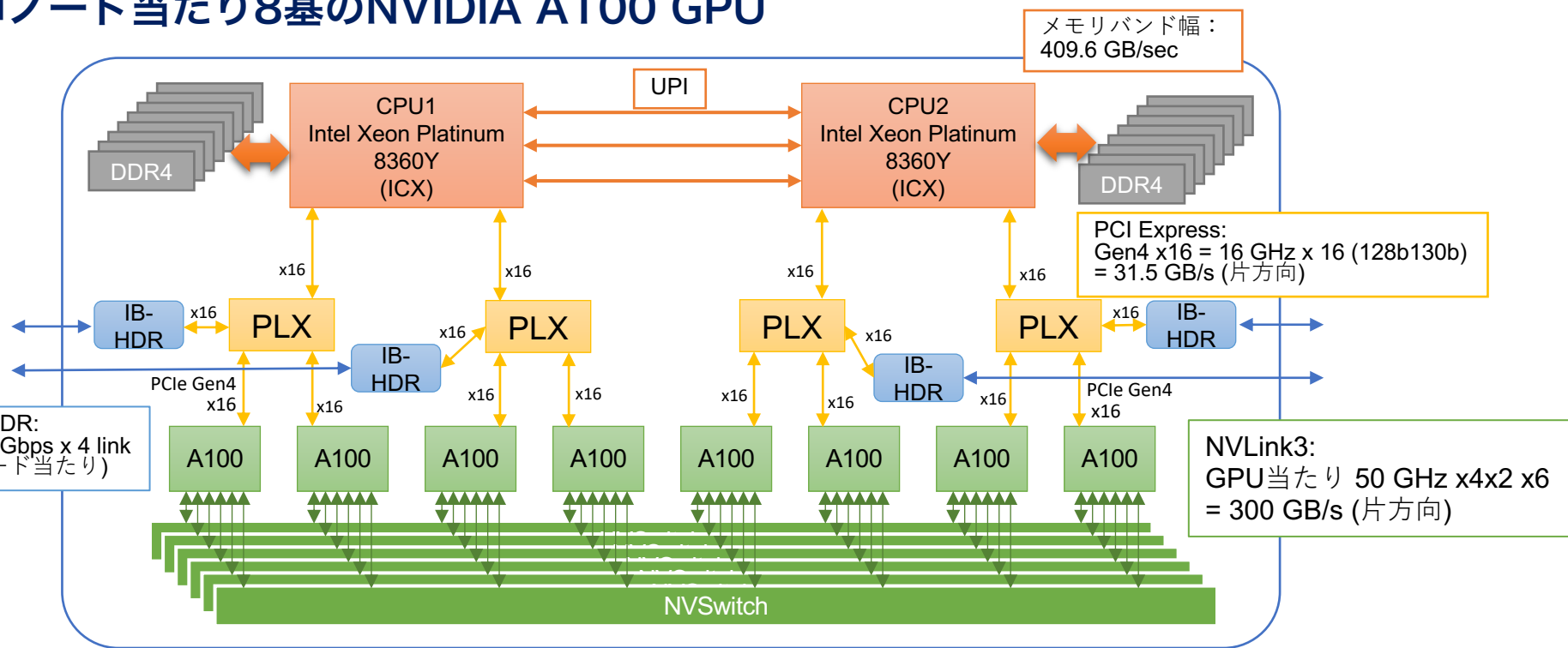
- お試しアカウントつき講習会

https://www.youtube.com/playlist?list=PLobjSv_ny85kXY2Mtnhn1k7pM-epQaD2y

Wisteria/BDEC-01 の使い方

使用ノード：Aquariusの構成

- Intel Xeon Platinum 8360Y (36c 2.4GHz) x 2ソケット, 512GBメモリ
- ノード当たり8基のNVIDIA A100 GPU



ログインノードと計算ノード

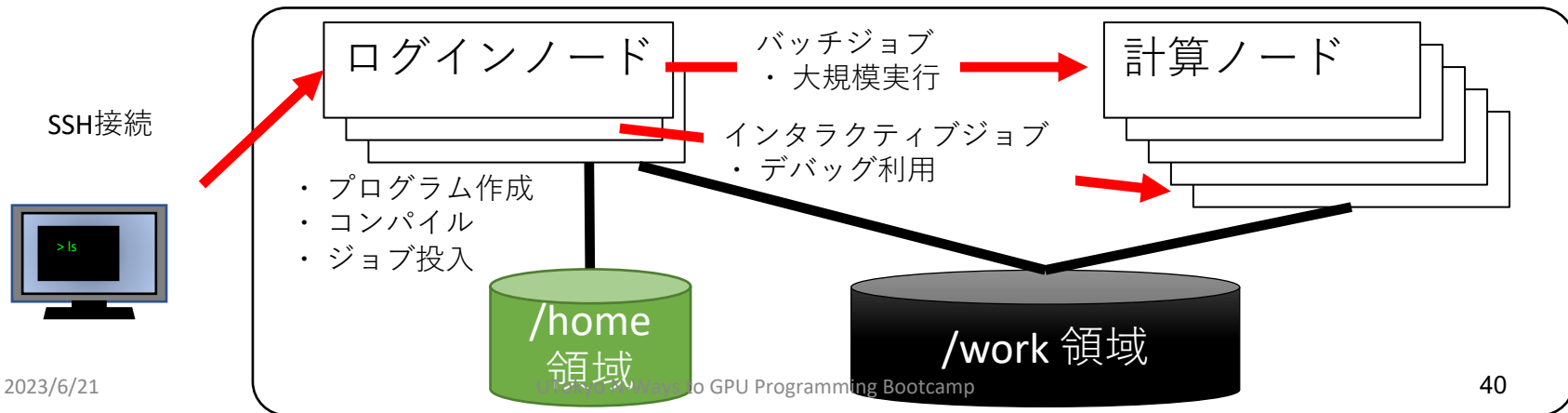
Wisteria は主にログインノードと計算ノードから構成されています。

■ ログインノード：プログラム作成、コンパイル、ジョブ投入

■ 計算ノード：ユーザプログラムを実行

- 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。実行処理をスクリプトで指示。長時間、大規模実行。
- インタラクティブジョブ実行：PCでの実行のように、コマンド入力に対話的に実行する方法。デバッグ用、短時間、数ノード実行。（本講習会では使えません）

■ `/home` はログインノードからのみ参照できます。`/work` はログインノードと計算ノード両方から参照できます。基本的には `/work` で作業します。



ディレクトリ

■home と work ディレクトリ

- ログイン時のディレクトリ (`/home/gt00/tVWXYZ`) にはログイン時に必要なファイルのみを置いてください。
- プログラム作成や実行などに必要なファイルは `/work` 以下のディレクトリ (`/work/gt00/tVWXYZ`) に置いてください。
- `/home` は計算ノードからは参照できません。

コンパイルおよび実行のための環境準備

- コンパイルおよび実行のための環境を準備するために `module` コマンドを使用する。これによって様々な環境を簡単に切り替えて使用できる。

\$ module load <module_name>

モジュール名 **<module_name>** のモジュールをロードして環境を準備。環境変数PATHなどが設定される。

\$ module avail

使用可能なモジュール一覧を表示する。

\$ module list

使用中のモジュールを表示する。

Wisteriaでのプログラムの実行

- ジョブスクリプト(〇〇.sh)を作成し、ジョブとして投入、実行する。

```
$ pjsub ./〇〇.sh
```

- 投入されたジョブを確認する。 (**qstatではないので注意**)

```
$ pjstat
```

- 実行が終了すると、以下のファイルが生成される。

```
〇〇.sh.???????.out
```

```
〇〇.sh.???????.err (?????? はジョブID)
```

- 上記の標準出力ファイルの中身を確認する。

```
$ cat 〇〇.sh.???????.out
```

- 必要に応じて、上記のエラー出力ファイルの中身を確認する。

```
$ cat 〇〇.sh.???????.out
```

コンパイラの種類と実行(Aquarius)

■ログインノードとAquarius計算ノードとでは、CPUの命令セットが(ほぼ)同じ

- ログインノード：命令セットアーキテクチャ Intel CascadeLake+AVX512, x86_64
- Aquarius計算ノード：命令セットアーキテクチャ Intel IceLake+AVX512, x86_64

■様々なコンパイラが利用可能: GPU向けには gcc+CUDAか NVIDIAを推奨

```
$ module load gcc cuda ompi-cuda または
```

```
$ module load nvidia cuda ompi-cuda
```

言語	GNUコンパイラ	Intelコンパイラ	NVIDIA コンパイラ (旧PGI)	CUDAコンパイラ
C	gcc	icc	nvc (pgcc)	nvcc
C++	g++	icpc	nvc++(pgc++)	
Fortran	gfortran	ifort	nvfortran (pgfortran)	
OpenACC			○	

2023/6/21

JOBスクリプトサンプルの説明 (Aquarius, MPIなし)

```
#!/bin/bash
#PJM -L rscgrp=tutorial-a
#PJM -L gpu=4
#PJM -L elapse=00:01:00
#PJM -g gt00

module load nvidia
./a.out
```

キュー名 (リソースグループ名)
: tutorial-a

利用GPU数

実行時間制限
: 1分

利用グループ名
: gt00

講習会利用のジョブクラス: バッチジョブ (Aquarius)

キュー名	GPU数	制限時間 (Elapsed)	メモリ容量 (GB)
lecture-a (教育/講習会利用全体で共有)	1,2,4	15 分	56/GPU
tutorial-a (この講習会の時間中のみ使用可能)	1,2,4	15 分	56/GPU

share-aと同様の使い方

関連ドキュメント

■Wisteria/BDEC-01 システム利用手引書

- わからないことがあれば、まずこちらを参照してください
- <https://wisteria-www.cc.u-tokyo.ac.jp/>で利用支援ポータルサイトへ入り、左のメニューから「ドキュメント閲覧」へ進み、「Wisteria/BDEC-01 システム利用手引書」です。

■本講習会のオンライン講習会の手引書

- すでに事前配布したものです。必要に応じて参照してください。
- https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/207/20230621_OnlineClass.pdf

■講習会「GPUプログラミング入門」の資料

- GPUコンピューティング、OpenACCなどについて解説されています。
- <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/188/>

■講習会「MPI+OpenMPで並列化されたFortranプログラムのGPUへの移行手法」の資料

- MPI + OpenMPで記述されたFortranプログラムのGPU移植の手法が解説されています。
- <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/196/>

■講習会「Wisteria実践」の資料

- Aquarius の利用方法について動画で解説されています。
- <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/199/>

関連ドキュメント

■GPU移行ポータルサイト

- 既存コードをご自身でGPUへ移植するために、役立つ情報を集約しています。
- https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/gpu_porting.php
- https://jcahpc.github.io/gpu_porting/