

## NQS におけるプロセス数の指定について

システム運用係

2007年6月18日から、NQSにおいて1ノードあたりのプロセス数の指定が可能になりました。これにより、ノード内で要素並列化とMPI並列化を混在させることができます。なお、その際、要素並列化で起動されるスレッド数には注意が必要です。指定方法は以下のとおりです。

### ■プロセス数の指定

バッチジョブのスクリプトファイルに以下を記述します。1ノードのCPU数（キューにより異なり、8または16）を設定した場合は“#@\$-J SS”と同意になります。CPU数を超える値は指定できません。

#@\$-J Tn (n: 1ノードあたりのプロセス数)

例)

#@\$-J T4 → 4 プロセス

### ■スレッド数の指定

環境変数 HF\_PRUNST\_THREADNUM にスレッド数（1～16）を設定します（最適化 FORTRAN90/77, 最適化 C, 最適化標準 C++ 共通）。

“1ノードあたりのプロセス数×スレッド数”が1ノードのCPU数を超えると実行効率が低下する場合があります。1ノードのCPU数を超えないように設定してください。

setenv HF\_PRUNST\_THREADNUM n (n: スレッド数)

例)

setenv HF\_PRUNST\_THREADNUM 4 → 4 スレッド  
mpirun ./a.out

※最適化 FORTRAN90/77 のみ、実行時オプション PRUNST(THREADNUM(n)) による指定も可能です。

例)

mpirun ./a.out -F' PRUNST(THREADNUM(4))' → 4 スレッド

## ■ スクリプトファイル記述例

```
*1 ノード, 4 プロセス, 4 スレッド
#@$_q debug
#@$_N 1
#@$_J T4
setenv HF_PRUNST_THREADNUM 4
mpirun ./a.out (要素並列化モジュール)
```

```
*4 ノード, 8 プロセス, 8 スレッド
#@$_q debug
#@$_N 4
#@$_J T2
setenv HF_PRUNST_THREADNUM 8
mpirun ./a.out (要素並列化モジュール)
```

```
*1 ノード, 1 プロセス, 16 スレッド
#@$_q debug
#@$_N 1
./a.out (要素並列化モジュール)
```

```
*1 ノード, 4 プロセス, 要素並列化なし
#@$_q debug
#@$_N 1
#@$_J T4
mpirun ./a.out (非要素並列化モジュール)
```

```
*2 ノード, 32 プロセス, 要素並列化なし
#@$_q debug
#@$_N 2
#@$_J SS (または "#$_J T16")
mpirun ./a.out (非要素並列化モジュール)
```