

第138回お試しアカウント付き講習会
「スーパーコンピューター超入門」
2020年9月18日

利用実習編

本資料はWindowsマシン上でCygwinを使われる方、
あるいはMac, Linux を使われる方向けのものです

2020/9/23 v2.0 (修正版)

実習内容

1. スーパーコンピュータへのログイン
初めてスパコンに入る
2. 簡単なプログラムの作成、ジョブの実行
初めてスパコンでファイルを操作、
初めてスパコンでプログラムをコンパイル、そして計算
3. サンプル並列プログラムの実行（積分計算）
初めて並列化による計算の高速化を実感
4. 計算した結果を自分のコンピュータに転送（時間あれば）

スーパーコンピューター (スパコン) 利用のイメージ

通常、スパコンでは
ログインノードと呼ば
れる玄関口から実行
命令を出します



端末

1. ログイン
SSH

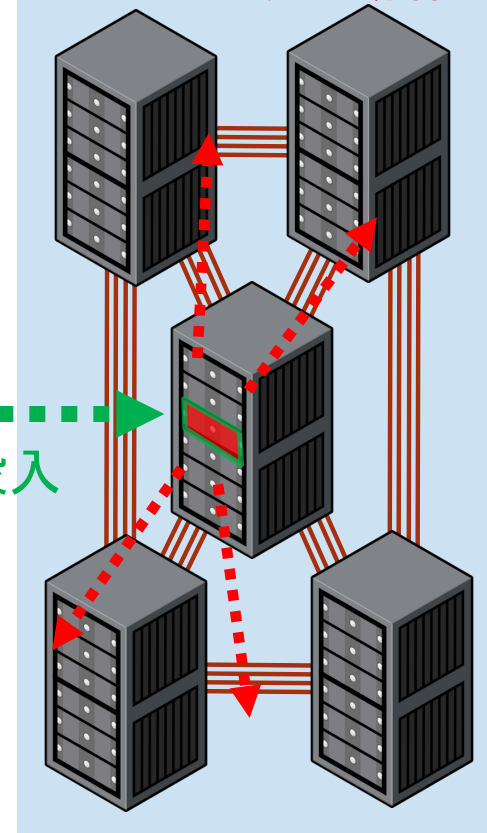
```
[tut138@obcx02~]$ ls -l  
drwxr-x--- 2 shiba group 10 1  
Apr 13:00 test.out  
[tut138@obcx02~]$ ./test.out  
Hello world  
[tut138@obcx02~]$ qsub a.sh
```



ログインノード

2. ジョブ投入

3. プログラム動作



計算ノード
= 本体

SSH で接続するには
鍵の準備が必要！

鍵の作成 (Cygwin, Mac, Linux の方)

PC上で鍵(秘密鍵, 公開鍵)を生成(1/3)

Cygwin またはターミナルを開いたその場所から下記の操作を開始

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

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

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

Return

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

パスワードを設定

Return

```
Enter same passphrase again:
```

同じパスワード

Return

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

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

```
The key fingerprint is:
```

```
SHA256:vt880+PTcscHkOyabvxGjeRsMWLAWds+ENsDcReNwKo tut138@ITCUT-VAIO
```

```
The key's randamart image is:
```

```
+---[RSA 2048]-----+
|
| . o=oo. o+
| + 0. . . .
| . +o+
| . +oB.
| So *o*
| E B. o
| . = . o
| . =oB o +
| . +o+*0 ..
+---[SHA256]-----+
```

操作手順

- `ssh-keygen -t rsa <Return>`
- `<Return>`
- `好きなパスワード <Return>`
- `同じパスワード <Return>`

鍵が作成できたはず

鍵の作成 (Cygwin, Mac, Linux の方)

PC上に秘密鍵、公開鍵があることを確認(2/3)

コマンドの意味がわからない方も、黄色の文字を打って、同じような画面になる確認してください。

```
$ cd .ssh
```

```
$ ls
```

```
id_rsa  
id_rsa.pub
```

```
⇒秘密鍵 (Private Key)  
⇒公開鍵 (Public Key)
```

```
$ cat id_rsa.pub
```

```
ssh-rsa
```

```
AAAAB3NzaC1yc2EAAAADAQABAAQDA6Inm0YYaCrWjQDukjiNEfdW8veUwJyZtEI3oDu0A28eey6p0wbtI7JB  
09xnI1707HG4yYvOM81+/nIAHy5tAfJly0dsPzjTgdTBLdgi3cSf5pWEY6U96yaErOEi8Wge1HkXrhcwUjGDVTz  
vT0Refe6zLdRziL/KNmmesSQfR5lsZ/ihsjMgFxFxGaKsHHq/IErCtHIIf9V/Ds2yj6vkAaWH6asBn+ZsRiRFvwh  
PhkYAnp/j3LY6b8Qfqg0p4WZRenh/HgySWTYIGi8x67VzMaUIm9qIKOQFMCaK2rivX1fmbwyWJ/vrWDqiek6YXo  
xLDu+GPeQ4CPvxJcZnqF9gf3 tut138@ITCUT-VAIO
```

鍵の作成 (Cygwin, Mac, Linux)

公開鍵をコピーする(3/3)

通常のカットアンドペーストの手順で「公開鍵」をコピー

```
$ cd .ssh
```

```
$ ls
```

```
id_rsa  
id_rsa.pub
```

```
$ cat id_rsa.pub
```

```
ssh-rsa
```

```
AAAAB3NzaC1yc2EAAAADAQABAAQDA6Inm0YYaCrWjQDukjiNEfdW8veUwJyZtEI3oDu0A28eey6p0wbtI7JB  
09xnI1707HG4yYvOM81+/nIAHy5tAfJly0dsPzjTgdTBLdgi3cSf5pWEY6U96yaErOEi8Wge1HkXrhcwUjGDVTz  
vT0Ref6zLdRziL/KNmmsSQfR5lsZ/ihsjMgFxFxGaKsHHq/IErCtHIIf9V/Ds2yj6vkAaWH6asBn+ZsRiRFvwh  
PhkYAnp/j3LY6b8Qf9g0p4WZRenh/HgySWTYIGi8x67VzMaUIm9qIKOQFMCaK2rivX1fmbwyWJ/vrWDqiek6YXo  
xLDu+GPeQ4CPvxJcZnqF9gf3 tut138@ITCUT-VAIO
```

操作手順

- `cat id_rsa.pub` <Return>
- “ssh-rsa”にカーソルを合わせ
- 最後の行の”f3”までを選択して「Copy」によって記憶
- 最後の「tut138@ITCUT-VAIO」まで含んでも良いが、ここに漢字が含まれていると登録に失敗します。

SSH Public Key Authentication

SSH公開鍵認証

SSH= Secure Shell

- id_rsa
 - Private Key（秘密鍵）：PC上
 - 文字通り「秘密」にしておくこと
 - 他の人に送ってはいけない
 - 基本的には作成した場所からコピーしたり移動することもしないこと
- id_rsa.pub
 - Public Key（公開鍵）：スパコン上
 - コピー可能，他の人にe-mailで送ることも可能
- **もし複数のPCからスパコンにログインする場合は，各PCごとに「公開鍵・秘密鍵」のペアをssh-keygenによって作成**
 - **各スパコンに複数の公開鍵を登録することは可能**
 - **スパコン上の公開鍵のうちの一つがPC上の「秘密鍵+Passphrase」とマッチすると確認されるとログインできる**

①スパコンポータルサイトにログイン

<https://obcx-www.cc.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/hpcportal.ja/index.cgi>

The screenshot shows a web browser window displaying the login page of the Oakbridge-CX portal. The browser's address bar shows the URL <https://obcx-www.cc.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/hpcportal.ja/index.cgi>. The page title is "Oakbridge-CX 利用支援ポータル".

The login form is titled "ログイン" and contains the following elements:

- A header instruction: "ユーザー名とパスワードを入力して「ログイン」ボタンをクリックしてください。" (Enter your username and password and click the "Login" button.)
- A "ユーザー名:" (Username) input field, highlighted with a red box.
- A "パスワード:" (Password) input field, highlighted with an orange box.
- A "ログイン" (Login) button, highlighted with a red box.
- A "リセット" (Reset) button, highlighted with an orange box.

Two callout boxes provide additional information:

- A pink box on the left states: "情報基盤センターから送付された利用者ID (tUVXYZ)" (User ID sent from the Information Infrastructure Center: tUVXYZ).
- A yellow box on the right states: "情報基盤センターから送付された初期パスワード" (Initial password sent from the Information Infrastructure Center).

At the bottom of the page, there is a footer: "Copyright 2019 FUJITSU LIMITED".

②初期パスワードの変更

The screenshot shows a web browser window with the URL https://obcx-www.cc.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/hpccportal_u.ja/index.cgi. The page title is "Oakbridge-CX 利用支援ポータル". On the left, there is a navigation menu with items like "お知らせ", "SSH公開鍵登録", "メール転送設定", "パスワード変更", "トークン表示", "ディスク使用量表示", "プリポスト予約", "ドキュメント閲覧", and "OSS". The main content area is titled "パスワード変更" and contains the following text: "本機能で変更可能なパスワードは、Oakbridge-CXシステムの利用支援ポータル用パスワードです。". Below this text are three input fields: "現在のパスワード" (Current Password), "新しいパスワード" (New Password), and "新しいパスワード(再入力)" (New Password (Re-enter)). A "変更" (Change) button is located below the input fields. A yellow box highlights the "現在のパスワード" field with the text "情報基盤センターから送付された初期パスワード". A brown box highlights the "新しいパスワード" and "新しいパスワード(再入力)" fields with the text "変更後のパスワードを入力 (2回)".

パスワード変更

本機能で変更可能なパスワードは、Oakbridge-CXシステムの利用支援ポータル用パスワードです。

現在のパスワード

新しいパスワード

新しいパスワード(再入力)

変更

情報基盤センターから送付された初期パスワード

変更後のパスワードを入力 (2回)

パスワード規約

- 8文字以上，現在と3文字以上異なる
- 2世代前までと異なる
- 英字(小文字，大文字)，数字，特殊文字各1字以上
- Linux辞書に登録されている語は不可
- 全角文字不可

③公開鍵登録 (id_rsa.pub)

Oakbridge-CX 利用支援ポータル

SSH公開鍵登録

公開鍵を削除しました。

登録方式

直接入力

ファイルアップロード

```
ssh-rsa
AAAAB3NzaC1yc2EAAAADAQABAAQDa6InmOYYaCrWjQDukjiNEfdW8veUwJyZtEI3oDu0
A28eey6p0wbtI7JB09xnI17O7HG4yYvOM81+/nIAHy5tAfJly0dsPzjTgdTBLdgi3cSf5pWEY6U9
6yaEr0Ei8Wge1HkXrhcwUjGDVTzvT0Refe6zLdRziL/KNmmesSQfR5lsZ/ihsjMgFxFxGaKsHHq
/IErCtHIIIIf9V/Ds2yj6vkAaWH6asBn+ZsRiRFvWHPHkYAnp/j3LY6b8Qfqg0p4WZRenh
/HgySWTYIGi8x67VzMaUIm9qIK0QFMCaK2rivX1fmbwyWJ
/vrWDqiek6YXoxLDu+GPeQ4CPvxJcZnqF9gf3
```

登録

1. 「SSH公開鍵登録」を選択
2. 先ほどCopyした公開鍵 (id_rsa.pub) を貼り付ける
3. 「登録」をクリック

よくトラブルが起きますので、先に進めなければ質問してください

スパコンには複数の公開鍵を登録できる

Oakbridge-CX 利用支援ポータル

https://obcx-www.cc.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/hpcportal_u.ja/index.cgi

Oakbridge-CX 利用支援ポータル

ログアウト

お知らせ

SSH公開鍵登録

メール転送設定

パスワード変更

トークン表示

ディスク使用量表示

プリポスト予約

ドキュメント閲覧

OSS

SSH公開鍵登録

公開鍵を登録しました。

登録されている公開鍵	ssh-rsa AAAAB3NzaC.....JcZnqF9gf3	表示	削除
	ssh-rsa AAAAB3NzaC.....pWGVie6w==	表示	削除

登録方式

直接入力

ファイルアップロード

Copyright 2019 FUJITSU LIMITED

ページ内検索

すべて強調表示(A) 大文字/小文字を区別(C) 発音区別符号を区別(U) 単語単位(W)

22:36 2020/04/15

ポータルサイトでのマニュアル等閲覧 (1/2)

Oakbridge-CX 利用支援ポータル

https://obcx-www.cc.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/hpcportal_u.ja/index.cgi

Oakbridge-CX 利用支援ポータル

ログアウト

- お知らせ
- SSH公開鍵登録
- メール転送設定
- パスワード変更
- トークン表示
- ディスク使用量表示
- プリポスト予約
- ドキュメント閲覧**
- OSS

ドキュメント閲覧の利用について

Oakbridge-CX マニュアルの Web 閲覧サービスを利用するには、以下の禁止事項を遵守していただきます。

- 核兵器又は生物化学兵器及びこれらを運搬するためのミサイル等の大量破壊兵器の開発、設計、製造、保管及び使用等の目的に利用しない。
- スーパーコンピュータの利用が認められた利用者本人のみが利用し、他者には利用させない。
- 本マニュアルの情報（印刷、コピーしたものを含む）を、利用者以外に開示または提供しない。
- 当センターが上記条項の違反、その他不正使用を検知した場合、当センターは利用者の Web 閲覧サービスの利用を直ちに停止することができる。また、利用者はこれに対して一切異議を唱えない。

上記禁止事項を
遵守する

Copyright 2019 FUJITSU LIMITED

ページ内検索 すべて強調表示(A) 大文字/小文字を区別(C) 発音区別符号を区別(U) 単語単位(W)

22:37
2020/04/15

ポータルサイトでのマニュアル等閲覧 (2/2)

Oakbridge-CX 利用支援ポータル

https://obcx-www.cc.u-tokyo.ac.jp/cgi-bin/hpcportal_uja/index.cgi

Oakbridge-CX 利用支援ポータル

ログアウト

- お知らせ
- SSH公開鍵登録
- メール転送設定
- パスワード変更
- トークン表示
- ディスク使用量表示
- プリポスト予約
- ドキュメント閲覧**
- OSS

Oakbridge-CX 利用手引書

ドキュメント名	言語	最新更新日
Oakbridge-CX システム利用手引書	日本語	2019/10/01
Oakbridge-CX グループコース プロジェクト管理者用利用手引書	日本語	2019/07/03

製品マニュアル

インテルParallel Studio XE 2019

ドキュメント名	言語	最新更新日
スタートアップガイド	日本語 英語	2019/07/01
Fortranコンパイラ19.0 スタートアップガイド	日本語 英語	2019/07/01
C++コンパイラ19.0 スタートアップガイド	日本語 英語	2019/07/01

インテルMPIライブラリ 2019

ドキュメント名	言語	最新更新日
スタートアップガイド	英語	2019/07/01

インテルMKL 2019

ドキュメント名	言語	最新更新日
スタートアップガイド	日本語 英語	2019/07/01

Copyright 2019 FUJITSU LIMITED

ページ内検索 すべて強調表示(A) 大文字/小文字を区別(C) 発音区別符号を区別(I) 単語単位(W)

スパコンにログイン (Cygwin, Mac, Linux)

```
$ ssh tUVXYZ@obcx.cc.u-tokyo.ac.jp  
Enter passphrase for key '/home/tut138/.ssh/id_rsa:
```

Your Passphrase

Return

1. `ssh tUVXYZ@obcx.cc.u-tokyo.ac.jp` <Return>
2. **鍵生成時に打ち込んだPassphrase** <Return>

スパコンにログイン (Cygwin, Mac, Linux)

Last login: Sun Apr 12 15:05:47 2020 from obcx01.cc.u-tokyo.ac.jp

Oakbridge-CX Information

Date: Apr. 03, 2020

Welcome to Oakbridge-CX system

* Operation Schedule

04/24 (Fri) 09:00 -	04/24 (Fri) 20:00	System Maintenance
04/24 (Fri) 20:00 -		Normal Operation

ログインに成功したら、今後のメンテナンスのスケジュールなどが表示される

For more information about this service, see

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supercomputer/schedule.php>

* How to use

Users Guide can be found at the User Portal (<https://obcx-www.cc.u-tokyo.ac.jp/>).

If you have any questions, please refer to the following URL and contact us:

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/supports/contact/>

* Updated OBCX Users Guide

10/01 (Tue): v1.0

Set your email address on the User Portal [<https://obcx-www.cc.u-tokyo.ac.jp>]

[tUVXYZ@obcx01 ~]\$

ログインしたら

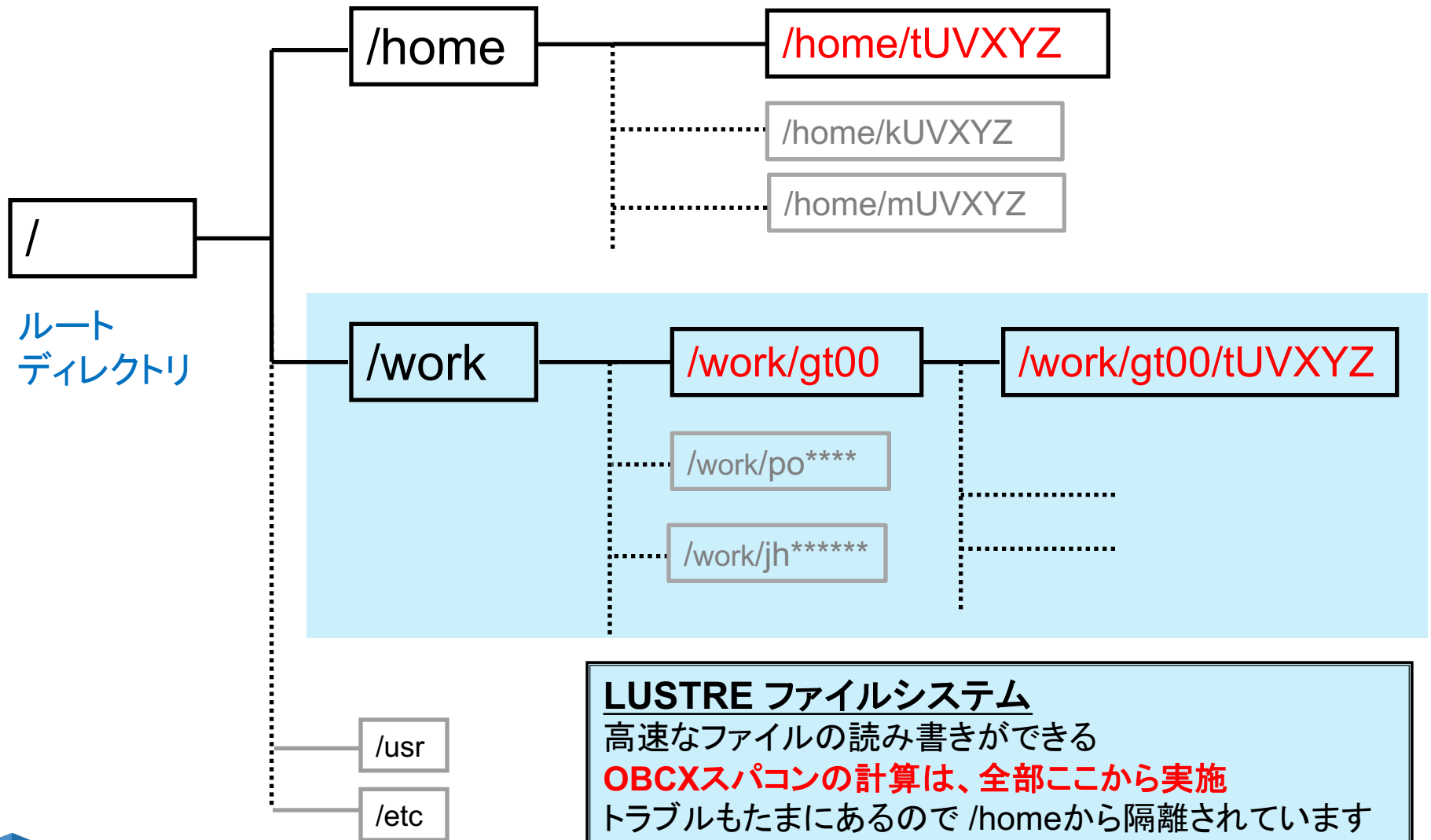
ログインノード上のLinux の操作画面になります
→ 命令文を打ちます

```
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ pwd 
```

```
/home/tUVXYZ
```

pwd — 現在のディレクトリ(フォルダ)
を位置を返すコマンド

OBCXのディレクトリ構成



LUSTRE ファイルシステム

高速なファイルの読み書きができる

OBCXスパコンの計算は、全部ここから実施

トラブルもたまにあるので /home から隔離されています

Linux のコマンド集（簡単なもの）

コマンド	
cd	現在のディレクトリの変更
ls	ファイル・ディレクトリの表示
pwd	現在のディレクトリの表示
mv	ファイル・ディレクトリの移動
cp	ファイル・ディレクトリのコピー
rm	ファイル・ディレクトリの消去（注意して使う）
mkdir	新たな空きディレクトリの作成
cat	ファイル内容の表示（全体）
less	ファイル内容の表示（一画面ごと）
head	ファイル内容の表示（先頭部分）
tail	ファイル内容の表示（末尾部分）
grep	ファイルに含まれる文字列を検索
echo	変数や文字列の値を出力
exit	セッションを終了する

ログインしたら

```
$ pwd 
```

```
/home/tUVXYZ
```

```
$ cd /work/gt00/tUVXYZ 
```

```
$ pwd 
```

```
/work/gt00/tUVXYZ
```

```
$ cd 
```

```
$ pwd 
```

```
/home/t00XYZ
```

1. ログインしたら「/home/tUVXYZ」に入る
2. /homeは容量が少ないので「/work/gt00/tUVXYZ」に移動すること
3. 「cd」でホームに戻れます

プログラム例題：フィボナッチ数列

漸化式で定義

$$F_0 = 1$$

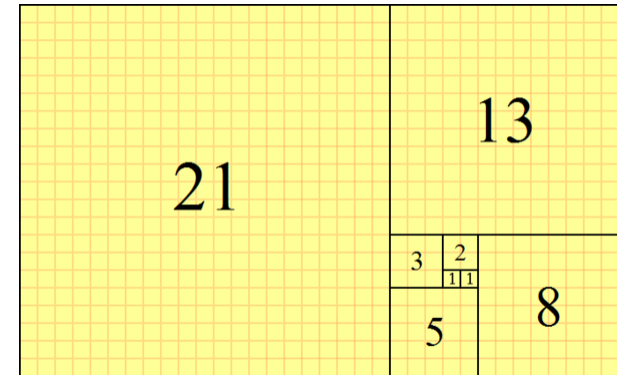
$$F_1 = 1$$

$$F_n = F_{n-1} + F_{n-2} \quad (n \geq 2)$$

繰り返し計算で数列が得られる

1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, 21

繰り返し計算はスーパーコンピュータ利用の出発点



From Wikipedia

<https://ja.wikipedia.org/wiki/フィボナッチ数>

プログラム例題：フィボナッチ数列 92個

1	75025	7778742049	806515533049393
1	121393	12586269025	1304969544928657
2	196418	20365011074	2111485077978050
3	317811	32951280099	3416454622906707
5	514229	53316291173	5527939700884757
8	832040	86267571272	8944394323791464
13	1346269	139583862445	14472334024676221
21	2178309	225851433717	23416728348467685
34	3524578	365435296162	37889062373143906
55	5702887	591286729879	61305790721611591
89	9227465	956722026041	99194853094755497
144	14930352	1548008755920	160500643816367088
233	24157817	2504730781961	259695496911122585
377	39088169	4052739537881	420196140727489673
610	63245986	6557470319842	679891637638612258
987	102334155	10610209857723	1100087778366101931
1597	165580141	17167680177565	1779979416004714189
2584	267914296	27777890035288	2880067194370816120
4181	433494437	44945570212853	4660046610375530309
6765	701408733	72723460248141	7540113804746346429
10946	1134903170	117669030460994	
17711	1836311903	190392490709135	
28657	2971215073	308061521170129	
46368	4807526976	498454011879264	

パソコンでも計算は一瞬

エディタでプログラムを作成する

さて、実際に作業してみましょう。
プログラムを編集するディレクトリを作成します。

```
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ cd   
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ mkdir fibonacci   
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ cd fibonacci 
```

ログインノード上では、Emacs, vim, または nano のエディタを利用してください。

例1: Emacs を使用, Fortranプログラムを作成

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ emacs fibonacci.f90 
```

例2: vim を使用, Python プログラムを作成

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ vim fibonacci.py 
```

例3: nano を使用, C プログラムを作成

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ nano fibonacci.c 
```


Emacs

Emacsの基本的な操作方法について

編集画面



Welcome to [GNU Emacs](#), one component of the [GNU/Linux](#) operating system.

[Emacs Tutorial](#) Learn basic keystroke commands (Emacs 入門ガイド)
[Emacs Guided Tour](#) Overview of Emacs features at gnu.org
[View Emacs Manual](#) View the Emacs manual using Info
[Absence of Warranty](#) GNU Emacs comes with **ABSOLUTELY NO WARRANTY**
[Copying Conditions](#) Conditions for redistributing and changing Emacs
[Ordering Manuals](#) Purchasing printed copies of manuals

To start... [Open a File](#) [Open Home Directory](#) [Customize Startup](#)
 To quit a partially entered command, type Control-g.

This is GNU Emacs 26.3 (build 1, x86_64-redhat-linux-gnu, GTK+ Version 3.24.13)
 of 2019-12-11
 Copyright (C) 2019 Free Software Foundation, Inc.

Auto-save file lists were found. If an Emacs session crashed recently,
 type [M-x recover-session RET](#) to recover the files you were editing.

Emacs prompt: `GNU Emacs* All 15 (Fundamental)`
 Command line: `Find file: ~/`

\$emacs で起動

- C→Ctrlキー、M→Metaキー(ESC)、
- → 同時押し
- Ctrl-zを押さないように注意

操作	コマンド
ファイルを開く	C-x, C-f ファイル名 Ret
別名保存	C-x, C-w ファイル名 Ret
上書き保存	C-x, C-s
Mark Set	C-space
コピー	Mark Set, 範囲選択, M, w
切り取り	Mark Set, 範囲選択, C-w
貼り付け	C-y
検索	C-s
Undo	C-x, u
キャンセル	C-g
終了	C-x, C-c

コマンド確認画面

Vim

Vimの基本的な操作方法について

編集画面

```

VIM - Vi IMproved

version 8.2.905
  by Bram Moolenaar 他.
  Modified by <bugzilla@redhat.com>
  Vim はオープンソースであり自由に配布可能です

  Vimの開発を応援してください！
  詳細な情報は      :help sponsor<Enter>

  終了するには      :q<Enter>
  オンラインヘルプは :help<Enter> か <F1>
  バージョン情報は  :help version8<Enter>
  
```

\$vim で起動

Vimではノーマルモード、入力モードとコマンドラインモードを切り替えて使う

現在のモード	移行先モード	キー
ノーマル	入力	i, a, Ins
ノーマル	コマンドライン	:
入力	ノーマル	esc, ctrl-c

操作	コマンド
ファイルを開く	e Ret
別名保存	w ファイル名 Ret
上書き保存	w Ret
1行コピー	yy
1行切り取り	dd
貼り付け	p
検索	/検索対象 Ret
終了	q

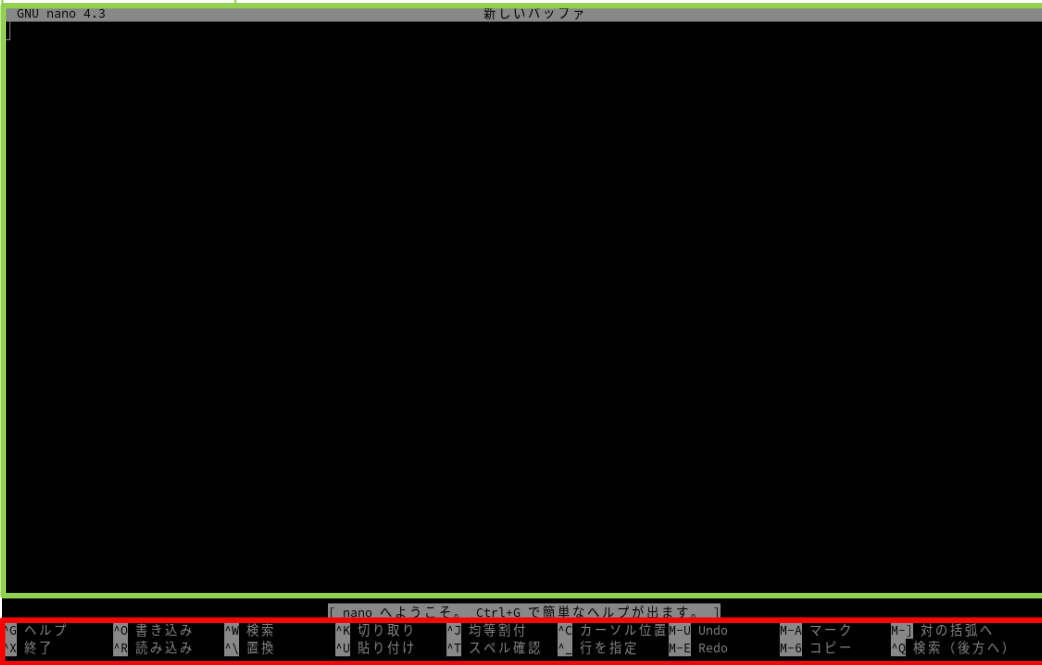
モードおよびコマンド確認画面

- ブランク → ノーマルモード
- : → コマンドモード
 - :w Ret 上書き保存
- --挿入-- → 入力モード

Nano

Nanoの基本的な操作方法について

編集画面



コマンド確認画面

- ^ → Ctrl
- M → Esc
- - → 順次押す

\$nano で起動

- ^G → CtrlとGキーを同時押し
- M-U → Escキー、Uキーを順番に押す

操作	コマンド
ファイルを開く	^R
別名保存	^O ファイル名 Ret
上書き保存	^O
マーク	M-A
マークキャンセル	M-A
コピー	M-6
切り取り	^K
貼り付け	^U
検索	^W
終了	^X

プログラム例題：フィボナッチ数列

C言語

プログラム作成

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ emacs fibonacci.c
```

Return

```
#include <stdio.h>

int main(void) {
    int i;
    long a, b, tmp;

    a=1;
    b=1;
    printf("%ld\n", a);

    for (i=2; i<=92; i++) {
        tmp = b;
        b = a + b;
        a = tmp;
        printf("%ld\n", a);
    }
}
```

注) ¥ マークはバックスラッシュと同じ
と思って(今は)結構です。

プログラム例題：フィボナッチ数列

Fortran言語

プログラム作成

[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]\$ **emacs fibonacci.f90**

Return

```
program main

  implicit none
  integer(kind=4) i
  integer(kind=8) a,b,tmp

  a = 1
  b = 1

  do i=2, 92
    tmp = b
    b= a + b
    a = tmp
    print *, a
  end do

end program main
```

プログラム例題：フィボナッチ数列

Python

プログラム作成

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ emacs fibonacci.py
```

Return

```
a, b = 1, 1
print(a)

for i in range(1,92):
    a, b = b, a+b
    print(a)
```

注) python では

- 64ビット整数など変数型の選択を自動的にやってくれます
- 多変数を同時に代入計算できます。
- **コンパイルはする必要ありません。**

モジュールの利用 (1)

コンパイラ等の選択

gnu コンパイラ, インテル製コンパイラ, python インタープリター, ...

ライブラリを利用した計算の高速化

離散フーリエ変換, 線形代数・連立1次方程式, ...

使用中モジュールの表示

```
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ module list   
Currently Loaded Modulefiles:  
1) impi/2019.5.281      2) intel/2019.5.281
```

Intel MPI ライブラリ

Intel コンパイラ

コンパイラ, MPI ライブラリを切り替えるために一度 消去します

```
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ module purge   
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ module list   
No Modulefiles Currently Loaded.
```

利用可能なモジュールの一覧を表示できます

```
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ module avail Return
```

```
----- /home/opt/local/modulefiles/L/mpi/intel/2019.5.281/mpi/2019.5.281 -----
alps/2.3.0(default)          phdf5/1.10.5(default)
feram/0.26.04(default)       pnetcdf/1.11.2(default)
frontflow_blue/8.1(default)  ppohBEM/0.5.0(default)
frontistr/4.5(default)       ppohDEM_util/1.0.0(default)
modylas/1.0.4(default)       ppohFDM/0.3.1(default)
mpi-fftw/3.3.8(default)      ppohFEM/1.0.1(default)
netcdf-fortran-parallel/4.4.5(default) ppohFVM/0.3.0(default)
netcdf-parallel/4.7.0(default) pt-scotch/6.0.6(default)
openmx/3.8(default)          revocap_coupler/2.1(default)
parmetis/4.0.3(default)      superlu_dist/6.1.1(default)
petsc/3.11.2(default)        xtapp/rc-150401(default)
phase/2019.01(default)
```

```
----- /home/opt/local/modulefiles/L/compiler/intel/2019.5.281 -----
R/3.6.0(default)            metis/5.1.0(default)
akaikkr/cpa2002v010(default) mt-metis/0.6.0(default)
bioconductor/3.10(default)  netcdf/4.7.0(default)
blast/2.9.0(default)        netcdf-cxx/4.3.0(default)
bwa/0.7.17(default)         netcdf-fortran/4.4.5(default)
fftw/3.3.8(default)         paraview/5.6.1(default)
gsl/2.5(default)            povray/3.7.0.8(default)
hdf5/1.10.5(default)        ppohAT/1.0.0(default)
hdf5/1.8.21                 revocap_refiner/1.1.04(default)
impi/2019.5.281(default)    samtools/1.9(default)
intelpython/2.7             scotch/6.0.7(default)
intelpython/3.6(default)    superlu/5.2.1(default)
mesa/19.0.6(default)        superlu_mt/3.1(default)
metis/4.0.3                 xabclib/1.03(default)
```

```
----- /home/opt/local/modulefiles/L/core -----
acusolve/2019.1.0(default)  intel/2018.3.222
advisor/2019.3.0.591490     intel/2019.3.199
advisor/2019.4.0.597843     intel/2019.4.243
advisor/2019.5.0.602216(default) intel/2019.5.281(default)
anaconda/2-2019.03         intel/2020.1.217
anaconda/3-2019.03(default) itac/2019.4.036
bioperl/1.007002(default)   itac/2019.5.041(default)
bioruby/1.5.2(default)      julia/1.4.0(default)
cmake/3.0.2                 llvm/7.1.0(default)
cmake/3.14.5(default)       massivethreads/0.97
```


モジュールの利用 (2)

Intel コンパイラの 最新のを load してみます

```
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ module load intel/2020.1.217 Return
```

```
[tUVXYZ@obcx04 ~]$ module list Return
```

Currently Loaded Modulefiles:

1) impi/2019.7.217 2) intel/2020.1.217

Intel MPI ライブラリも、一緒に自動でload されました

Python も比較的最近の バージョン3.7.3 を使えるようにしましょう。

```
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ module load python/3.7.3 Return
```

```
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ module list Return
```

Currently Loaded Modulefiles:

1) impi/2019.7.217 2) intel/2020.1.217 3) python/3.7.3

スーパーコンピュータ (スパコン) 利用のイメージ

通常、スパコンでは
ログインノードと呼ば
れる玄関口から実行
命令を出します



端末

1. ログイン
SSH

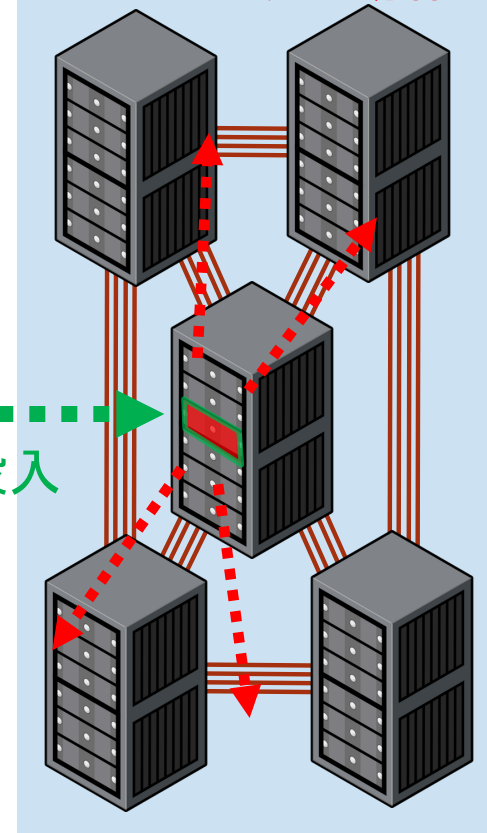
```
[tut138@obcx02~]$ ls -l  
drwxr-x--- 2 shiba group 10 1  
Apr 13:00 test.out  
[tut138@obcx02~]$ ./test.out  
Hello world  
[tut138@obcx02~]$ qsub a.sh
```



ログインノード

2. ジョブ投入

3. プログラム動作



計算ノード
= 本体

SSH で接続するには
鍵の準備が必要！

ジョブスクリプト = スパコンへの指示書

プログラムをコンパイルしたあとにログインノード上で
直接プログラム実行することはしないでください！

— 負荷がかかると、他のユーザーの同時作業の妨げとなります

かわりに計算ノードに計算をしてもらうための「指示書」が必要となります。

C, Fortran 向け (fibonacci.sh)

```
#!/bin/bash
#PJM -L rscgrp=tutorial [リソースグループ]
#PJM -L node=1 [使用するノードの数]
#PJM -L elapse=0:01:00 [実行時間上限(1分)]
#PJM -g gt00 [バジェットグループ名]
#PJM -N fibonacci [今回のジョブの名前]
#PJM -o stdout.txt [標準出力先ファイル名]
#PJM -j [エラー出力を標準出力にマージ]

module purge
module load intel/2020.1.217
./fibonacci.out
```

Python 向け (fibonacci.sh)

```
#!/bin/bash
#PJM -L rscgrp=tutorial
#PJM -L node=1
#PJM -L elapse=0:01:00
#PJM -g gt00
#PJM -N fibonacci
#PJM -o stdout.txt
#PJM -j

module load python/3.7.3
python ./fibonacci.py
```

ジョブスクリプトを用意しました。

ご自身で入力いただくと時間を要しますので、
用意されたものをコピーしてください。

```
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ cd Return  
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ cd fibonacci Return
```

C, Fortran を使われる方

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ cp /work/gt00/share/z30122/fibo_c/fibonacci.sh .
```

Return

Python を使われる方

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ cp /work/gt00/share/z30122/fibo_python/fibonacci.sh .
```

Return

エディターでの編集が間に合わなかった方は

サンプルとなるプログラムも用意してありますので、ご自身でコピーしてください。

C を使われる方

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ cp /work/gt00/share/z30122/fibo_c/fibonacci.c .
```

Return

Fortran を使われる方

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ cp /work/gt00/share/z30122/fibo_fortran/fibonacci.f90 .
```

Return

Python を使われる方

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ cp /work/gt00/share/z30122/fibo_python/fibonacci.py .
```

Return

プログラムのコンパイル

C または Fortran を使用される方

→ プログラムをコンパイルして、実行ファイル(バイナリ)を生成します。

C を使われる方

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ icc fibonacci.c -o fibonacci.out
```

Return

プログラム名

実行ファイル名

Fortran を使われる方

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ ifort fibonacci.f90 -o fibonacci.out
```

Return

スパコンでのジョブの実行

OBCX スパコンでは、/home からプログラム実行できません
→ **/work** ディレクトリ領域内にプログラム等一式をコピー

```
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ cd   
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ ls   
fibonacci  
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ cp -r fibonacci /work/gt00/tUVXYZ/   
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ cd /work/gt00/tUVXYZ/fibonacci 
```

作成したジョブスクリプトを投入、
計算ノードで実行してもらいます。

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ pjsub fibonacci.sh 
```

ジョブの確認、結果の表示

実行されているジョブを確認します。

(一瞬で計算が終わるので、ジョブ一覧に出ないかも)

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ pjstat
```

得られた結果を表示します。

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ more result_fibo.txt
```

[**Return**] で下の方に進めていくことができます]

結果から **747031** という文字列を探します

```
[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ grep 747031 result_fibo.txt
```


お試しアカウントについての注意

今回発行されたアカウント

→ 講習会終了後も約1ヶ月間、OBCXスパコンを使用可能

講習会終了後は リソースグループ `lecture` を使用してください。

リソースグループ `tutorial` は本日 13:00-17:00 のみです。

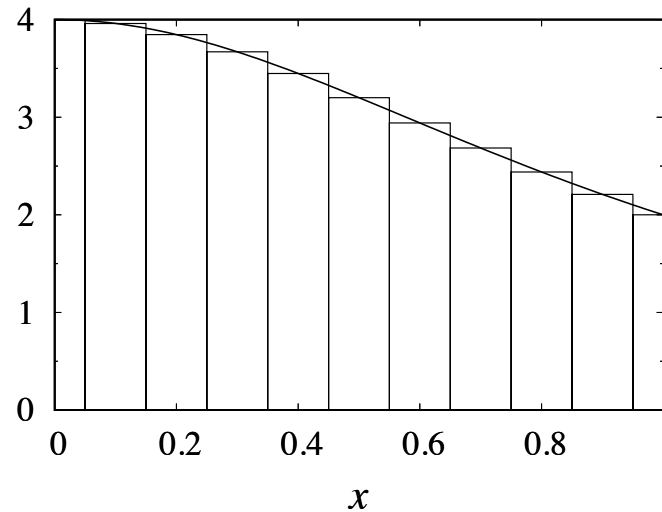
ジョブスクリプト
fibonacci.sh

```
#!/bin/bash
#PJM -L rscgrp=lecture      [リソースグループ]
#PJM -L node=1
#PJM -L elapse=0:01:00
#PJM -g gt00
#PJM -N fibonacci
#PJM -o stdout.txt
#PJM -j

module purge
module load intel/2020.1.217
./fibonacci.out
```

並列計算の例題：区分求積で円周率計算

$$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$$
$$= \pi$$



和の短冊
↓
1億倍以上
細かくする

数値積分を並列化 → 性能が向上する。

C, Fortran, Python, 3通りのサンプルプログラムを用意しました。

**実習：プログラムの並列度を変えながら実行
実行時間から高速化の度合いを見る**

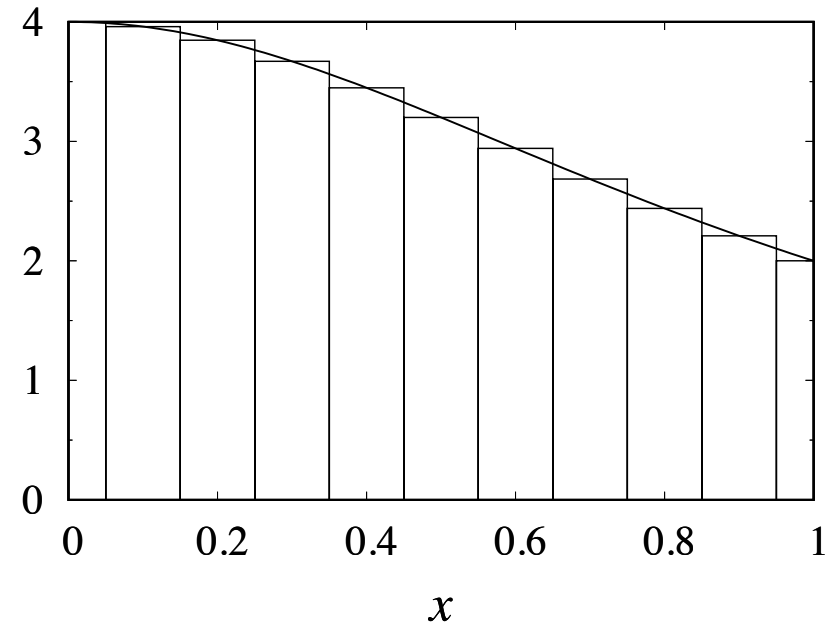
並列計算の例題：区分求積で円周率計算

$$I = \int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx$$

変数変換 $x = \tan \theta$

$$dx = \frac{d\theta}{\cos^2 \theta}$$

$$\Rightarrow I = \int_0^{\pi/4} \frac{4}{1+\tan^2 \theta} \frac{d\theta}{\cos^2 \theta} = 4 \int_0^{\pi/4} d\theta = \pi$$



コンピュータにおける演算の仕組み

(ノイマン型) コンピュータ上では、全ての数がビット [0,1] の集まりで表現される

単精度浮動小数点 = 32ビットで1つの実数を表現

符号部 (sign) 1 bit 仮数部 (fraction), “b” 23 bit



$\log_{10}(2^{23}) \sim 7$ 桁程度 (10進) が表現可

変数型	FORTRAN: real(kind=4)
	C, C++: float
	Python: 基本はなし

$$(-1)^{\text{sign}}(1.b_1b_2 \dots b_{23})_2 \times 2^{e-127}$$

倍精度浮動小数点 = 64ビットで1つの実数を表現

符号部 (sign) 1 bit

仮数部 (fraction), “b” 52 bit



指数部 (exponent), “e” 11 bit

$\log_{10}(2^{52}) \sim 15$ 桁程度 (10進) が表現可

$$(-1)^{\text{sign}}(1.b_1b_2 \dots b_{52})_2 \times 2^{e-1023}$$

変数型	FORTRAN: real(kind=8)
	C, C++: double
	Python: 無指定で倍精度

プログラムの解説 C

pi.c [非並列版]

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

int main(void) {
    int i;
    int ndiv = 10000000;

    double width = 1.0 / (double)ndiv;
    printf("width = %.15f\n", width);
    double sum = 0.0;
    double x = 0.0;

    for (i=0; i<ndiv; i++) {
        x = (i+0.5)*width;
        sum += width * 4.0 / (1.0 + x*x);
    }

    printf("PI = %.15f\n", sum);
    return 0;
}
```

pi_mpi.c [並列版]

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

int main(int argc, char* argv[]) {
    int ndiv = 5600000000;
    int ierr, myrank, nprocs;
    int ndiv_local, i;
    double x, width, sum, total_sum;
    double t1, t2;

    width = 1.0 / (double)ndiv;

    ierr = MPI_Init(&argc, &argv);
    ierr = MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD,
                        &myrank);
    ierr = MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD,
                        &nprocs);

    t1 = MPI_Wtime();

    sum = 0.0;
    ndiv_local = ndiv / nprocs;

    for (i = myrank*ndiv_local;
         i < (myrank+1)*ndiv_local; i++) {
        x = (i + 0.5) * width;
        sum = sum + width * 4.0 / (1.0 + x*x);
    }

    MPI_Reduce(&sum, &total_sum, 1, MPI_DOUBLE,
              MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD);

    t2 = MPI_Wtime();

    if (myrank == 0) {
        printf("PI(MPI) = %.18f\n", total_sum);
        printf("Number of cores utilized = %d\n", nprocs);
        printf("Execution time = %.8f (sec.)\n", t2 - t1);
    }

    ierr = MPI_Finalize();

    return 0;
}
```

コンパイル

```
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ mpiicc pi_mpi.c -o pi_mpi.out
```

プログラムの解説 Fortran

pi.f90 [非並列版]

```

program main

implicit none

integer i, ndiv
real(kind=8) unit, width, sum, x

ndiv = 560000000
width = 1.0 / dble(ndiv)

print *, "width"
print '(F18.14)', width

sum = 0.0d0
x = 0.0d0

do i = 1, ndiv
  x = ( dble(i-1) + 0.5) * width
  sum += width * 4.0 / (1.0 + x*x)
end do

print *, "sum"
print '(F18.14)', sum

end program main

```

pi_mpi.f90 [並列版]

```

program main

Use mpi
implicit none

integer ndiv, ierr, myrank, nprocs
integer ndiv_local, i;
real(kind=8) unit, width, sum, x, total_sum
real(kind=8) t1, t2

ndiv = 5600000000
width = 1.0 / dble(ndiv)

call MPI_INIT(ierr)
call MPI_COMM_RANK(MPI_COMM_WORLD,
                   myrank, ierr)
call MPI_COMM_SIZE(MPI_COMM_WORLD,
                   nprocs, ierr)

sum = 0.0d0
ndiv_local = ndiv / nprocs

t1 = MPI_Wtime()

do i=myrank*ndiv_local+1, (myrank+1)*ndiv_local
  x = ( dble(i-1) + 0.5)*width
  sum = sum + width * 4.0 / (1.0 + x*x)
end do

call MPI_REDUCE(sum, total_sum, 1, MPI_REAL8,
MPI_SUM, 0, MPI_COMM_WORLD, ierr)

t2 = MPI_Wtime()

if (myrank .eq. 0) then
  print "(PI(MPI) = ', F18.16)", total_sum
  print "(Number of cores utilized = ', i0)", nprocs
  print "(Execution time = ', F12.8)", t2 - t1
endif

call MPI_FINALIZE(ierr)

end program main

```

コンパイル

```
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_fortran]$ mpiifort pi_mpi.f90 -o pi_mpi.out
```

プログラムの解説 Python

pi.py [非並列版]

```
program main
implicit none

integer i, ndiv
real(kind=8) unit, width, sum, x

ndiv = 560000000
width = 1.0 / dble(ndiv)

print *, "width"
print '(F18.14)', width

sum = 0.0
x = 0.0

do i = 1, ndiv
  x = ( dble(i-1) + 0.5) * width
  sum = sum + width * 4.0 / (1.0 + x*x)
end do

print *, "sum"
print '(F18.14)', sum

end program main
```

pi_mpi.py [並列版]

```
from mpi4py import MPI
import numpy

comm = MPI.COMM_WORLD
myrank = comm.Get_rank();
nprocs = comm.Get_size();

ndiv = 560000000
width = 1.0/ndiv

t1 = MPI.Wtime()

sum = numpy.zeros(1)
total_sum = numpy.zeros(1)
ndiv_local = ndiv // nprocs

for i in range (myrank*ndiv_local, (myrank+1)*ndiv_local):
  x = width * (i+0.5)
  sum[0] = sum[0] + width * 4.0 / (1.0 + x*x)

comm.Reduce([sum, MPI.DOUBLE], total_sum, op=MPI.SUM, root=0)

t2 = MPI.Wtime()

if comm.rank == 0:
  print("PI(MPI) = ", total_sum[0])
  print("Number of cores utilized = ", nprocs)
  print("Execution time = ", t2 - t1, " (sec.)")
```

プログラムなどを自分の /work へコピー

```
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ cd /work/gt00/tUVXYZ
[tUVXYZ@obcx01 tUVXYZ]$ mkdir calc_pi_mpi
[tUVXYZ@obcx01 tUVXYZ]$ cd calc_pi_mpi
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ pwd
/work/gt00/tUVXYZ/calc_pi
```

Fortran の方

```
$ cp /work/gt00/share/z30122/pi_fortran_mpi/* .
```

C の方

```
$ cp /work/gt00/share/z30122/pi_c_mpi/* .
```

アスタリスク = ワイルドカード
「ここはなんでも良い」

Python の方

```
$ cp /work/gt00/share/z30122/pi_python_mpi/* .
```


並列プログラムのコンパイル

C および Fortran ではプログラムをコンパイルします。

C の方

```
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ mpiicc pi_mpi.c -o pi_mpi.out
```

Fortran の方

```
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ mpiifort pi_mpi.f90 -o pi_mpi.out
```

Python の方

事前に次の作業が必要です。

```
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ cd /work/gt00/tUVXYZ/calc_pi_mpi  
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ emacs setenv.sh (or vim setenv.sh)
```

次のところを変更してください

```
export PYTHONUSERBASE=/work/gt00/tUVXYZ/.local
```

↓

自分のユーザー名に

次にsetup.sh スクリプトを実行 (numpy, mpi4py をインストールします)

```
[tUVXYZ@obcx01 ~]$ ./setup.sh
```

並列プログラムのジョブスクリプト

性能が向上することを見ます。
様々な並列度のジョブスクリプトを用意しました。

```
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ pjsub run_n1c0001.sh
```

- 1ノード, 1コア

```
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ pjsub run_n1c0004.sh
```

- 1ノード, 4コア

```
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ pjsub run_n1c0028.sh
```

- 1ノード, 28コア

```
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ pjsub run_n1c0056.sh
```

- 1ノード, 56コア

```
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ pjsub run_n2c0112.sh
```

- 2ノード, 112コア

```
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ pjsub run_n4c0224.sh
```

- 4ノード, 224コア

```
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ pjsub run_n8c0448.sh
```

- 8ノード, 448コア

ジョブの実行状況の確認

自分の全てのジョブが終わるまで、待機します。

```
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ ps
```

ジョブが終了すると、出力ファイルが出ているはずです。

```
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ ls
```

pi_mpi.c	result_n2c0112.txt	run_n1c0056.sh
pi_mpi.out	result_n4c0224.txt	run_n2c0112.sh
result_n1c0001.txt	result_n4c0448.txt	run_n4c0224.sh
result_n1c0004.txt	run_n1c0001.sh	run_n8c0448.sh
result_n1c0028.txt	run_n1c0004.sh	
result_n1c0056.txt	run_n1c0028.sh	

“**result_n*c****.txt**” が、結果を記載した出力ファイルです。

結果を確認、実行時間を比較してみましょう

出力ファイルには実行時間の記載があります。
出力ファイルの冒頭部分を一斉に見てみましょう。

```
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ head result*txt
```

並列化で実行時間が短縮されています。

```
=> result_n1c0001.txt <==  
PI(MPI) = 3.141592653590673301  
Number of cores utilized = 1  
Execution time = **.***** (sec.)
```

```
==> result_n1c0004.txt <==  
PI(MPI) = 3.141592653589913464  
Number of cores utilized = 4  
Execution time = **.***** (sec.)
```

```
==> result_n1c0028.txt <==  
PI(MPI) = 3.141592653589770912  
Number of cores utilized = 28  
Execution time = **.***** (sec.)
```

```
==> result_n1c0056.txt <==  
PI(MPI) = 3.141592653589800221  
Number of cores utilized = 56  
Execution time = **.***** (sec.)
```

```
==> result_n2c0112.txt <==  
PI(MPI) = 3.141592653589794892  
Number of cores utilized = 112  
Execution time = **.***** (sec.)
```

```
==> result_n4c0224.txt <==  
PI(MPI) = 3.141592653589791340  
Number of cores utilized = 224  
Execution time = **.***** (sec.)
```

最後に：計算結果のファイルを手元に転送する

一度スーパーコンピュータからログアウトしてみます。

```
[tUVXYZ@obcx01 ****]$ exit  
Mac-mini:~ shiba$
```

sftp を用いてファイル転送を行います

```
Mac-mini:~ shiba$ sftp tUVXYZ@obcx.cc.u-tokyo.ac.jp  
sftp > cd /work/gt00/tUVXYZ/fibo  
sftp > get fibonacci.txt  
Fetching /work/00/gt00/tUVXYZ/ fibonacci.txt  
/work/00/gt00/tUVXYZ/ fibonacci.txt      100% 171    11.9KB/s   00:00  
  
sftp > exit  
Mac-mini:~ shiba$ ls  
fibonacci.txt
```