

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

[Reedbush編]

第104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」

スパコンへのログイン・
テストプログラム起動

東京大学情報基盤センター 特任准教授 伊田 明弘

スパコンへのログイン・ ファイル転送・基本コマンド

Reedbushへログイン

- ▶ ターミナルから、以下を入力する
`$ ssh reedbush-u.cc.u-tokyo.ac.jp -l tYYxxx`
「-l」はハイフンと小文字のL、
「tYYxxx」は利用者番号(数字)
“tYYxxx”は、利用者番号を入れる
- ▶ 接続するかと聞かれるので、 yes を入れる
- ▶ 鍵の設定時に入れた
自分が決めたパスワード(パスフレーズ)
を入れる
- ▶ 成功すると、ログインができる

Reedbushにおける注意

- ▶ ログインするとホームディレクトリ(/home/gt00/t001XX)にいます。
- ▶ /home ファイルシステムは容量が小さく、ログインに必要なファイルだけを置くための場所です。
 - ▶ /home に置いたファイルは計算ノードから参照できません。ジョブの実行もできません。
- ▶ 計算に必要なファイルは、/lustre ファイルシステムに移動(mv)させてください。

- ▶ ホームディレクトリ: /home/gt00/t001XX
 - ▶ cd コマンドで移動できます。
- ▶ Lustreディレクトリ: /lustre/gt00/t001XX
 - ▶ cdw コマンドで移動できます。

PCのファイルをReedbushに置く

- ターミナルから、以下を入力する

```
$ scp ./a.f90 tYYxxx@reedbush-u.cc.u-tokyo.ac.jp:
```

「tYYxxx」は利用者番号(数字)

“tYYxxx”は、利用者番号を入れる

- PCのカレントディレクトリにある”a.f90”を、Reedbush上のホームディレクトリに置く
- ディレクトリごと置くには、“-r” を指定

```
$ scp -r ./SAMP tYYxxx@reedbush-u.cc.u-tokyo.ac.jp:
```

- PCのカレントディレクトリにあるSAMPフォルダを、その中身ごと、Reedbush上のホームディレクトリに置く

ReedbushのデータをPCに取り込む

- ターミナルから、以下を入力する

```
$ scp tYYxxx@reedbush-u.cc.u-tokyo.ac.jp:~/a.f90 ./
```

「tYYxxx」は利用者番号(数字)

“tYYxxx”は、利用者番号を入れる

- Reedbush上のホームディレクトリにある”a.f90”を、PCのカレントディレクトリに取ってくる
- ディレクトリごと取ってくるには、“-r” を指定

```
$ scp -r tYYxxx@reedbush-u.cc.u-tokyo.ac.jp:~/SAMP ./
```

- Reedbush上のホームディレクトリにあるSAMPフォルダを、その中身ごと、PCのカレントディレクトリに取ってくる

UNIX備忘録

- ▶ emacsの起動: emacs 編集ファイル名
 - ▶ ^x ^s (^はcontrol) : テキストの保存
 - ▶ ^x ^c : 終了
(^z で終了すると、スパコンの負荷が上がる。絶対にしないこと。)
 - ▶ ^g : 訳がわからなくなったとき。
 - ▶ ^k : カーソルより行末まで消す。
消した行は、一時的に記憶される。
 - ▶ ^y : ^k で消した行を、現在のカーソルの場所にコピーする。
 - ▶ ^s 文字列 : 文字列の箇所まで移動する。
 - ▶ ^M x goto-line : 指定した行まで移動する。

UNIX 備忘録

- ▶ **rm** **ファイル名** : ファイル名のファイルを消す。
 - ▶ **rm *~** : test.c~ などの、~がついたバックアップファイルを消す。使う時は慎重に。*~ の間に空白が入ってしまうと、全てが消えます。
- ▶ **ls** : 現在いるフォルダの中身を見る。
- ▶ **cd** **フォルダ名** : フォルダに移動する。
 - ▶ **cd ..** : 一つ上のフォルダに移動。
 - ▶ **cd ~** : ホームディレクトリに行く。訳がわからなくなったとき。
- ▶ **cat** **ファイル名** : ファイル名の中身を見る
- ▶ **make** : 実行ファイルを作る
(Makefile があるところでしか実行できない)
 - ▶ **make clean** : 実行ファイルを消す。
(clean が Makefile で定義されていないと実行できない)

UNIX 備忘録

- ▶ **less** **ファイル名**: ファイル名の中身を見る(catでは画面がいっぱいになってしまうとき)
 - ▶ **スペースキー**: 1画面スクロール
 - ▶ **/**: 文字列の箇所まで移動する。
 - ▶ **q**: 終了 (訳がわからなくなったとき)
- ▶ **cp** **ファイル名** **フォルダ名**: ファイルをコピーする
- ▶ **mv** **ファイル名** **フォルダ名**: ファイルを移動させる

テストプログラムのコンパイルと実行 [ReedBush-U編]

サンプルプログラムのコンパイル

サンプルプログラム名

- ▶ C言語版・Fortran90版共通ファイル:
Samples-rb.tar
- ▶ tarで展開後、C言語とFortran90言語のディレクトリが作られる
 - ▶ **C/** : C言語用
 - ▶ **F/** : Fortran90言語用
- ▶ 上記のファイルが置いてある場所
/lustre/gt00/z30107 (/homeでないので注意)

並列版Helloプログラムをコンパイルしよう (1/2)

1. `cdw` コマンド(Lustre作業用ディレクトリに移動する)を実行して Lustreファイルシステムに移動する
2. `/lustre/gt00/z30107` にある `Samples-rb.tar` を自分のディレクトリにコピーする
`$ cp /lustre/gt00/z30107/Samples-rb.tar ./`
3. `Samples-rb.tar` を展開する
`$ tar xvf Samples-rb.tar`
4. `Samples` フォルダに入る
`$ cd Samples`
5. C言語 : `$ cd C`
Fortran90言語 : `$ cd F`
6. `Hello` フォルダに入る
`$ cd Hello`

並列版Helloプログラムをコンパイルしよう (2/2)

6. ピュアMPI用のMakefileをコピーする
`$ cp Makefile_pure Makefile`
7. make する
`$ make`
8. 実行ファイル(hello)ができていることを確認する
`$ ls`

サンプルプログラムの実行

Reedbush-Uスーパーコンピュータシステムでのジョブ実行形態

- ▶ 以下の2通りがあります
- ▶ **インタラクティブジョブ実行**
 - ▶ PCでの実行のように、コマンドを入力して実行する方法
 - ▶ スパコン環境では、あまり一般的でない
 - ▶ デバック用、大規模実行はできない
 - ▶ Reedbush-Uでは、以下に限定
 - ▶ 1ノード利用(36コア, 30分まで)
 - ▶ 4ノード利用(144コア, 10分まで)
- ▶ **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
 - ▶ 大規模実行用
 - ▶ Reedbush-Uでは、最大128ノード利用可能(4,608コア, 24時間まで)

コンパイラの種類とインタラクティブ実行およびバッチ実行

- ▶ FX-10の場合とは異なり、Reedbush-Uでは、バッチ実行用とインタラクティブ実行用で、異なるコンパイラを使用する必要はありません。
- ▶ 例) Intelコンパイラ
 - ▶ コンパイラ: `icc`, `mpiicc` (Intel MPIを使う場合)
 - ▶ Fortran90コンパイラ: `ifort`, `mpiifort` (Intel MPIを使う場合)

インタラクティブ実行の仕方（参考）

この講習会では使用できません

▶ コマンドラインで以下を入力

▶ 1ノード実行用

```
$ qsub -l -q u-interactive -l select=1 -l  
walltime=01:00 -W group_list=gt00
```

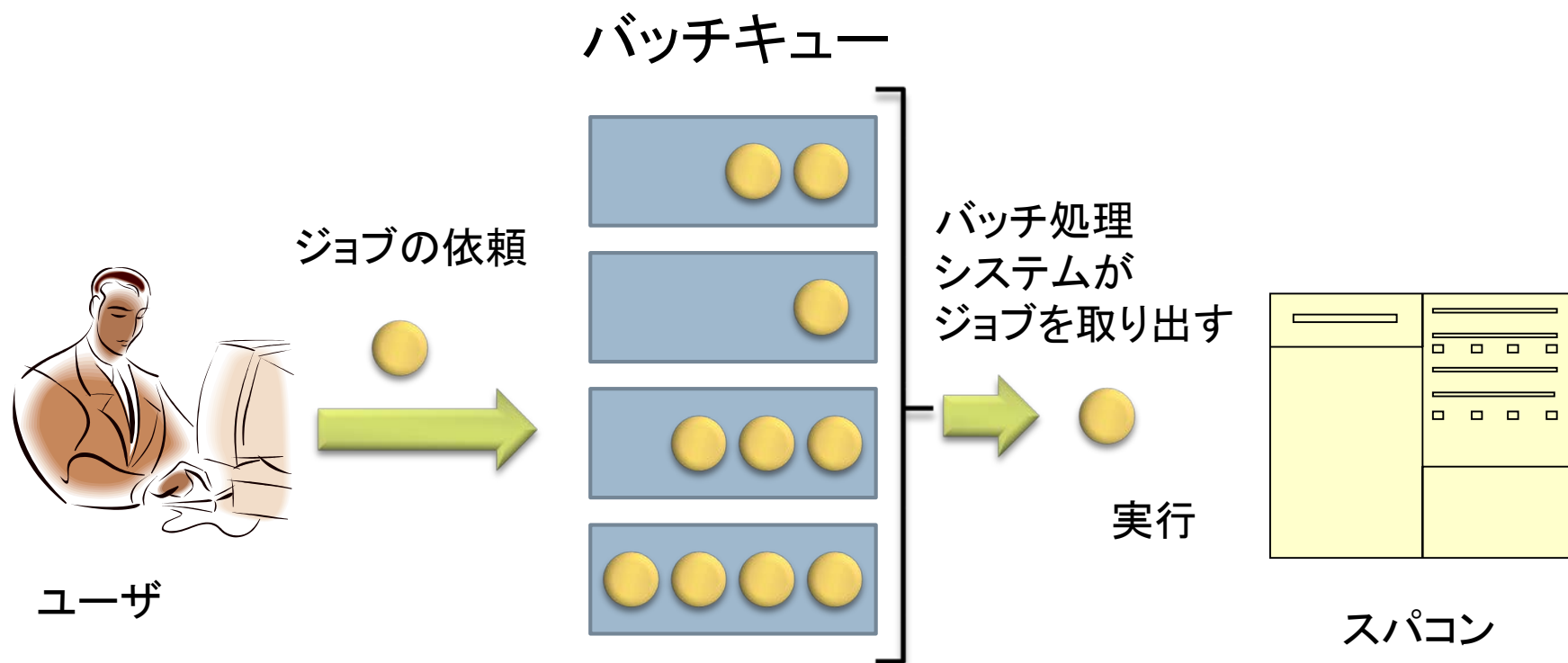
▶ 4ノード実行用

```
$ qsub -l -q u-interactive -l select=4 -l  
walltime=01:00 -W group_list=gt00
```

※インタラクティブ用のノードがすべて使われている場合、資源が空くまで、ログインできません。

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

- ▶ Reedbushシステムにおいてバッチ処理は、Altair社のバッチシステム PBS Professionalで管理されています。
- ▶ ジョブの投入:

`qsub <ジョブスクリプトファイル名>`

```
#!/bin/bash
#PBS -q u-lecture
#PBS -Wgroup_list=gt00
#PBS -l select=8:mpiprocs=36
#PBS -l walltime=00:01:00
cd $PBS_O_WORKDIR
. /etc/profile.d/modules.sh
mpirun ./hello
```

キュー名
:u-lecture

利用グループ名
:gt00

ジョブスクリプトファイルの例

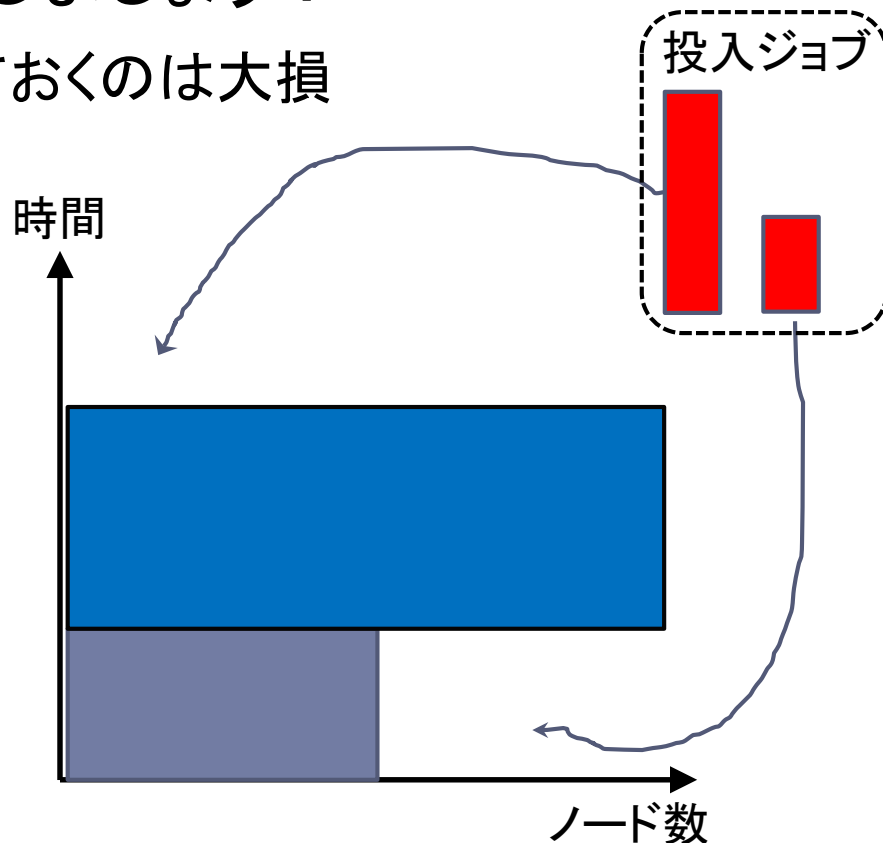
ジョブ待ち時間を減らすポイント

▶ 「walltime」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
#PBS -q u-lecture
#PBS -Wgroup_list=gt00
#PBS -l select=8:mpiprocs=36
#PBS -l walltime=00:01:00
cd $PBS_O_WORKDIR
. /etc/profile.d/modules.sh
mpirun ./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 : u-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：

▶ u-tutorial

▶ 最大10分まで

▶ 最大ノード数は8ノード(288コア) まで

▶ 本演習時間以外(24時間)のキュー名：

▶ u-lecture

▶ 利用条件は演習中のキュー名と同様

Reedbush-Uのバッチジョブキュー

■ 通常キューの一覧

代表キュー名	キュー名	最大ノード数	実行制限時間 (経過時間)
u-debug	u-debug	1-24	30 min
u-short	u-short	1-8	4 h
u-regular	u-small	4-16	48 h
	u-medium	17-32	48 h
	u-large	33-64	48 h
	u-x-large	65-128	24 h

■ 講習会用の特別キュー

u-tutorial	u-tutorial	1-8	10 min
u-lecture	u-lecture	1-8	10 min

バッチ処理システムの使い方

- ▶ **主要コマンド** (Reedbushの場合)
 - ▶ ジョブの投入:
`qsub <ジョブスクリプトファイル名>`
 - ▶ 自分が投入したジョブの状況確認: `rbstat`
 - ▶ 投入ジョブの削除: `qdel <ジョブID>`
 - ▶ バッチキューの状態を見る: `rbstat --rsc`
 - ▶ バッチキューの詳細構成を見る: `rbstat --rsc -x`
 - ▶ 投げられているジョブ数を見る: `rbstat -b`
 - ▶ 過去の投入履歴を見る: `rbstat -H`
 - ▶ 同時に投入できる数／実行できる数を見る: `rbstat --limit`

rbstat --rsc の実行画面例

```
$ rbstat --rsc
QUEUE                STATUS                NODE
u-debug              [ENABLE ,START]      54
u-short              [ENABLE ,START]      16
u-regular
|---- u-small        [ENABLE ,START]      288
|---- u-medium       [ENABLE ,START]      288
|---- u-large        [ENABLE ,START]      288
|---- u-x-large      [ENABLE ,START]      288
u-interactive        [ENABLE ,START]
|---- u-interactive_1 [ENABLE ,START]      54
|---- u-interactive_4 [ENABLE ,START]      54
u-lecture            [ENABLE ,START]      54
u-lecture8           [DISABLE,START]      54
u-tutorial           [ENABLE ,START]      54
```

↑
使える
キュー名
(リソース
グループ)

↑
現在
利用可能か

↑
利用可能ノード数

rbstat --rsc -x の実行画面例

```
$ rbstat --rsc -x
QUEUE                STATUS                MIN_NODE  MAX_NODE  MAX_ELAPSE  REMAIN_ELAPSE  MEM(GB)/NODE  PROJECT
u-debug              [ENABLE ,START]      1         24        00:30:00    00:30:00      244GB        pz0105,gcXX
u-short              [ENABLE ,START]      1         8         02:00:00    02:00:00      244GB        pz0105,gcXX
u-regular            [ENABLE ,START]
|---- u-small        [ENABLE ,START]      4         16        12:00:00    12:00:00      244GB        gcXX,pz0105
|---- u-medium       [ENABLE ,START]     17        32        12:00:00    12:00:00      244GB        gcXX
|---- u-large        [ENABLE ,START]     33        64        12:00:00    12:00:00      244GB        gcXX
|---- u-x-large      [ENABLE ,START]     65       128        06:00:00    06:00:00      244GB        gcXX
u-interactive        [ENABLE ,START]
|---- u-interactive_1 [ENABLE ,START]      1         1         00:15:00    00:15:00      244GB        pz0105,gcXX
|---- u-interactive_4 [ENABLE ,START]      2         4         00:05:00    00:05:00      244GB        pz0105,gcXX
u-lecture            [ENABLE ,START]      1         8         00:10:00    00:10:00      244GB        gt00,gtYY
u-lecture8           [DISABLE,START]      1         8         00:10:00    00:10:00      244GB        gtYY
u-tutorial           [ENABLE ,START]      1         8         00:10:00    00:10:00      244GB        gt00
```

使える
キュー名
(リソース
グループ)

現在
利用可能か

ノードの
実行情報

課金情報(財布)
実習では1つのみ

rbstat --rsc -b の実行画面例

```
$ rbstat --rsc -b
```

QUEUE	STATUS	TOTAL	RUNNING	QUEUED	HOLD	BEGUN	WAIT	EXIT	TRANSIT	NODE
u-debug	[ENABLE ,START]	1	1	0	0	0	0	0	0	54
u-short	[ENABLE ,START]	9	3	5	1	0	0	0	0	16
u-regular	[ENABLE ,START]									
---- u-small	[ENABLE ,START]	38	10	6	22	0	0	0	0	288
---- u-medium	[ENABLE ,START]	2	2	0	0	0	0	0	0	288
---- u-large	[ENABLE ,START]	4	2	0	2	0	0	0	0	288
---- u-x-large	[ENABLE ,START]	1	0	1	0	0	0	0	0	288
u-interactive	[ENABLE ,START]									
---- u-interactive_1	[ENABLE ,START]	0	0	0	0	0	0	0	0	54
---- u-interactive_4	[ENABLE ,START]	0	0	0	0	0	0	0	0	54
u-lecture	[ENABLE ,START]	0	0	0	0	0	0	0	0	54
u-lecture8	[DISABLE ,START]	0	0	0	0	0	0	0	0	54
u-tutorial	[ENABLE ,START]	0	0	0	0	0	0	0	0	54

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

JOBスクリプトサンプルの説明

(hello-pure.bash, C言語、Fortran言語共通)

```
#!/bin/bash
#PBS -q u-lecture
#PBS -Wgroup_list=gt00
#PBS -l select=8:mpiprocs=36
#PBS -l walltime=00:01:00
```

```
cd $PBS_O_WORKDIR
. /etc/profile.d/modules.sh
```

```
mpirun ./hello
```

キュー名
: u-lecture

利用グループ名
: gt00

利用ノード数

ノード内利用コア数
(MPIプロセス数)

実行時間制限
: 1分

MPIジョブを $8 * 36 = 288$ プロセス
で実行する。

カレントディレクトリ設定、環境変
数設定(必ず入れておく)

並列版Helloプログラムを実行しよう

- ▶ このサンプルのJOBスクリプトは `hello-pure.bash` です。
- ▶ 配布のサンプルでは、キュー名が“`u-lecture`”になっています
- ▶ `$ emacs hello-pure.bash` で、“`u-lecture`” → “`u-tutorial`”に変更してください

並列版Helloプログラムを実行しよう

1. Helloフォルダ中で以下を実行する
`$ qsub hello-pure.bash`
2. 自分の導入されたジョブを確認する
`$ rstat`
3. 実行が終了すると、以下のファイルが生成される
`hello-pure.bash.eXXXXXXXX`
`hello-pure.bash.oXXXXXXXX` (XXXXXXXXは数字)
4. 上記の標準出力ファイルの中身を見してみる
`$ cat hello-pure.bash.oXXXXXXXX`
5. “Hello parallel world!”が、
36プロセス*8ノード=288表示されていたら成功。

バッチジョブ実行による標準出力、標準エラー出力

- ▶ バッチジョブの実行が終了すると、標準出力ファイルと標準エラー出力ファイルが、ジョブ投入時のディレクトリに作成されます。
- ▶ 標準出力ファイルにはジョブ実行中の標準出力、標準エラー出力ファイルにはジョブ実行中のエラーメッセージが出力されます。

ジョブ名.oXXXXXX --- 標準出力ファイル
ジョブ名.eXXXXXX --- 標準エラー出力ファイル
(XXXXXX はジョブ投入時に表示されるジョブのジョブID)

並列版Helloプログラムの説明 (C言語)

このプログラムは、全コアで起動される

```
#include <stdio.h>
#include <mpi.h>
```

```
int main(int argc, char* argv[]) {
```

```
    int  myid, numprocs;
    int  ierr, rc;
```

```
    ierr = MPI_Init(&argc, &argv);
    ierr = MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &myid);
    ierr = MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &numprocs);
```

```
    printf("Hello parallel world! Myid:%d ¥n", myid);
```

```
    rc = MPI_Finalize();
```

```
    exit(0);
```

```
}
```

MPIの初期化

自分のID番号を取得
:各コアで値は異なる

全体のプロセッサ台数
を取得
:各コアで値は同じ
(演習環境では288)

MPIの終了



並列版Helloプログラムの説明 (Fortran言語)

このプログラムは、全コアで起動される

```
program main
```

```
common /mpienv/myid,numprocs
```

```
integer myid, numprocs  
integer ierr
```

```
call MPI_INIT(ierr)  
call MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD, myid, ierr)  
call MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD, numprocs, ierr)
```

```
print *, "Hello parallel world! Myid:", myid
```

```
call MPI_FINALIZE(ierr)
```

```
stop  
end
```

MPIの初期化

自分のID番号を取得
:各コアで値は異なる

全体のプロセッサ台数
を取得
:各コアで値は同じ
(演習環境では288)

MPIの終了

時間計測方法 (C言語)

```
double t0, t1, t2, t_w;  
..  
ierr = MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);  
t1 = MPI_Wtime();
```

<ここに測定したいプログラムを書く>

```
ierr = MPI_Barrier(MPI_COMM_WORLD);  
t2 = MPI_Wtime();
```

```
t0 = t2 - t1;  
ierr = MPI_Reduce(&t0, &t_w, 1,  
    MPI_DOUBLE, MPI_MAX, 0,  
    MPI_COMM_WORLD);
```

バリア同期後
時間を習得し保存

各プロセッサで、t0の値は異なる。
この場合は、最も遅いものの値をプロセッサ0番が受け取る

時間計測方法 (Fortran言語)

```
double precision t0, t1, t2, t_w  
double precision MPI_WTIME
```

```
..  
call MPI_BARRIER(MPI_COMM_WORLD, ierr)  
t1 = MPI_WTIME(ierr)
```

<ここに測定したいプログラムを書く>

```
call MPI_BARRIER(MPI_COMM_WORLD, ierr)  
t2 = MPI_WTIME(ierr)
```

```
t0 = t2 - t1  
call MPI_REDUCE(t0, t_w, 1,  
& MPI_DOUBLE_PRECISION,  
& MPI_MAX, 0, MPI_COMM_WORLD, ierr)
```

バリア同期後
時間を習得し保存

各プロセッサで、t0の値
は異なる。

この場合は、最も遅いもの
の値をプロセッサ0番
が受け取る

MPI実行時のリダイレクトについて

- ▶ Reedbushスーパーコンピュータシステムでは、**MPI実行時の入出力のリダイレクトができます。**
- ▶ 例) `mpirun ./a.out < in.txt > out.txt`

依存関係のあるジョブの投げ方 (ステップジョブ、チェーンジョブ)

- ▶ あるジョブスクリプト go1.sh の後に、go2.sh を投げたい
- ▶ さらに、go2.shの後に、go3.shを投げたい、ということがある
- ▶ 以上を、**ステップジョブ**または**チェーンジョブ**という。
- ▶ Reedbushにおけるステップジョブの投げ方

1. `$qsub go1.sh`

12345.reedbush-pbsadmin0

2. 上記のジョブ番号12345を覚えておき、以下の入力をする

`$qsub -W depend=afterok:12345 go2.sh`

12346.reedbush-pbsadmin0

3. 以下同様

`$qsub -W depend=afterok:12346 go3.sh`

12347.reedbush-pbsadmin0

afterok: 前のジョブが正常に終了したら実行する

afternotok: 前のジョブが正常終了しなかった場合に実行する

afterany: どのような状態でも実行する

おわり

お疲れさまでした