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

[Oakforest-PACS(OFP)編]

第113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

Oakforest-PACSへログイン

- ターミナルから、以下を入力する
  ```
  $ ssh ofp.jcahpc.jp -l txxxxx
  ```
  「-l」はハイフンと小文字のL、
  「txxxxx」は利用者番号
- 接続するかと尋ねられるので、 yes を入力する
- 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）
  を入力する
- 成功すると、ログインができる

Oakforest-PACSのデータをPCに取り込む

- ターミナルでscpコマンドを使う

- `$ scp txxxxx@ofp.jcahpc.jp:~/a.f90 ./`
  「txxxxx」は利用者番号
  - OFP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場合は -r を指定する
- `$ scp -r txxxxx@ofp.jcahpc.jp:~/SAMP ./`
  - OFP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

PCのファイルをOakforest-PACSに置く

- 同様にターミナルでscpコマンドを使う

- `$ scp ./a.f90 txxxxx@ofp.jcahpc.jp:`
  「txxxxx」は利用者番号
  - PCのカレントディレクトリにある a.f90 を、OFP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 を指定する
- `$ scp -r ./SAMP txxxxx@ofp.jcahpc.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、OFP上のホームディレクトリに置く

Oakforest-PACSにおける注意

- /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。
- 転送が終わったら、/workに移動(mv)してください。
- または、直接 /workを指定して転送してください。

- ホームディレクトリ: /home/gt00/txxxxx
  - cd コマンドで移動できます。
- Workディレクトリ: /work/gt00/txxxxx

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 [Oakforest-PACS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-OFP.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

  /work/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. Workディレクトリ(/work/gt00/txxxxx)に移動する
2. /work/gt00/z30107 にある Samples-OFP.tar を自分のディレクトリにコピーする
   $ cp /work/gt00/z30107/Samples-OFP.tar ./
3. Samples-fx.tar を展開する
   $ tar xvf Samples-OFP.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. make する

   ```
   $ make
   ```

7. 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

Oakforest-PACS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
  - OFPでは、以下に限定
    - 1ノード(68コア):2時間まで
    - 16ノード(1,088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
  - 実行させたい処理をファイル(ジョブスクリプト)で指示する
  - スパコン環境で一般的
  - 大規模実行用
  - OFPでは、最大2048ノード(139,264コア)(24時間)

※講習会アカウントではバッチジョブ実行のみ、最大16ノード15分まで

Oakforest-PACSスーパーコンピュータシステムでのジョブ実行形態(2)

- 2つの異なるメモリモードを用意
  - Flatモード
    - MCDRAMとDDR4メモリを個別にアクセス可能
  - Cacheモード
    - MCDRAMはDDR4メモリのキャッシュとして働く

- 各ジョブキューには、-flat, -cache をそれぞれ用意
  - 講習会アカウントでは、Flatモードだけが使えます。

インタラクティブ実行のやり方

- コマンドラインで以下を入力
  - 1ノード実行用
  - `$ pjsub --interact -g gt00 -L rg=interactive-{flat,cache},elapse=01:00`
  - 16ノード実行用
  - `$ pjsub --interact -g gt00 -L rg=interactive-{flat,cache},node=16,elapse=01:00`

※コマンドは改行せず1行で入力すること

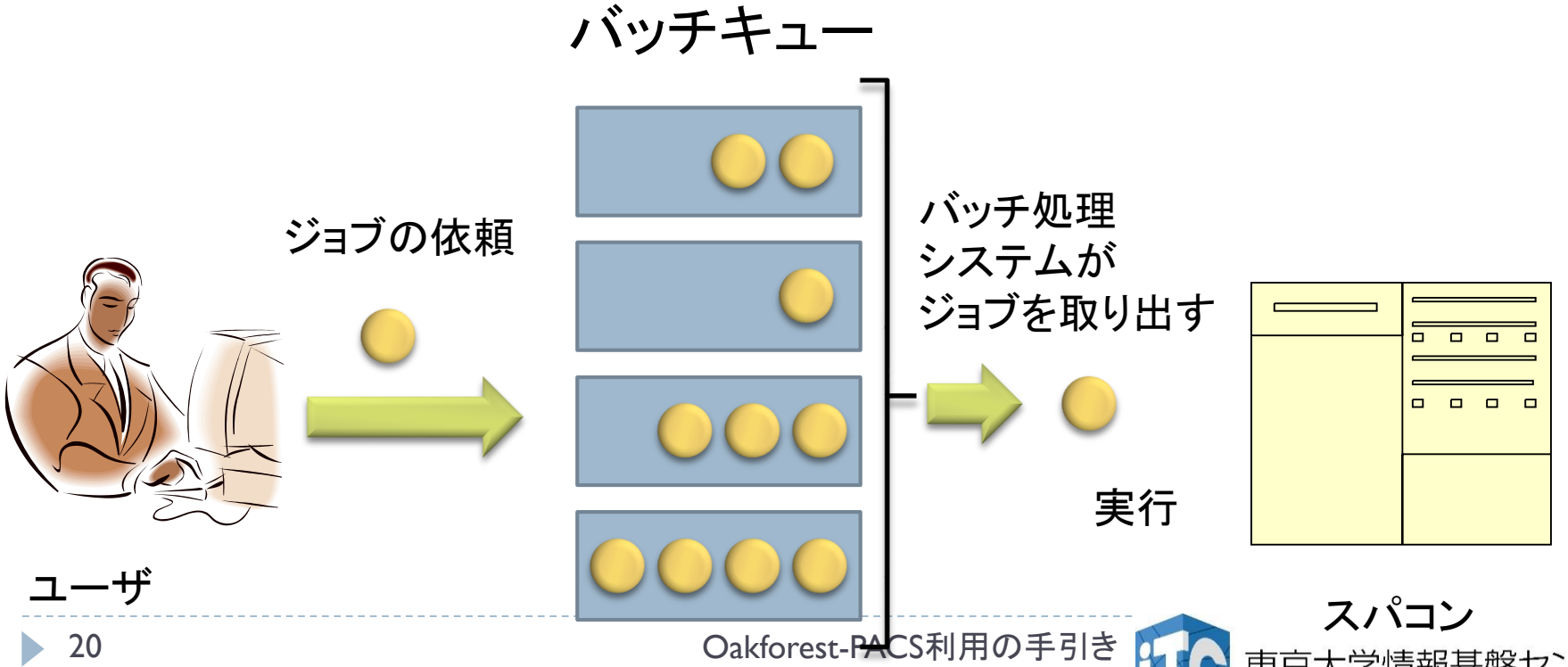
※インタラクティブ用のノードがすべて使われている場合、資源が空くまで、ログインできません。
※講習会アカウントでは使えません。

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

- OFPでは、コンパイラはバッチ実行、インタラクティブ実行で共通に使えます。
- 例）Intelコンパイラ
  - C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）
  - KNL向け最適化： -xMIC-AVX512
    - ログインノードやプレポスト用ノードで実行する可能性もある場合: -axMIC-AVX512

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。



バッチキューの設定のしかた

- OFPでのバッチ処理は、富士通のバッチシステムで管理されています。
- 以下、主要コマンドを説明します。
  - ジョブの投入：pjsub <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：pjstat
  - 投入ジョブの削除：pjdel <ジョブID>
  - バッチキューの状態を見る：pjstat --rsc
  - バッチキューの詳細構成を見る：pjstat --rsc -x
  - 投げられているジョブ数を見る：pjstat -b
  - 過去の投入履歴を見る：pjstat -H
  - 同時に投入できる数／実行できる数を見る：pjstat --limit

ジョブスクリプトの例

※実行させたい処理によって
各項目の内容は異なります

```
#!/bin/bash
#PJM -L rscgrp=lecture-flat
#PJM -L node=2
#PJM --mpi proc=4
#PJM --omp thread=16
#PJM -L elapse=0:01:00
#PJM -g gt00

mpirun ./a.out
```

リソースグループ名
:lecture-flat

利用ノード数

MPIプロセス数

プロセスあたりの
スレッド数

実行時間制限
:1分

利用グループ名
:gt00

プログラムを実行

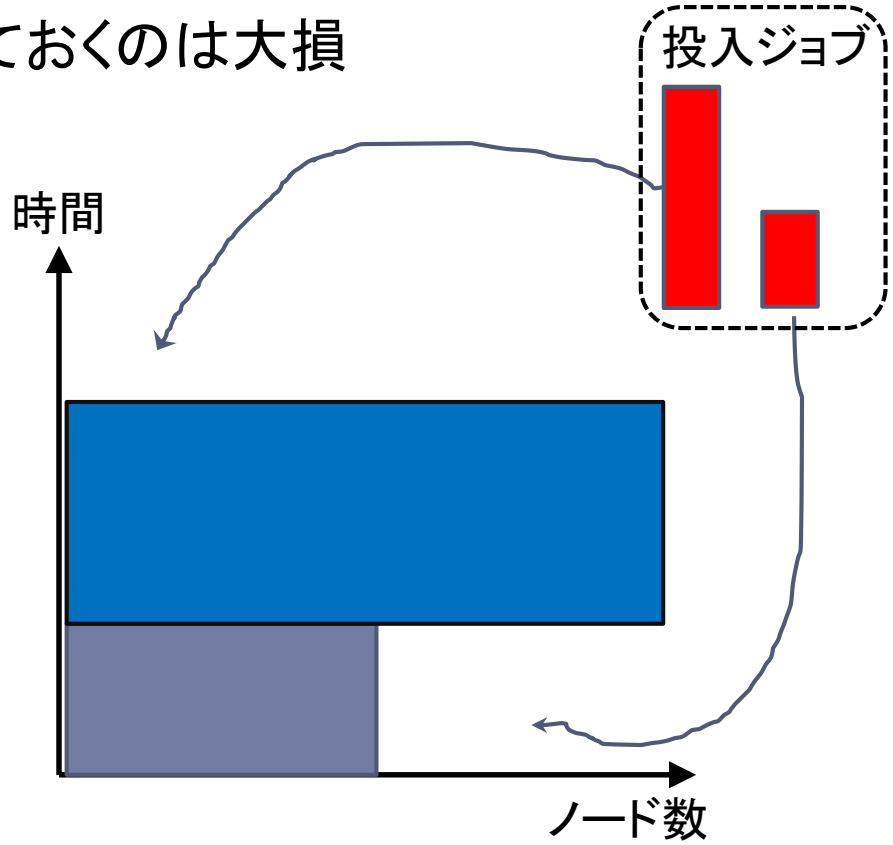
ジョブ待ち時間を減らすポイント

- 「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-flat
#PJM -L node=2
#PJM --mpi proc=4
#PJM --omp thread=16
#PJM -L elapse=0:01:00
#PJM -g gt00

mpirun ./a.out
```

ジョブスクリプトファイルの例



Backfillのイメージ図

本お試し講習会でのキュー・グループ名

- 本演習中のキュー名：
  - tutorial-flat
  - 最大10分まで
  - 最大ノード数は16ノード(1088コア) まで
- 本演習時間以外（24時間）のキュー名：
  - lecture-flat
  - 利用条件は演習中のキュー名と同様
- グループ名：gt00

pjstat --rsc の実行画面例

```
$ pjstat --rsc
RSCGRP                          STATUS              NODE
regular-cache
  |---- small-cache             [ENABLE,START]      3846
  `---- medium-cache            [ENABLE,START]      3846
regular-flat
  |---- small-flat               [ENABLE,START]      3846
  `---- medium-flat              [ENABLE,START]      3846
interactive-cache
  |---- interactive_n1-cache     [ENABLE,START]       100
  `---- interactive_n16-cache    [ENABLE,START]       100
interactive-flat
  |---- interactive_n1-flat      [ENABLE,START]       100
  `---- interactive_n16-flat     [ENABLE,START]       100
debug-cache                     [ENABLE,START]       234
debug-flat                      [ENABLE,START]       234
prepost                         [ENABLE,START]        12
```

使える
キュー名
(リソース
グループ)

現在
使えるか

ノードの
利用可能数

pjstat --rsc -x の実行画面例

```
$ pjstat --rsc -x
RSCGRP                    STATUS          MIN_NODE MAX_NODE MAX_ELAPSE REMAIN_ELAPSE MEM(GB) PROJECT
regular-cache
  |---- small-cache        [ENABLE,START]         1      128 48:00:00      48:00:00       82 pz0105
  `---- medium-cache       [ENABLE,START]       129      512 48:00:00      48:00:00       82 pz0105
regular-flat
  |---- small-flat         [ENABLE,START]         1      128 48:00:00      48:00:00       96 pz0105
  `---- medium-flat        [ENABLE,START]       129      512 48:00:00      48:00:00       96 pz0105
interactive-cache
  |---- interactive_n1-cache  [ENABLE,START]       1        1 02:00:00      02:00:00       82 pz0105
  `---- interactive_n16-cache [ENABLE,START]       2       16 00:10:00      00:10:00       82 pz0105
interactive-flat
  |---- interactive_n1-flat   [ENABLE,START]       1        1 02:00:00      02:00:00       96 pz0105
  `---- interactive_n16-flat  [ENABLE,START]       2       16 00:10:00      00:10:00       96 pz0105
debug-cache               [ENABLE,START]         1      128 00:30:00      00:30:00       82 pz0105
debug-flat                [ENABLE,START]         1      128 00:30:00      00:30:00       96 pz0105
prepost                   [ENABLE,START]         1        1 06:00:00      06:00:00      222 pz0105
```

使える
キュー名
(リソース
グループ)

現在
使えるか

ノードの
実行情報

課金情報(財布)
実習では1つのみ

pjstat --rsc -b の実行画面例

```
$ pjstat --rsc -b
RSCGRP                        STATUS          TOTAL RUNNING QUEUED  HOLD OTHER   NODE
regular-cache
  |---- small-cache           [ENABLE,START]     45      40      5     0     0   3846
  `---- medium-cache          [ENABLE,START]      1       1      0     0     0   3846
regular-flat
  |---- small-flat            [ENABLE,START]    150     120     30     0     0   3846
  `---- medium-flat           [ENABLE,START]      7       3      4     0     0   3846
interactive-cache
  |---- interactive_n1-cache  [ENABLE,START]      0       0      0     0     0    100
  `---- interactive_n16-cache [ENABLE,START]      0       0      0     0     0    100
interactive-flat
  |---- interactive_n1-flat   [ENABLE,START]      1       1      0     0     0    100
  `---- interactive_n16-flat  [ENABLE,START]      0       0      0     0     0    100
debug-cache                   [ENABLE,START]      7       4      3     0     0    234
debug-flat                    [ENABLE,START]      0       0      0     0     0    234
prepost                       [ENABLE,START]      0       0      0     0     0     12
```

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

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、
  キューが”lecture”になっています
- $ emacs hello-pure.bash
  で、“lecture” → “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
   $ pjsub hello-pure.bash
2. 自分の導入されたジョブを確認する
   $ pjstat
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.eXXXXXX
   hello-pure.bash.oXXXXXX （XXXXXXは数字）
4. 上記の標準出力ファイルの中身を見てみる
   $ cat hello-pure.bash.oXXXXXX
5. “Hello parallel world!”が、
   64プロセス*4ノード=256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.oXXXXX --- 標準出力ファイル
ジョブ名.eXXXXX --- 標準エラー出力ファイル
(XXXXX 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192）

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192）

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

各プロセッサーで、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

各プロセッサーで、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

おわり

お疲れさまでした