

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

[導入編]

第95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 特任准教授 伊田 明弘

講習会概略

- ▶ **開催日:** 2018年3月13日(火)10:30 -17:00
2018年3月14日(水)10:30 - 17:45
- ▶ **場所:** 東京大学情報基盤センター 4階 413遠隔講義室
- ▶ **講習会プログラム:**
- ▶ **3月13日(火)**
 - ▶ 10:00 - 10:30 受付
 - ▶ 10:30 - 12:30 ノートパソコンの設定、テストプログラムの実行など(演習) (講師:伊田)
 - ▶ 14:00 - 17:00 Xcryptを用いたジョブ並列処理(座学&演習) (講師:平石)
- ▶ **3月14日(水)**
 - ▶ 10:30 - 12:00 プログラム実習(BLAS, LAPACK、ScaLAPACK) & 座学 (講師:伊田)
 - ▶ 13:30 - 15:30 ppOpen-HPCを用いたシミュレーション体験(座学&演習) (講師:松本)
 - ▶ 15:45 - 17:45 階層型行列法とHACApKライブラリ(座学&演習) (講師:伊田)

ノートパソコンの設定、テストプログラムの実行など（演習）

■チュートリアルの流れ

1. 本日使用するスパコンの紹介
2. ノートパソコンの設定：公開鍵の生成
3. スパコンへのログイン
 - 3-1. Oakleaf-FXシステムへのログイン
 - 3-2. ReedBushシステムへのログイン
 - 3-3. Oakforest-PACSシステムへのログイン
4. テストプログラムの実行
 - 4-1. Oakleaf-FXシステム
 - 4-2. ReedBushシステム
 - 4-3. Oakforest-PACSシステム

東大基盤センターのスパコン

2基の大型システム, 6年サイクル

FY

08 09 10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20 21 22

Hitachi SR11K/J2
IBM Power-5+
18.8TFLOPS, 16.4TB

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

Hitachi HA8000 (T2K)
AMD Opteron
140TFLOPS, 31.3TB

Oakforest-PACS
Fujitsu, Intel KNL
25PFLOPS, 919.3TB

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

Post FX10
50+ PFLOPS (?)

Oakbridge-FX
136.2 TFLOPS, 18.4 TB

Reedbush, SGI
Broadwell + Pascal
1.80-1.93 PFLOPS

Peta

K

K computer

Post-K

本講習会で利用するスーパーコンピュータ

- **Reedbush-U**
全資源：420ノード
(15,120コア)
- **Oakleaf-FX**
全資源：5,376ノード
(86,016コア)
- **Oakforest-PACS**
全資源：8,208ノード
(558,144コア)



Oakforest-PACSの利用提案

■次世代並列計算機向けソフトウェア技術開発に利用

- ・最新の要素技術 (Xeon Phi, Omni-path, Burst Buffer)
- ・コードを動作させるは容易 (Intel コンパイラが利用可能)

■超並列計算の技術開発に利用

- ・豊富な計算資源 (5742ノード × 68コア)
- ・「京」とポスト京との橋渡しの存在として

■Deep Learning技術開発に利用

- ・Xeon Phi向けにチューニングされたライブラリが利用可能
 - Intel DAAL (Data Analytics Acceleration Library)
 - Intel MKL (Math Kernel Library)

Reedbush-Uの利用提案

■スーパーコンピュータの調査・試験・入門用に最適

- ▶ Intel社CPUやInfiniBandなどシェアの高い要素を組み合わせた使い易い、良い意味で普通の構成
- ▶ パソコンや小規模クラスタからのプログラムの移植が比較的容易
- ▶ 一般的な構成要素を用いつつ高性能が発揮されるように調整されているため、スパコンの導入効果調査に最適

■Deep Learning, データ解析に利用

- ▶ 従来の科学技術計算以外の新しい研究分野への利用も視野に入れ、様々な関連ツール, ソフトウェアを導入
 - TensorFlow, Torch, Caffe, Chainer, OpenCV, ROOT, GEANT4, Theano, Anaconda
- ▶ エンジニアリング等用に多様な大規模シミュレーションソフトも充実

■機密性の高い研究・開発に利用

- ▶ ノード固定で申込みば、専用HDや専用線の導入に対応可能

Oakleaf-FXの利用提案

■ 超並列計算の技術開発に利用

- ▶ 豊富な計算資源
- ▶ 大規模計算が流れやすい設定(2017年度実地を検討中)

■ チャンピオンデータの取得に利用

- ▶ 最大1,440ノード(23,040コア)を用いた計算が実行可能
- ▶ 1ジョブあたり最大168時間まで実行可能(Oakbridge-FX)

■ 「京」システムと汎用スパコンとの橋渡しに利用

- ▶ SPARC64アーキテクチャ、Tofuネットワークなど「京」システムと類似の構成を採用

有償トライアルユース制度について

- ▶ 当センターのOakleaf-FX, Reedbushスーパーコンピュータが安価に使える「**無償トライアルユース、および、有償トライアルユース**」制度があります。
 - ▶ **アカデミック利用**
 - ▶ パーソナルコース、グループコースの双方(1ヶ月～3ヶ月)
 - ▶ **企業利用**
 - ▶ パーソナルコース(1ヶ月～3ヶ月)
(FX10: 最大24ノード、最大96ノード, RB: 最大4ノード、最大16ノード)
本講習会の受講が必須、審査無
 - ▶ **グループコース**
 - 無償トライアルユース:(1ヶ月～3ヶ月):(FX10:12ノード、RB: 8ノード、1口)
 - 有償トライアルユース:(1ヶ月～最大通算9ヶ月)
 - **スーパーコンピュータ利用資格者審査委員会の審査が必要(年2回実施)**
 - ▶ **双方のコースともに、簡易な利用報告書の提出が必要**
- ▶ 料金体系や利用条件の詳細は、以下のHPをご覧ください
<http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/service/trial/fx10.html>

東大情報基盤センターOakforest-PACSスーパーコンピュータシステムの料金表（2017年4月1日）

▶ パーソナルコース(年間)

- ▶ コース1： 100,000円 : 8ノード(基準)、最大16ノードまで
- ▶ コース2： 200,000円 : 16ノード(基準)、最大64ノードまで
- ▶ グループコース
 - ▶ 400,000円(企業 480,000円) : 1口 8ノード(基準)、最大128ノードまで
- ▶ 以上は、「トークン制」で運営
 - ▶ 申し込みノード数 × 360日 × 24時間の「トークン」が与えられる
 - ▶ 基準ノードまでは、トークン消費係数が1.0
 - ▶ 基準ノードを超えると、超えた分は、消費係数が2.0になる
 - ▶ 大学等のユーザはFX10、Reedbushとの相互トークン移行も可能

東大情報基盤センターOakleaf-FXスーパーコンピュータシステムの料金表 (2017年4月1日)

▶ パーソナルコース(年間)

- ▶ コース1: 90,000円 : 12ノード(優先)、最大24ノードまで
- ▶ コース2: 180,000円 : 24ノード(優先)、最大96ノードまで

▶ グループコース

- ▶ 360,000円(企業 432,000円) : 1口、12ノード(優先)、最大1440ノードまで

▶ 以上は、「トークン制」で運営

- ▶ 申し込みノード数 × 360日 × 24時間の「トークン」が与えられる
- ▶ 優先ノードまでは、トークン消費係数が1.0
- ▶ 優先ノードを超えると、超えた分は、消費係数が2.0になる
- ▶ 大学等のユーザはOakforest-PACS、Reedbushとの相互トークン移行も可能

東大情報基盤センターReedbush-Uスーパーコンピュータシステムの料金表（2017年4月1日）

▶ パーソナルコース（年間）

- ▶ 150,000円 : 4ノード（優先）、最大16ノードまで

▶ グループコース

- ▶ 300,000円（企業 360,000円） : 1口 4ノード（優先）、最大128ノードまで

▶ 以上は、「トークン制」で運営

- ▶ 申し込みノード数 × 360日 × 24時間の「トークン」が与えられる
- ▶ 優先ノードまでは、トークン消費係数が1.0
- ▶ 優先ノードを超えると、超えた分は、消費係数が2.0になる
- ▶ 大学等のユーザはFX10, Oakforest-PACSとの相互トークン移行も可能
- ▶ ノード固定もあり

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。

<http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/system/ofp/>

<http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/system/fx10/>

<http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/system/reedbush/>

ノートパソコンの設定： 公開鍵の生成

無線LAN (Wi-Fi) に接続する

- ▶ 接続先アクセスポイント： **eduroam**
- ▶ 利用に必要な情報 ユーザーIDとパスワード(配布しているもの)
- ▶ よくあるトラブルと対策など
 - ▶ 既にeduroamというネットワークに接続したことがある場合
 - ▶ 現在も有効なアカウントを持っている場合
→持っているアカウント情報を使って接続して構いません
 - ▶ 現在は有効なアカウントを持っていない場合
→接続情報を削除してから、配布した情報で接続してください
- ▶ **手持ちのノートPCで接続できることを確認してください**

鍵の作成

■ 既に鍵を持っているなら、その鍵を使ってください

■ 鍵の作成手順(入力画面の例は次頁)

1. ターミナルを起動する

2. `$ ssh-keygen -t rsa` と入力

3. 鍵の収納先を聞かれるので、リターンを押す

4. 鍵を使うためのパスワードを聞かれるので、**eduroam/鍵登録のパスワードではない**、自分の好きなパスワードを入れる(**パスフレーズ**とよぶ)

5. もう一度、上記のパスフレーズを入れる

6. 鍵が生成される

鍵の生成 (UNIX, Mac, Cygwin)

```
>$ ssh-keygen -t rsa
```

```
Generating public/private rsa key pair.
```

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

↑ デフォルトでいいので、単にエンターを押す

```
Enter passphrase (empty for no passphrase):
```

↑ パスフレーズと言うくらいなので長めのもの

```
Enter same passphrase again:
```

```
Your identification has been saved in /home/guestx/.ssh/id_rsa.
```

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

```
The key fingerprint is:
```

鍵の利用

1. 生成した鍵は、以下に入っている
`.ssh/`
2. 以下を入力する
`$ cd .ssh/`
3. 以下を入力すると、ファイルが見える
`$ ls`

`id_rsa id_rsa.pub known_hosts`

- ▶ ここで、以下のファイルを区別する

`id_rsa` : 秘密鍵

`id_rsa.pub` : 公開鍵

この公開鍵の収納ディレクトリを覚えておく(後で使います)

スパコンへのログイン・ テストプログラム起動

実際のログインは...

- ▶ **Oakforest-PACS(OFP)編**、**Oakleaf-FX(FX-10)編**、**Reedbush編**を参照してください。