第163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」
2021年9月30日

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

2021/9/30 v1.0

東京大学情報基盤センター
INFORMATION TECHNOLOGY CENTER, THE UNIVERSITY OF TOKYO

本講習会の内容

13:00 – 14:00

注意事項、Zoomの使い方

スーパーコンピューターについて初歩（講義）

スーパーコンピューターへのログイン（講義・実習）

14:15 – 16:00

プログラムの作成・コンパイル・実行（講義・実習）

並列プログラムのコンパイル・実行（講義・実習）

16:15 – 17:00

より進んだ利用に向けて（講義）

講習会の注意事項

- 1か月利用可能なアカウントが配布されます。
  - 利用規程に記載の用途以外に使用しないでください。
    - ✓ 研究、教育、社会貢献のために使用
  - 1か月経過後(10/30)にはアカウントが削除されるため、ファイルも削除されます。
  - アカウントの継続利用のためには、講習会を最後まで受講頂く必要があります。
- 企業の方が当センターのトライアルユース制度に申し込む場合、センターが開催するいずれかの講習会を修了してください。（本日の講習会を想定する場合、最後まで出席のこと）
- 本講習会に関する質問は
  shiba@cc.u-tokyo.ac.jp
  に送付ください。センターのスパコン相談窓口等には送付しないようご注意ください。

Zoom

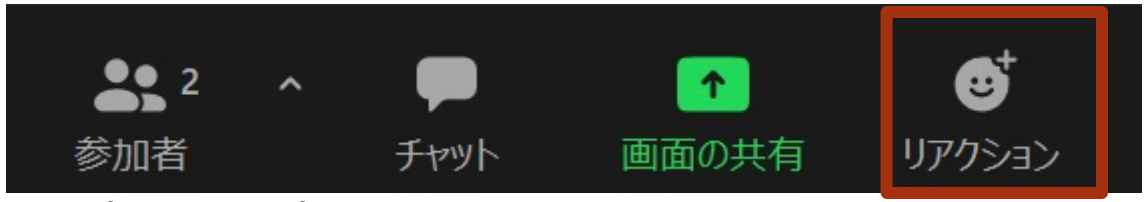
■講義・実習中の質問方法

- 「手をあげる」機能
  - 質問がある際，全体の状況を確認するため使用
- ブレークアウトセッション
  - 画面を共有しながらエラー対応する際に使用
  - （なるべく口頭でのやりとりで対応する予定）

- https://utelecon.adm.u-tokyo.ac.jp/zoom/how_to_use

Zoomで手を挙げる方法

1. Zoomメニュー中の「リアクション」をクリック

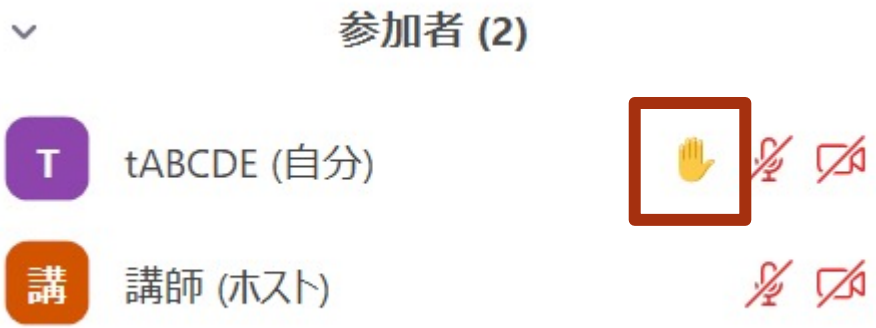


2. ポップアップで表示された「手を挙げる」をクリック

Zoomで手が挙がっていることの確認方法

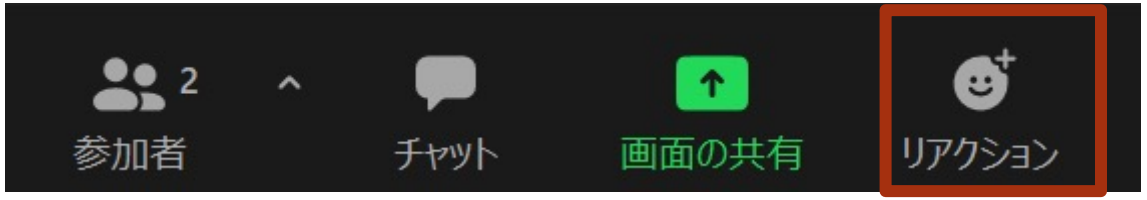
1. Zoomメニュー中の「参加者」をクリックして，参加者一覧を表示

2. 表示された参加者一覧の，自分のところを見ると手が挙がっている



Zoomで手を下ろす方法

1. Zoomメニュー中の「リアクション」をクリック



2. ポップアップで表示された「手を降ろす」をクリック

ブレイクアウトルーム（1/6）

- 演習時に使用するかもしれません
- 演習中に「ヘルプを求める」ことができます
  - ホストを招待した後に「画面を共有」することで，皆さんの記述したプログラムを一緒に見ながら問題解決にあたります

- Zoomメニュー中の「ブレイクアウトルーム」をクリック

ブレイクアウトルーム（2/6）

- 進行中のブレイクアウトルームのリストが表示されるので，空いている部屋に「参加」してください
  - 左の例では5部屋がすべて空室，右の例ではルーム1のみ参加者がいる

ブレイクアウトルーム（3/6）

「参加」をクリックすると確認画面が出てくるので，
「はい」を選択すると入室できます

ブレイクアウトルーム（4/6）

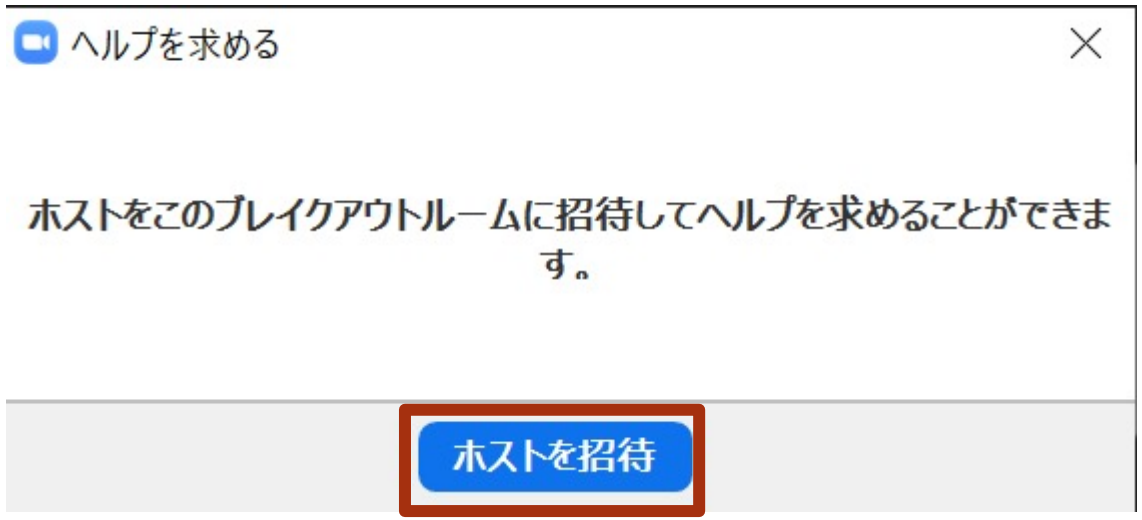
再度メニュー中の「ブレイクアウトルーム」をクリックすると，
「ヘルプを求める」が増えているのでクリックしてください

ブレイクアウトルーム（5/6）

ポップアップで出てきた「ホストを招待」をクリック

ホスト（講師）の参加待ちに移行します（画面はそのまま）

他の受講者のヘルプ中など，直ちに対応できない場合もあります

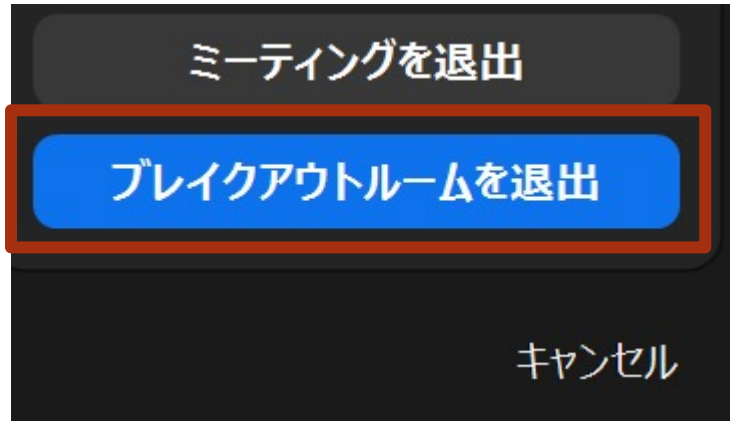


ブレイクアウトルーム（6/6）

問題解決後は，Zoomメニュー中の「ルームを退出する」

「ブレイクアウトルームを退出」が表示されるのでクリックして，元の講習会会場にお戻りください

間違えて「ミーティングを退出」すると講習会から退出します

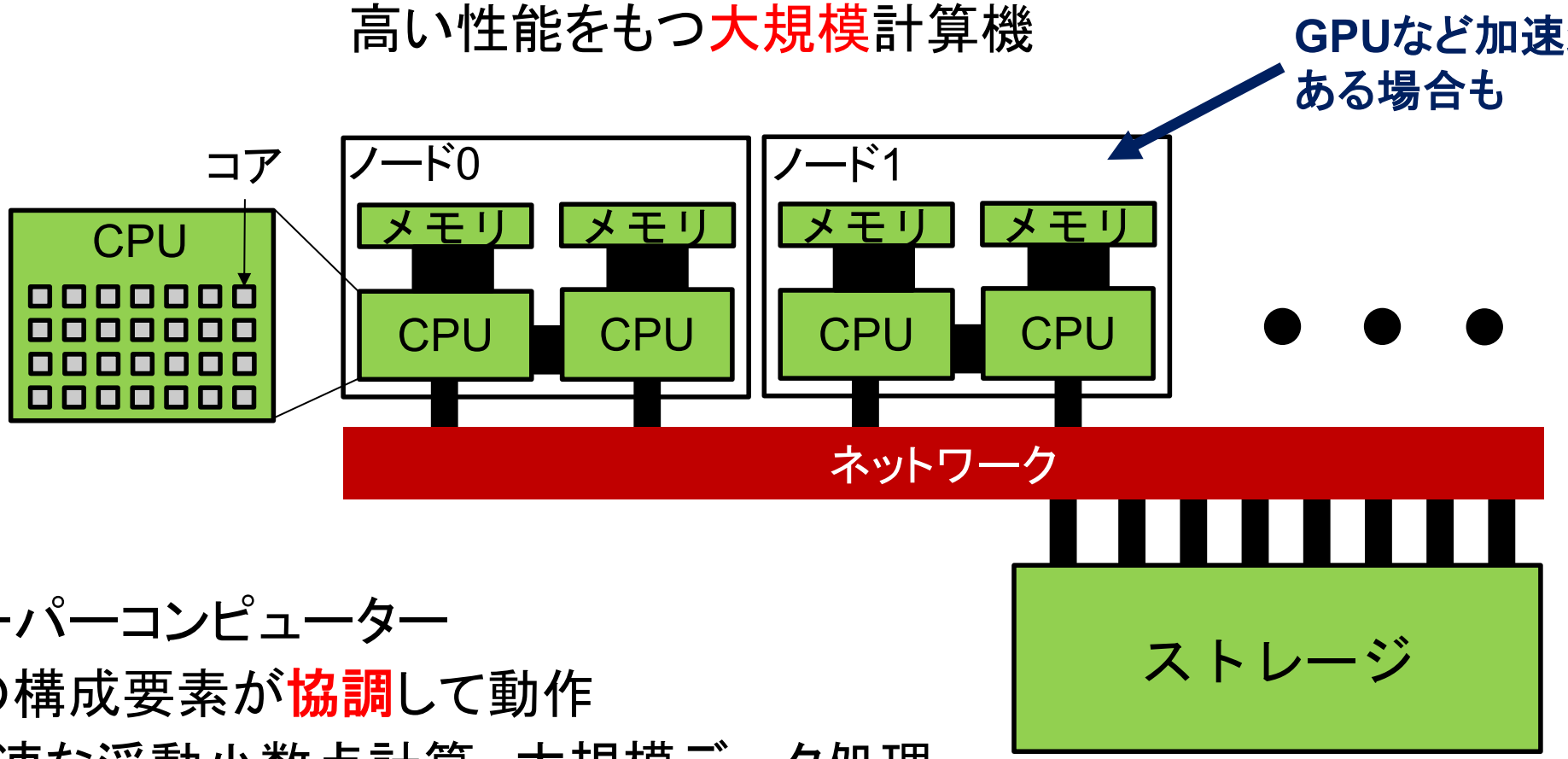


東大スーパーコンピューター OBCX

Oakbridge-CX @ 東京大学柏キャンパス （2019ー）

スーパーコンピューター、略してスパコン

高い性能をもつ大規模計算機



ここ20年のスーパーコンピューター

＝ 多数の構成要素が協調して動作

→ 高速な浮動小数点計算、大規模データ処理

高性能なノード、高速なネットワーク、大容量かつ高速なストレージ

性能指標 ～ OBCXを例に (1)

多数のコア、高いメモリ転送速度

		iMac (2018)	OBCX
CPU	コア数	6	56 (2ソケット)
	周波数 [GHz]	3.0	2.7
	理論演算性能[TFlops]	0.58	4.84
Memory	容量 [GByte]	16	192
	転送速度 [GByte/秒]	42.6	281.6

ボードには水冷
（とにかく熱い）！

大きいことはいいこと（もある）

たくさんのパソコンを同時に連携して使用するようなもの

×4

×17

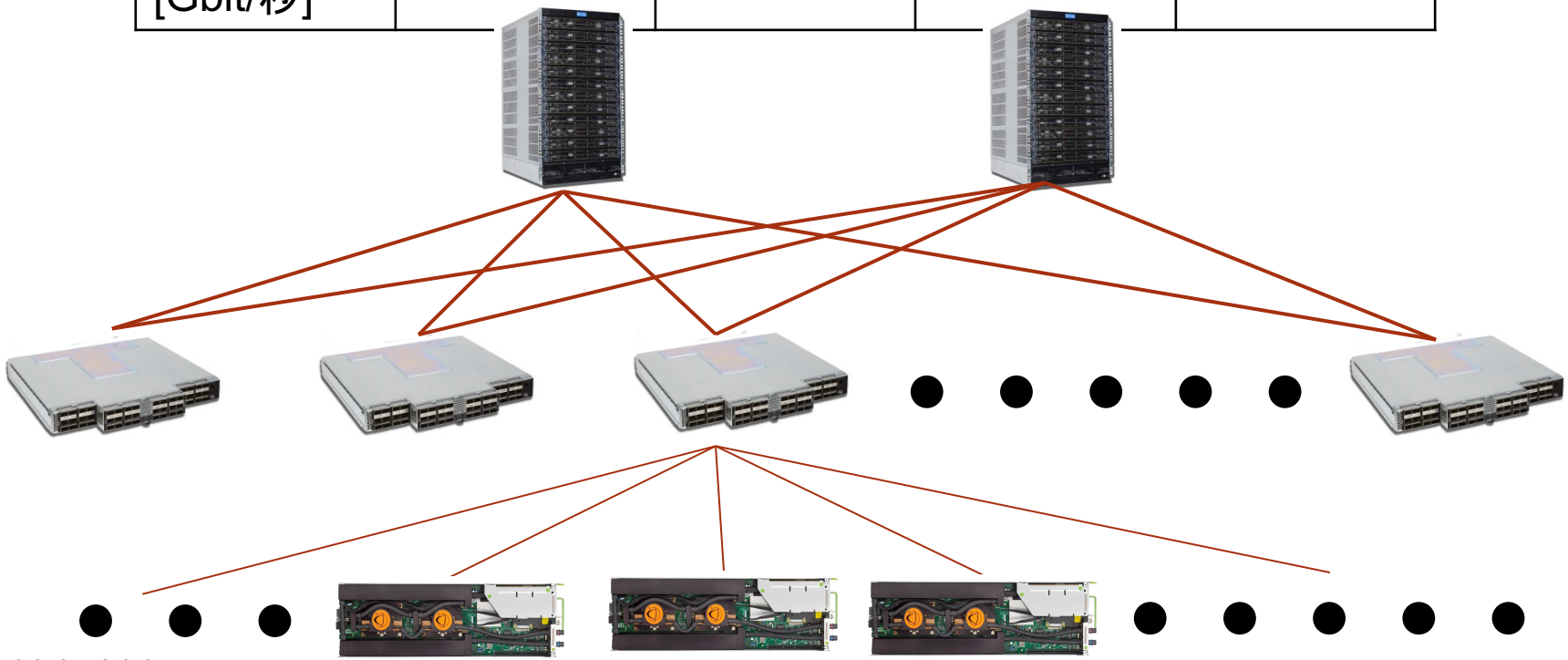
×21

全部で1,368台

性能指標 ～ OBCXを例に (2)

多数のノード数を全体で繋ぐためにネットワークは非常に高速

	携帯 4G	無線 (Wifi 11ac)	有線 (Gigabit Ether)	Omni-path (OBCX)
転送速度 [Gbit/秒]	0.1 ~ 1.0	6.9	1	100



性能指標 ～ OBCXを例に (3)

大容量・高速のストレージ

OBCX　Lustre strorage

- 容量 ： 12.4PByte (12400TByte)
- 構成 ： HDD　8TB x 1,360本
- 転送速度 ： 193.9GByte/秒

HDD,SSDの転送速度は
HDD ：0.1～0.2GByte/秒
SSD ： 4～5GByte/秒
*2020年9月現在

OBCX ハードウェア仕様

計算ノード
Chassis: PRIMERGY CX400 M4 x342 <4node / Chassis>
Node: PRIMERGY CX2550 M5 x1,240, CX2560 M5 x128

x1,368 node

全体性能

理論演算性能:	6.61PF
主記憶容量:	256.5TiB
メモリバンド幅:	385.1TB/s
ラック数:	21ラック
SSD搭載:	128ノード

ノード単体

理論演算性能: 4.8384 TF
手記憶容量: 192GiB
メモリバンド幅: 281.6GB/s

計算ノード間ネットワーク (Omni-Path Architecture)
通信性能 100Gbps

ログインノード

x10

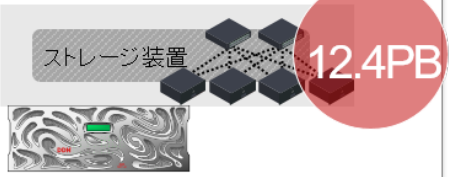
FUJITSU Server
PRIMERGY CX2560 M5 x 10

管理サーバ群

x15

FUJITSU Server
PRIMERGY RX2530 M4 x 15
(ジョブ、運用、認証、Web、
セキュリティログ保存)

並列ファイルシステム



12.4PB

ストレージ装置:DDN ES18KE x2セット
ファイルシステム:DDN ExaScaler
(Lustreベースファイルシステム)

全体性能

FLOPS値（Floating Point Operations per Second，浮動小数点演算）

1秒当たりの実数演算性能

- 10^6 FLOPS= 1 Mega FLOPS = 1 MFLOPS （百万）
- 10^9 FLOPS= 1 Giga FLOPS = 1 GFLOPS （十億）
- 10^{12} FLOPS= 1 Tera FLOPS = 1 TFLOPS （兆）
- 10^{15} FLOPS= 1 Peta FLOPS = 1 PFLOPS （千兆）
- 10^{18} FLOPS= 1 Exa FLOPS = 1 EFLOPS （百京）

OBCX

- Intel Xeon Platinum 8280，1コアの性能は86.4GFLOPS
  - » 1秒間に864億回の倍精度実数演算
- 1ノード：56コア
  - » 4,838.4 GFLOPS= 4.838.TFLOPS ～ 4兆8,384億回
- 全システム：1,368ノード **6.618 PFLOPS** ～6,618兆3,840億回

スパコン利用に向けて何を学ぶのか？

Case A） 新しい計算向けのプログラムを作る
誰かが作ったプログラムを速くする

特有の技術必要！

繰り返し計算を高速化したい

```
do i=1, 1000000
        c(i) = a(j) * x(i,j) + b(i)
enddo
```

基本のところは C/C++ と FORTRAN で共通

1. CPUが動作しやすい形にプログラムを書き換える方法
   SIMD演算、キャッシュの活用、メモリアクセス改善
2. 協調動作のための分散処理方法、CPU間など通信方法
   OpenMP **MPI**
3. 上記1. 2. を最適にして演算を行うライブラリの呼出方法

スパコン利用に向けて何を学ぶのか？

Case B） スパコン向けに作られたソフトウェアを利用する

数値流体力学、構造解析、統計解析、
分子動力学、電子状態計算、量子化学計算、…

ソフトウェアがどのように協調動作するのかの概略を
理解することにつとめる

→ 並列プログラミングをしない人でも、使ってみた
速さなどから、計算の仕組みのイメージを獲得

スパコン利用に向けて何を学ぶのか？

Case C） 新しいタイプのデータ処理（学習）をしたい

ー　多くの方は、手元のマシンで何かされてる方かもしれません

1. Python等による高速なデータ処理

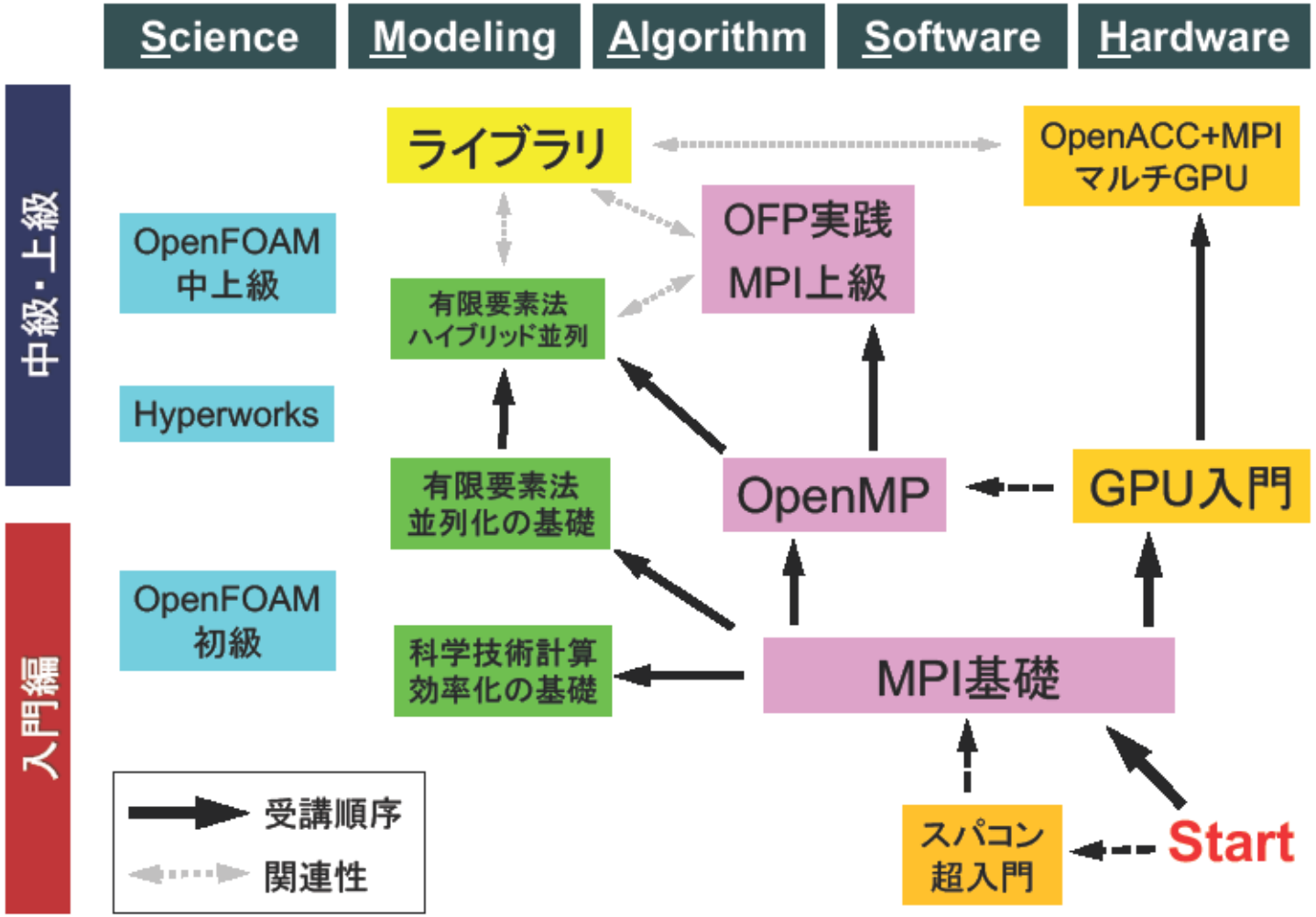
2. スパコン特有の環境構築の方法（コンテナ環境の利用など）
   多数のGPUの使用方法

3. バッチジョブシステム特有の事項

注：大学設置スパコンだとどうしても（民間のクラウドと比較すると）
少し環境準備が手間がかかるところはあります。

スパコン向け最適化に関する講習会 @ 東大ITC

目的に応じて受講をご検討ください。



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

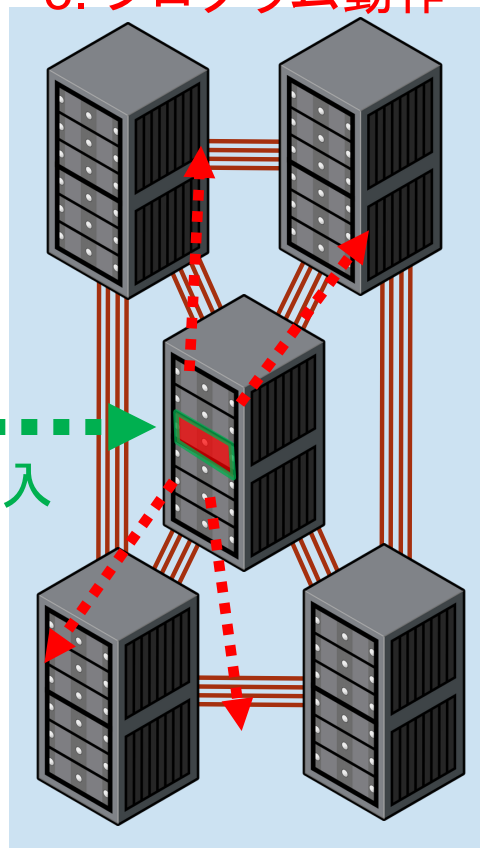
1. ログイン
SSH

```
[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！

Secure Shell プロトコル

通信が暗号化されたShell

- ShellはOSとユーザーの仲介をする コマンドベースのソフトウェア
- 通信データを暗号化し、リモートマシンに アクセスできる通信方法:SSH

暗号化された通信を使用して、
様々なことが可能

- ファイルのコピー
- グラフィカル画面の転送
- トンネリング
- ディレクトリのマウント

ログイン後の画面の一例

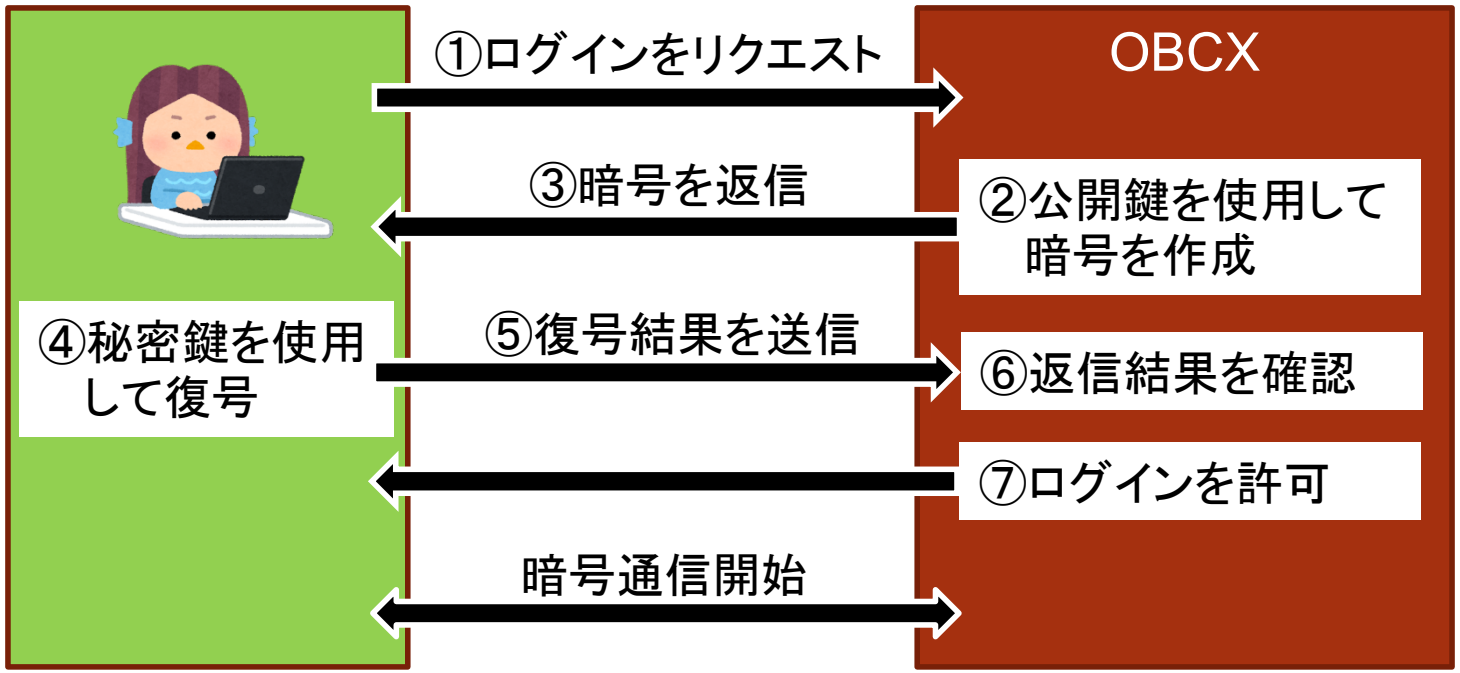
```
[ tUVXYZ @obcx05 ~]$ pwd
/home/ tUVXYZ
[ tUVXYZ @obcx05 ~]$ cd /work/gt00/z30113
[ tUVXYZ @obcx05  tUVXYZ ]$ cd ../
[ tUVXYZ @obcx05 gt00]$ pwd
/work/gt00
[ tUVXYZ @obcx05 gt00]$ cd ~/
[ tUVXYZ @obcx05 ~]$ pwd
/home/z30113
[ tUVXYZ @obcx05 ~]$ cd /work/gt00/z30113
[ tUVXYZ @obcx05  tUVXYZ ]$ mkdir test
[ tUVXYZ @obcx05  tUVXYZ ]$ ls
test
[ tUVXYZ @obcx05  tUVXYZ ]$
```

鍵認証方式

より安全な接続をする→鍵認証方式

- パスワードではなく、鍵ペアを使用してログインする方法
- 秘密鍵にもパスワードを設定可能

初期設定（初回ログイン時のみ）
- 鍵ペアを作成
- 公開鍵をログインノードに登録



鍵認証方式の注意点

注意点

■秘密鍵の取り扱いに注意

- 厳重に管理してください。
  - ✓漏洩すると容易にログインできてしまうため。
- 秘密鍵は他のところにコピーしたりしないでください。
- 秘密鍵の入ったPCの紛失などがあった場合は速やかに公開鍵を更新してください。

■ 鍵の生成時には必ずパスワードを設定してください。

よく間違える点

■ 秘密鍵のパスワードはOBCXのポータルのログインパスワードやログイン後のアカウントのパスワードとは異なります。

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):  パスフレーズを設定  Return
Enter same passphrase again:  同じパスフレーズ  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 randomart image is:
+---[RSA 2048]----+
|        . o=oo.o+ |
|         +  O... .|
|          .+o+.   |
|            +oB.  |
|          So *o*  |
|         .E   B.o |
|          .. = . o|
|           .=oB o +|
|          .+o+*O ..|
+----[SHA256]-----+
```

操作手順

- **ssh-keygen -t rsa <Return>**
- <Return>
- お好きなパスフレーズ <Return>
- 同じパスフレーズ <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                                  ⇒秘密鍵 (Private Key)
 id_rsa.pub                              ⇒公開鍵 (Public Key)

$ cat id_rsa.pub

ssh-rsa
AAAAB3NzaC1yc2EAAAADAQABAAABAQDa6InmOYYaCrWjQDukjiNEfdW8veUwJyZtEI3oDuOA28eey6pOwbtI7JB
O9xnI17O7HG4yYvOM81+/nlAHy5tAfJlyOdsPzjTgdTBLdgi3cSf5pWEY6U96yaErOEi8Wge1HkXrhcwUjGDVTz
vTORefe6zLdRziL/KNmmesSQfR5lsZ/ihsjMgFxGaKsHHq/IErCtHIIIf9V/Ds2yj6vkAaWH6asBn+ZsRiRFvwH
PhkYAnp/j3LY6b8QfqgOp4WZRenh/HgySWTYIGi8x67VzMaUlm9qlKOQFMCaK2rivX1fmbwyWJ/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
AAAAB3NzaC1yc2EAAAADAQABAAABAQDa6InmOYYaCrWjQDukjiNEfdW8veUwJyZtEI3oDuOA28eey6pOwbtI7JB
O9xnI17O7HG4yYvOM81+/nlAHy5tAfJlyOdsPzjTgdTBLdgi3cSf5pWEY6U96yaErOEi8Wge1HkXrhcwUjGDVTz
vTORefe6zLdRziL/KNmmesSQfR5lsZ/ihsjMgFxGaKsHHq/IErCtHIIIf9V/Ds2yj6vkAaWH6asBn+ZsRiRFvwH
PhkYAnp/j3LY6b8QfqgOp4WZRenh/HgySWTYIGi8x67VzMaUlm9qlKOQFMCaK2rivX1fmbwyWJ/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 公開鍵認証

id_rsa
- Private Key（秘密鍵）：PC上
- 文字通り「秘密」にしておく
  作成した場所からコピー・移動しない、他の人に送らない

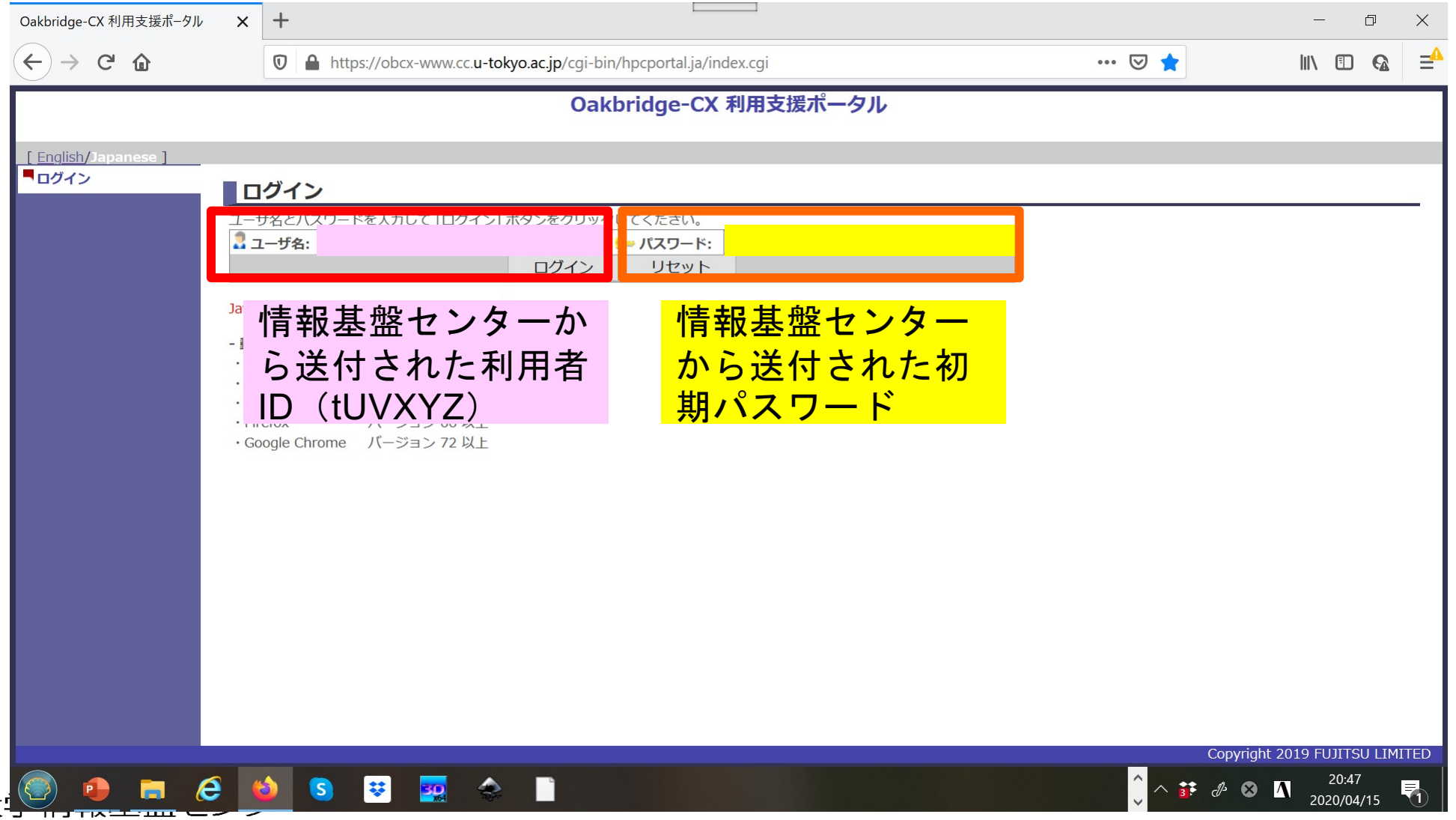
id_rsa.pub
- Public Key（公開鍵）：スパコン上
- コピー可能，他の人にe-mailで送ることも可能

- 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
  - 各スパコンには、複数の公開鍵を登録できます

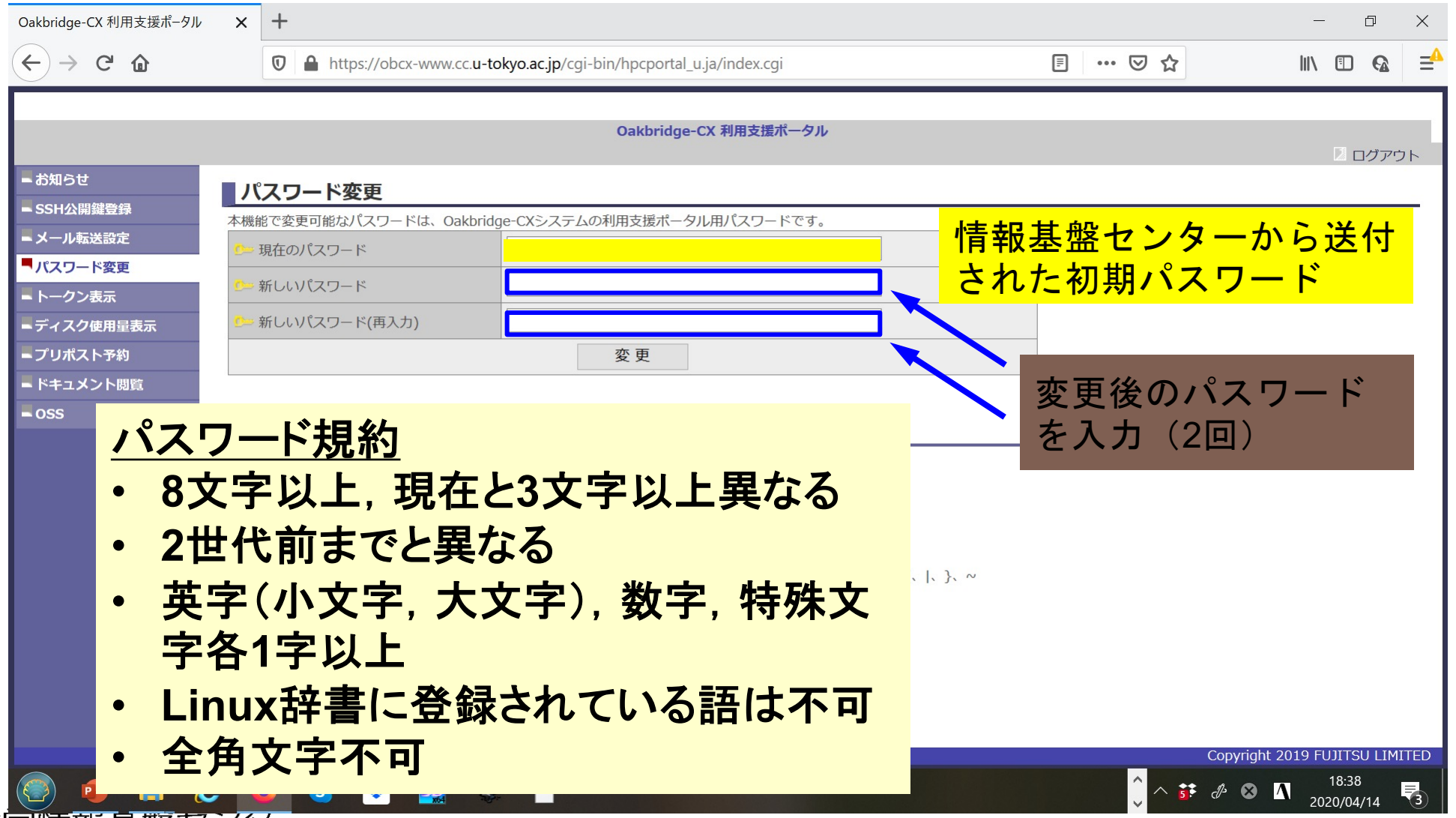
スパコン上の公開鍵のうちの一つがPC上の「秘密鍵＋Passphrase」とマッチすると確認されるとログインできる

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



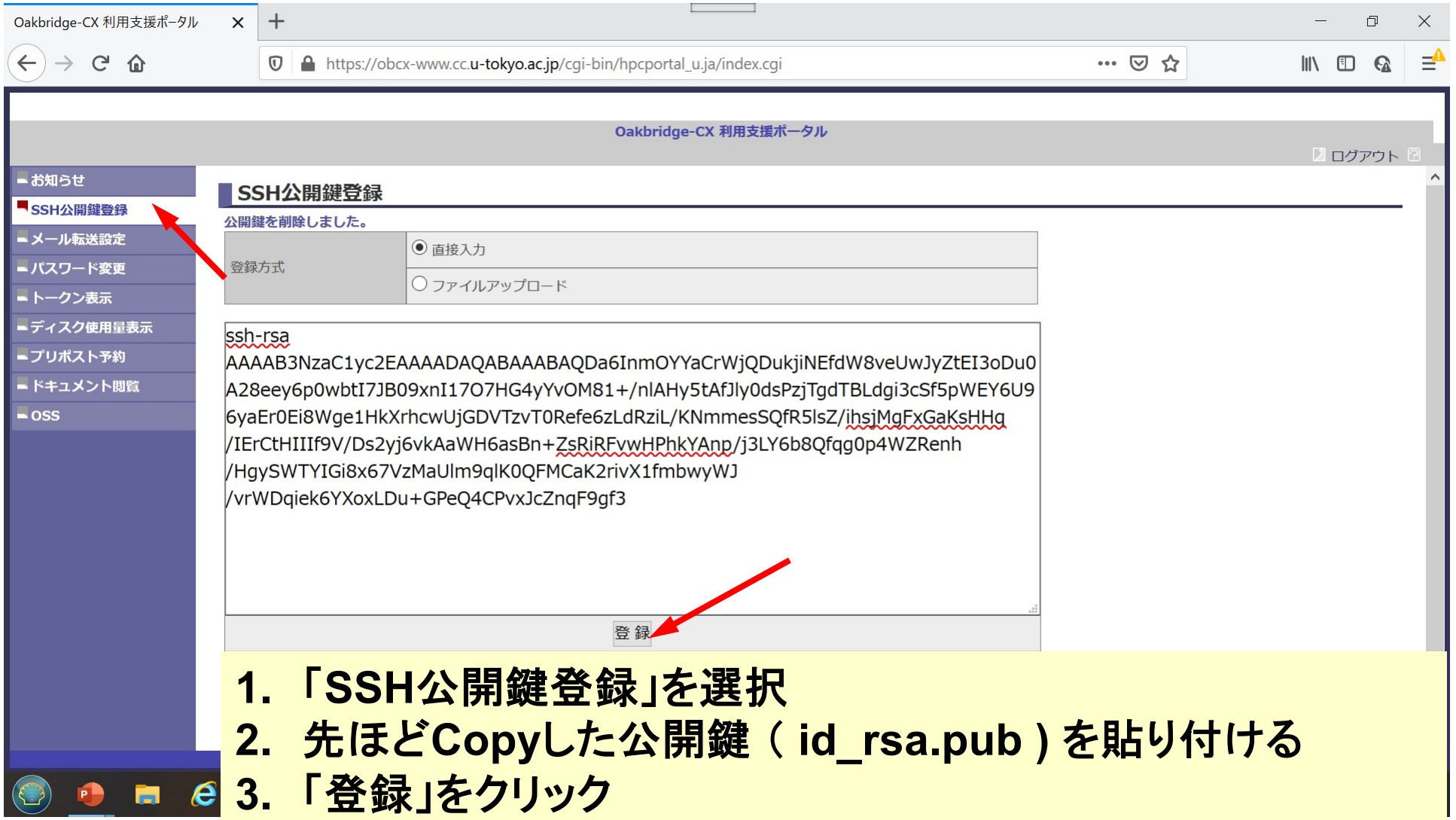
②初期パスワードの変更



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

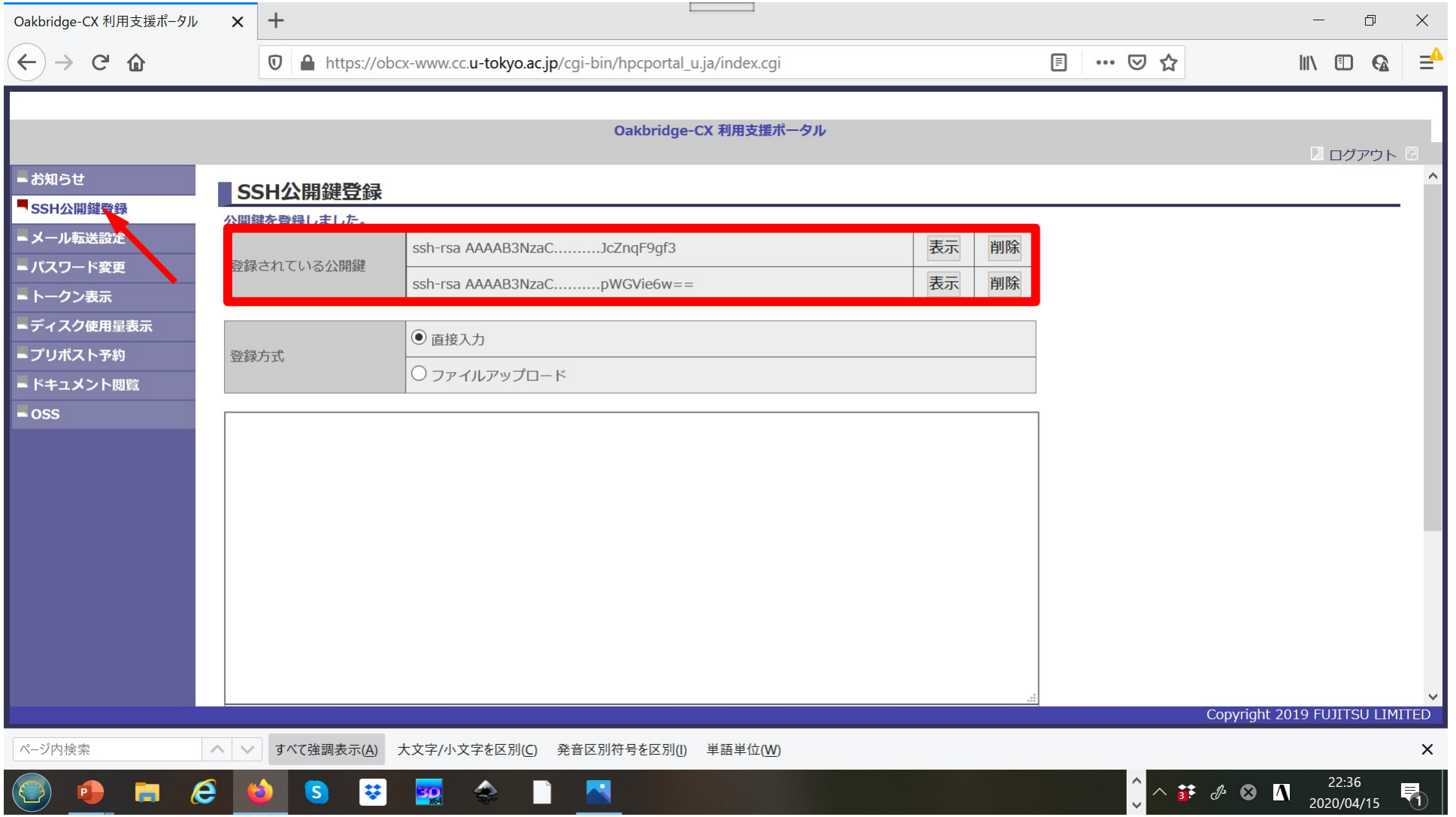
③公開鍵登録（id_rsa.pub）



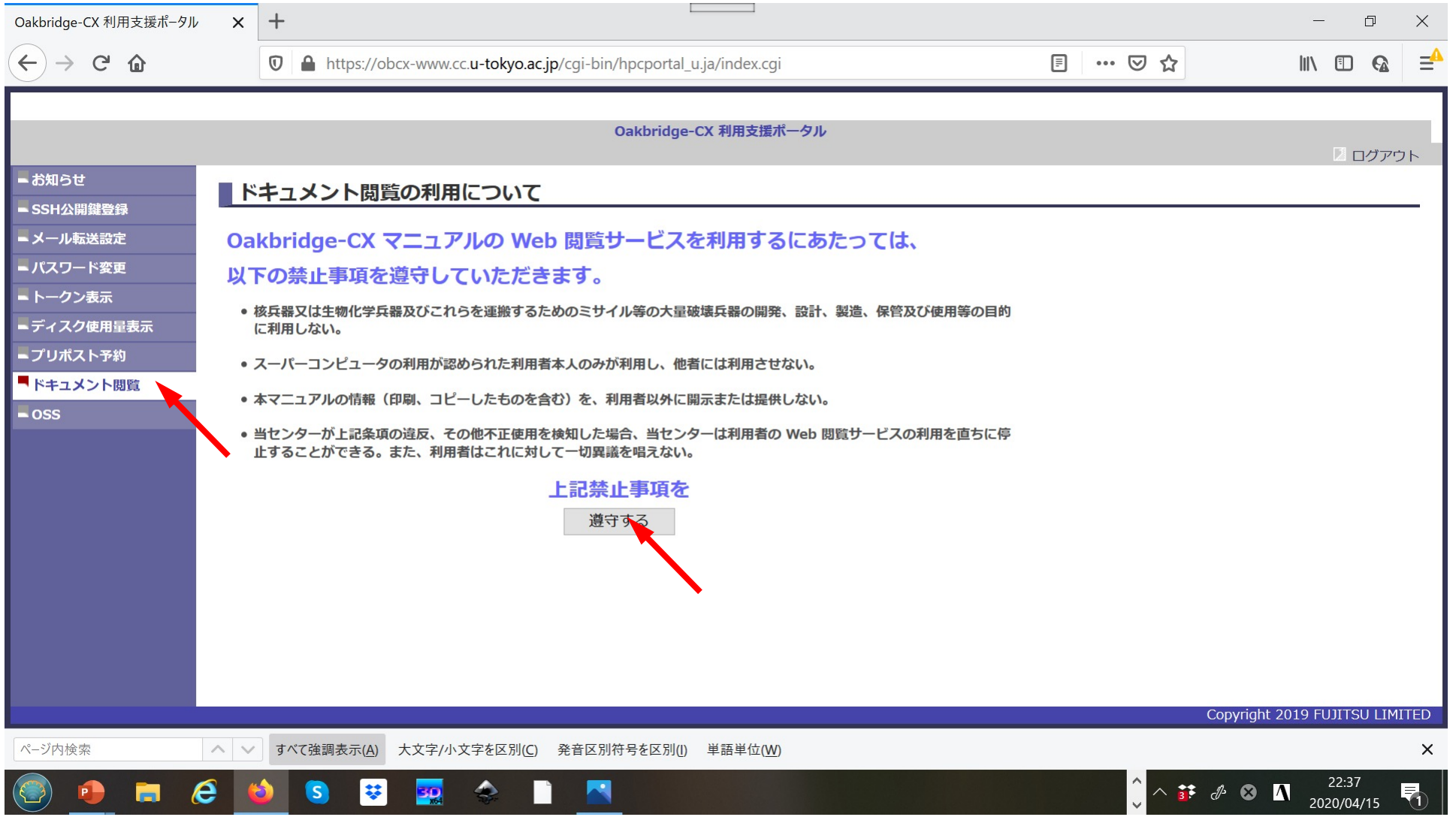
1. 「SSH公開鍵登録」を選択
2. 先ほどCopyした公開鍵（ id_rsa.pub) を貼り付ける
3. 「登録」をクリック

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



ポータルサイトでのマニュアル等閲覧（1/2）



ポータルサイトでのマニュアル等閲覧（2/2）

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 Maintenan
     04/24(Fri) 20:00 -                   Normal Operation

    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 ~]$
```

ログインに成功したら，今後のメインテナンスのスケジュールなどが表示される

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  Return

/home/tUVXYZ
```

pwd ー 現在のディレクトリ(フォルダ)
を位置を返すコマンド

休憩

余裕のあるかたは次のページ以降を
少し予習してください

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

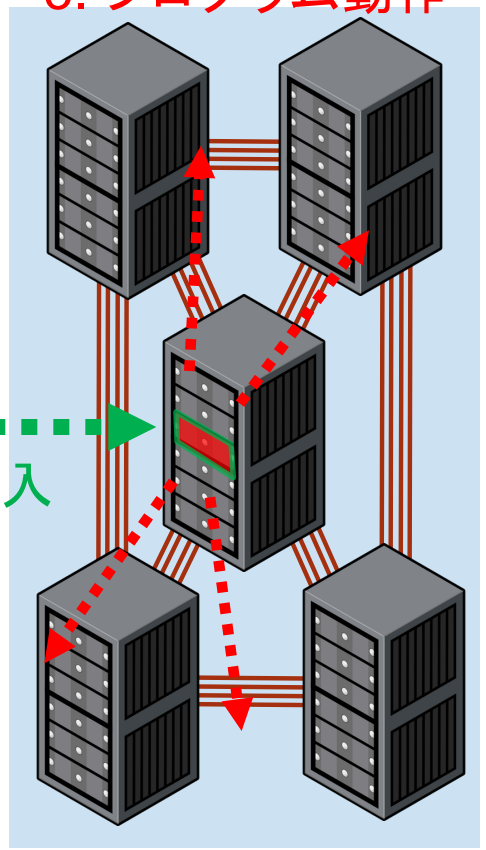
1. ログイン
SSH

ログインノード

```
[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
```

2. ジョブ投入

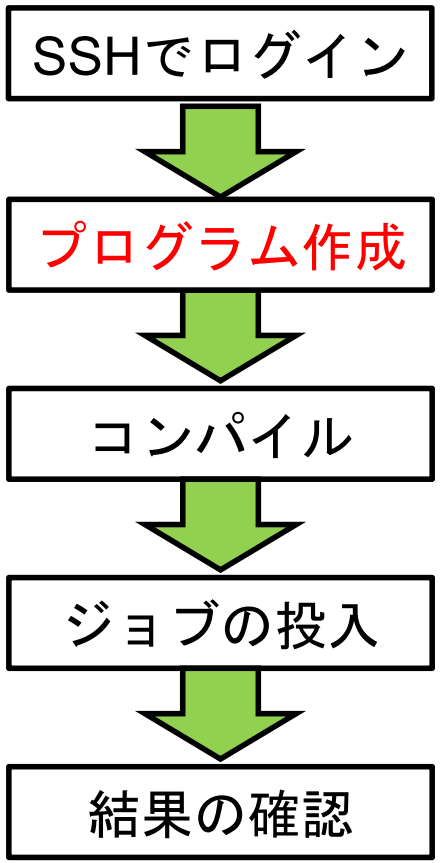
3. プログラム動作



計算ノード
= 本体

SSH で接続するには
鍵の準備が必要！

スパコンを使うための手順



Putty、Cygwin、SSH、鍵認証

エディタ(emacs, vi, nano)、Linux 利用法

環境モジュール、コンパイルオプション

ジョブスクリプトの作成、ジョブ管理

コマンドとは？

特定の機能を実行する命令

$コマンド [オプション1、オプション2・・・] 引数1、引数2・・・・・

例　　$ cd /home/t00270/　　（作業ディレクトリを変更）
$ *cp a.txt b.txt*
(a.txt と同じ内容のファイルを b.txt として作成）

コマンドの例

コマンド	用途	よく使うオプション
pwd	現在のディレクトリを表示	
cd	ディレクトリを変更	
ls	ファイル一覧を表示	-l ： 詳細表示
cp	ファイルまたはディレクトリのコピー	-r ： 再帰的にコピー
rm	ファイルまたはディレクトリの削除	-r ： 再帰的に削除
exit	セッションの終了（スパコンからログアウト）	

ほかのコマンドの例（簡単なもの）

コマンド	用途	よく使うオプション
mv	ファイルまたはディレクトリの移動	
rm	ファイルまたはディレクトリの削除	-r ： 再帰的に削除
mkdir	ディレクトリの作成	
man	コマンドの説明	
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）	-n ## ： 表示行数の指定
tail	ファイル内容の表示（末尾部分）	-n ## ： 表示行数の指定
grep	ファイルに含まれる文字列を検索	
diff	２つのファイルの内容比較	
echo	変数や文字列の値を出力	
exit	セッションの終了	

Bash特有の機能

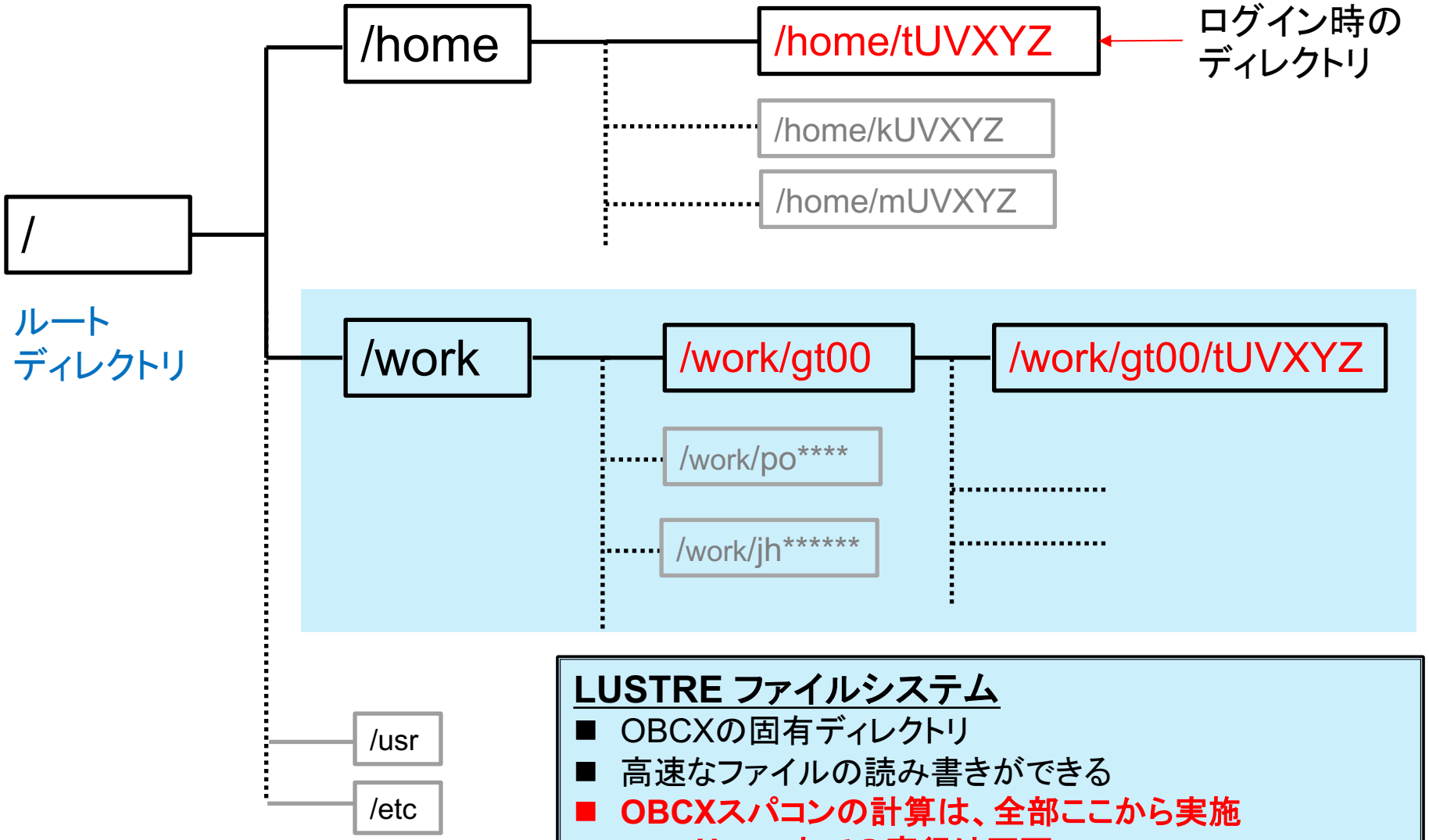
OBCXシステムのデフォルトシェルはbashです。

コマンド入力を簡易にする基本機能一覧

	操作	動作内容
Auto fill	tab	途中まで入力したコマンドやパスの残りを補完
履歴	↑	過去に実行したコマンドを1つずつさかのぼる
履歴探索モード	ctrl+r	過去に実行したコマンドを検索
リダイレクト	>	結果をファイルなどに出力 例：ls > list.txt　list.txtにlsの結果が出力される
パイプ	|	結果を次のコマンドに渡す 例：ls | sort　　lsコマンドの結果をソートする

コマンドとbashの機能を使用したスクリプトも記述可能

Linux(OBCX)でのディレクトリ構造



LUSTRE ファイルシステム

- OBCXの固有ディレクトリ
- 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**
  - **Home上での実行は不可**
- トラブルもたまにあるので /homeから隔離されています

コマンドの実行例

コマンドの実行例

```
[ tUVXYZ @obcx05 ~]$ pwd
/home/ tUVXYZ
[ tUVXYZ @obcx05 ~]$ cd /work/gt00/ tUVXYZ
[ tUVXYZ @obcx05  tUVXYZ ]$ cd ../
[ tUVXYZ @obcx05 gt00]$ pwd
/work/gt00
[ tUVXYZ @obcx05 gt00]$ cd ~/
[ tUVXYZ @obcx05 ~]$ pwd
/home/ tUVXYZ
[ tUVXYZ @obcx05 ~]$ cd /work/gt00/ tUVXYZ
[ tUVXYZ @obcx05  tUVXYZ ]$ mkdir test
[ tUVXYZ @obcx05  tUVXYZ ]$ ls
test
[ tUVXYZ @obcx05  tUVXYZ ]$
```

現在のディレクトリを出力

講習会用ディレクトリに移動

1つ上のディレクトリに移動

ホームディレクトリに移動

testディレクトリを作成

現在のディレクトリにあるファイルおよびディレクトリー覧を表示

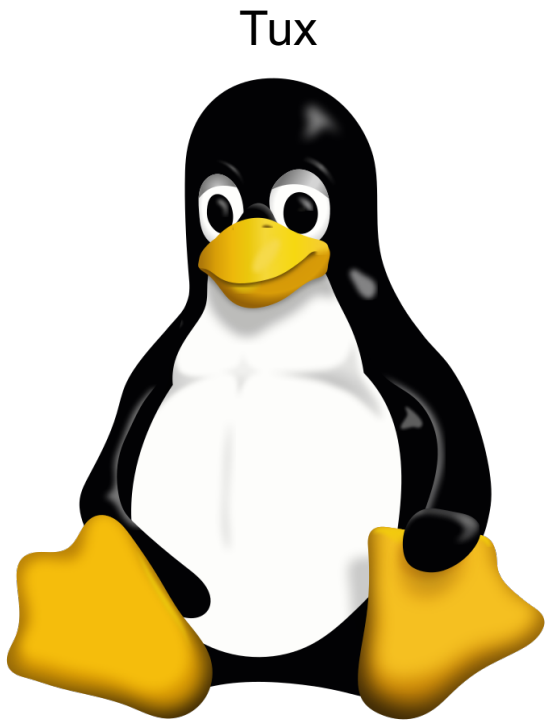
Linux OS

世界中のスパコンのほとんどが採用しているOS

- 現在のTOP500（上位500台のスパコンランキング）のシェアは100%
- スパコンだけでなく、サーバーの多くはLinuxで動作
- 基本的にOpenSourceで構成
- CLI（Command Line Interface)で完結、高機能なShellが用意されている。
  - 本講習ではBashを使用
  - GUI(Graphical User Interface)もあり。
    スパコンではあまり使わない。

講習会では基本的なコマンドとBashについて扱います。

Linuxではフォルダをディレクトリといいます。
（この後頻出します。）


Tux

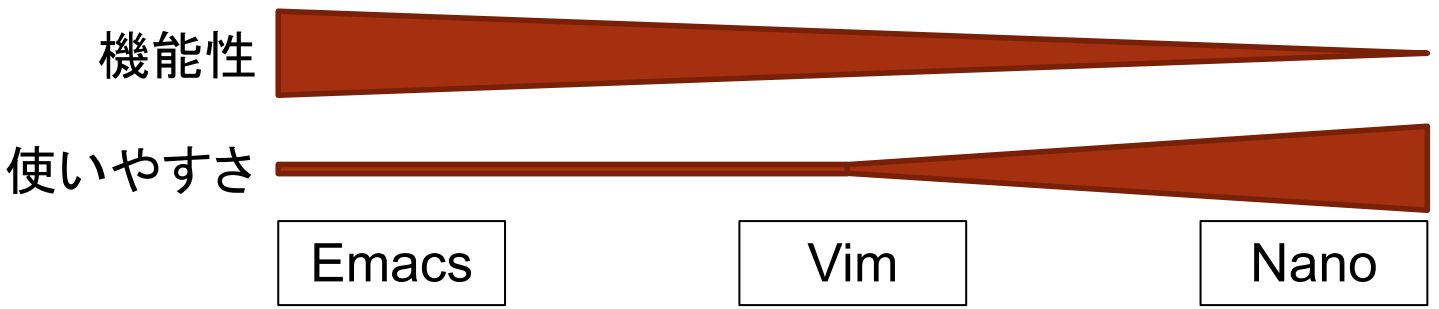
エディタ

ファイルを編集するためのソフトウェア

Windowsの標準だとメモ帳に該当

Linuxでは以下のエディタが有名（ほかにもたくさんあります）

- Emacs
  - 高機能
  - 拡張機能も豊富 (LISPで記述されている)
- Vim
  - 軽量
  - Linuxの初期状態でインストールされている
- Nano
  - 一番簡易
  - コマンドが下段に表示されるため、わかりやすい



ログインしたら

```
$ pwd    Return

/home/tUVXYZ

$ cd /work/gt00/tUVXYZ  Return
$ pwd    Return

/work/gt00/tUVXYZ

$ cd     Return
$ pwd    Return

/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

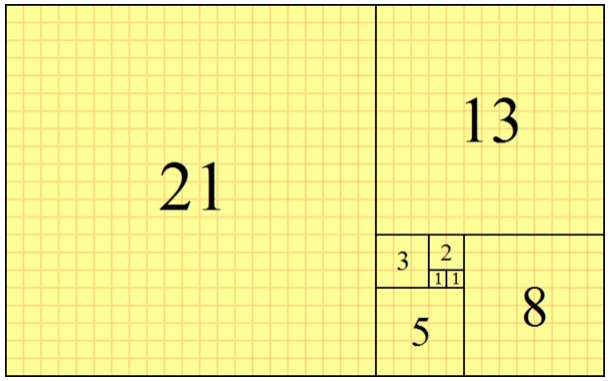
$$F_0 = 1$$

$$F_1 = 1$$

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

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ー利用の出発点



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

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   Return
```

例2： vim を使用，Python プログラムを作成

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

例3： nano を使用, C プログラムを作成

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

Emacs チートシート

$ emacsで起動

Emacs ＝「control (ctl) キー ＋ 文字」でコマンドに移行

コマンド	
Ctl-x Ctl-s	編集中のファイルを同じファイル名で保存
Ctl-x Ctl-w	編集中のファイルを名前をつけて保存
Ctl-x Ctl-f	既存のファイルを開く
Ctl-x Ctl-c	Emacs を終了する （保存するか聞かれたらY/N で答える）
Ctl-g	コマンド入力
Ctl-a	行の先頭にカーソルを持ってくる
Ctl-k	カーソルから行末までを削除し、 （クリップボードみたいなところに）コピー
Ctl-y	コピーされた内容を貼り付ける
C-space	Mark Set
Mark Set, 範囲選択, M, w	コピー
Mark Set, 範囲選択, C-w	切り取り
Ctl-s	文字列を検索する
Esc-%	文字列を置換する

コマンド確認画面

vim チートシート

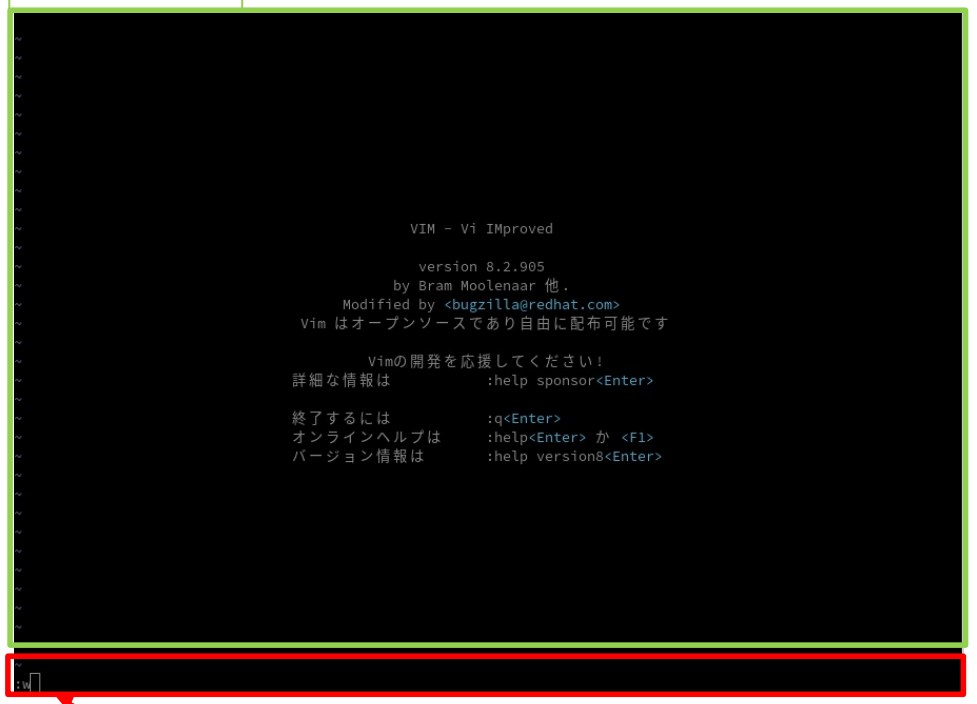
$ vi で起動

ノーマルモード / 入力モード / コマンドを切り替え

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

キー	
Esc	ノーマルモードに移行する
i	入力モード（挿入）に移行する
o	新しい行を追加して入力モード（挿入）に移行
R	入力モード（上書き）に移行する
:w ###	コマンド - ファイル名 ### で保存する
:q	コマンド - vim を終了する
:q!	コマンド - 保存せずにvim を強制終了する
/###	### という文字列を検索する
yy	カーソルのある行をコピーする
p	貼り付けする

編集画面



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

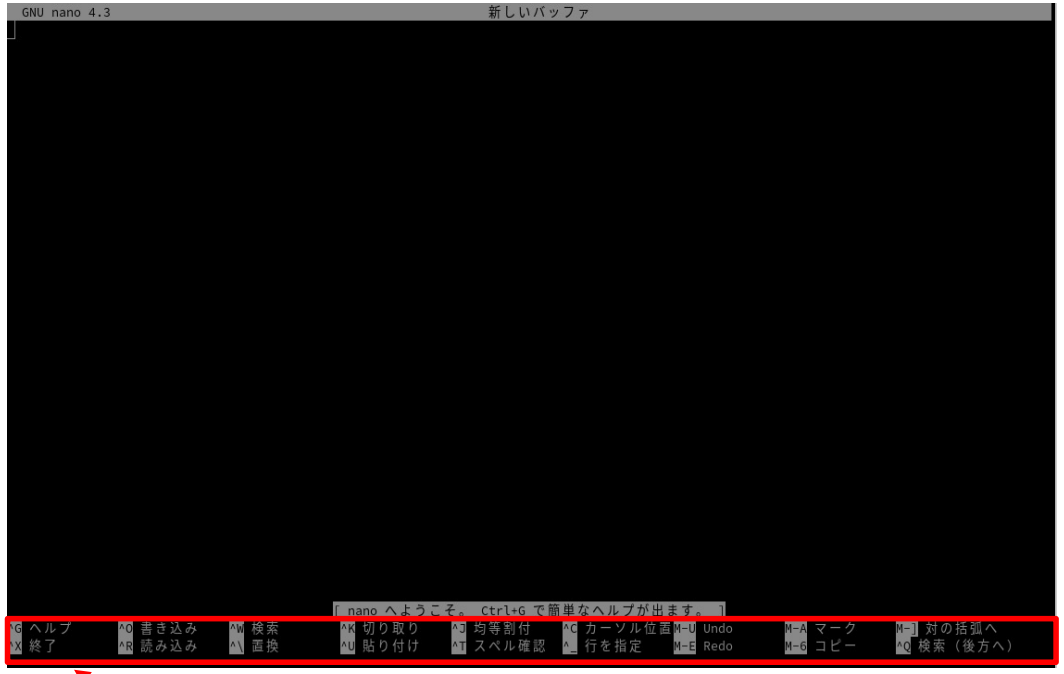
nano チートシート

nano = 最も操作方法が単純　　—予習漏れの場合はお使いください。

$ nano で起動

- M-U → Escキー、Uキーを順番に押す

キー	
Ctl+S	ファイルを保存
Ctl+O	ファイルを名前をつけて保存
Ctl+X	nano エディタ を終了する
Ctl+W	文字列を検索（順方向）
Ctl+D	カーソルのある文字を削除
M-A	マーク
M-6	コピー
Ctl+K	1行カットして削除
Ctl+U	ペースト



コマンド確認画面
- ^ → Ctl
- M → Esc
- - → 順次押す

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）¥ マークがあればバックスラッシュ 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

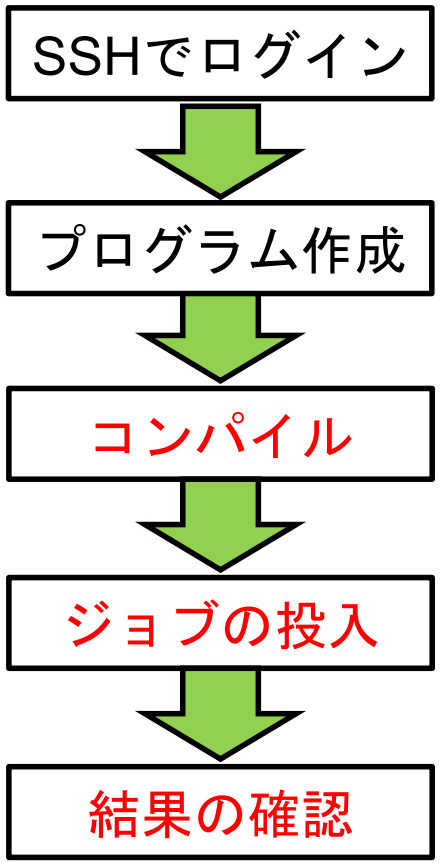
プログラム作成 `[tUVXYZ@obcx01 fibonacci]$ emacs fibonacci.py` Return

```
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。

スパコンを使うための手順



Putty、Cygwin、SSH、鍵認証

エディタ(emacs, vi, nano)、Linux 利用法

環境モジュール、コンパイルオプション

ジョブスクリプトの作成、ジョブ管理

Environmental modules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        Return
Currently Loaded Modulefiles:
  1) impi/2019.9.304    2) intel/2020.4.304
```

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

利用可能なenvironmental modules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/impi/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
```

OBCX ではmodule 依存関係が複雑 → 簡易表示コマンドがあります

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

Return

ApplicationName	ModuleName	Node	BaseCompiler/MPI
ALPS	alps/2.3.0	login,compute	intel/2020.4.304/impi/2019.9.304
Acusolve	acusolve/2019.1.0	login,compute	-
Advisor	advisor/2019.4.0.597843	login,compute	-
Advisor	advisor/2019.5.0.602216	login,compute	-
Advisor	advisor/2020.3.0.607294	login,compute	-
Advisor	advisor/2019.3.0.591490	login,compute	-
AkaiKKR	akaikkr/cpa2002v010	login,compute	intel/2020.4.304
Anaconda	anaconda/2-2019.03	login,compute	-
Anaconda	anaconda/3-2019.03	login,compute	-
Arm DDT	ddt/19.1	compute	-
Arm DDT	ddt/20.2.1	compute	-
Arm DDT	ddt/20.0.2	compute	-
BLAST	blast/2.11.0	login,compute	intel/2020.4.304
BWA	bwa/0.7.17	login,compute	intel/2020.4.304
BioPerl	bioperl/1.007002	login,compute	-
BioRuby	bioruby/1.5.2	login,compute	-
Bioconductor	bioconductor/3.10	login,compute	intel/2020.4.304
CMake	cmake/3.0.2	login,compute	-
CMake	cmake/3.14.5	login,compute	-
CP2K	cp2k/v8.1	login,compute	intel/2020.4.304/impi/2019.9.304
Devtoolset	devtoolset/7	login,compute	-
FFTW	fftw/3.3.8	login,compute	intel/2020.4.304
FFTW	mpi-fftw/3.3.8	login,compute	intel/2020.4.304/impi/2019.9.304
FeRAM	feram/0.26.04	login,compute	intel/2020.4.304/impi/2019.9.304
GATK	gatk/4.1.2.0	login,compute	-
GCC	gcc/4.8.5	login,compute	-
GCC	gcc/7.5.0	login,compute	-
GNU Octave	octave/6.1.0	login,compute	-
GNU Scientific Library	gsl/2.6	login,compute	intel/2020.4.304
GROMACS	gromacs/2020.5	login,compute	intel/2020.4.304/impi/2019.9.304
Go	go/1.12.6	login,compute	-
HDF5	hdf5/1.12.0	login,compute	intel/2020.4.304
HDF5	hdf5/1.8.22	login,compute	intel/2020.4.304
HDF5	phdf5/1.12.0	login,compute	intel/2020.4.304/impi/2019.9.304
HDF5	phdf5/1.8.22	login,compute	intel/2020.4.304/impi/2019.9.304
HyperWorks	hyperworks/2019.1.0	login,compute	-
IASP91	iasp91/default	compute	-
Inspector	inspector/2019.5.0.602103	login,compute	-
Inspector	inspector/2019.3.0.591484	login,compute	-

コンパイラと連動

↓

対応するベースコンパイラの情報も一緒に表示されます

コンパイル、実行環境構築

コンパイル、実行環境を整えるために、moduleコマンドを使用

$ module [オプション] *引数*

オプション	内容
avail	利用可能な環境の一覧を表示
list	現在ロードしている環境一覧を表示
load	指定した環境のロード
unload	指定した環境のアンロード
switch	環境のロードとアンロードを同時に実行
purge	環境を全てアンロード

例えば、Pythonを使用する場合、

$ module load python/3.7.3

Environmental modulesの利用 (2)

Intel コンパイラの前のバージョンを 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 は比較的最近の 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

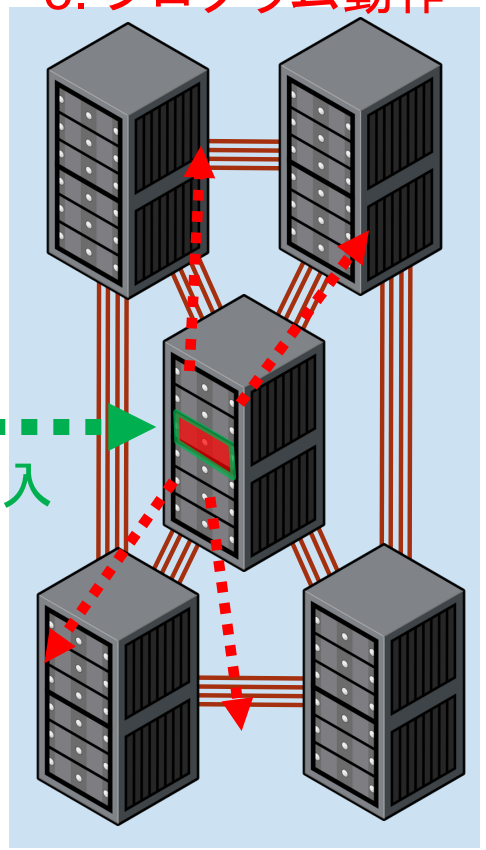
1. ログイン
SSH

```
[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！

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！

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

Return

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

プログラムのコンパイル

IntelおよびGNUコンパイラがインストール済み

ソースコードのタイプ	コンパイラ開発元	言語	呼び出しコマンド
非MPIコード	Intel	C	icc
		Fortran	ifort
	GNU	C	gcc
		Fortran	gfortran
MPIコード	Intel	C	mpiicc
		Fortran	mpiifort
	GNU	C	mpicc
		Fortran	mpif77 or mpif90

IntelでC言語のコードをコンパイルする場合
$ icc [オプション] “ソースコード.c” –o “出力ファイル名”
GNUでFortran90/95のコードをコンパイルする場合
$ gfortran [オプション] -free-line-length-none “ソースコード.f90” –o “出力ファイル名”

-free-line-length-none : Fortranの自由形式を有効化

コンパイルオプション例（参考情報）

IntelおよびGNUでよく使うコンパイルオプション一覧

タイプ	言語	Intel オプション	GNU オプション	内容
共通	共通	-qopenmp	-fopenmp	OpenMPを有効化
デバッグ オプション	共通	-g		実行ファイルにソースコードの情報を付与
		-Wall		コンパイル時にバグの元になりそうな箇所を検知
		-traceback	-fbacktrace	実行時にエラー発生個所を特定
	Fortran	-check bounds	-fbounds-check	実行中に初期化していない値へのアクセスなどを検知
最適化 オプション	共通	-O0、-O1、-O2、-O3		数字が大きいほど積極的な最適化を適用
		-xHost	-march=native	CPUアーキテクチャを考慮した最適化を有効化

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

[tUVXYZ@obcx01 ~]$ cd  /work/gt00/tUVXYZ/fibonacci Return
```

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    Return
```

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
```

ジョブの管理コマンド

コマンド	内容	使い方
pjsub	ジョブの投入	$pjsub “script.sh”
pjdel	ジョブの削除	$pjdel “job ID”
pjstat	ジョブの状態	$pjstat

注＊これらのコマンドはスパコンによって異なる

pjstatのオプション

- -H　　：終了したジョブの確認
- --rsc -b：各リソースグループの混雑具合を確認可能
- --rsc -x：各リソースグループで要求可能なリソース量を出力
- --nodeuse：　OBCX全体での使用状況確認

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。

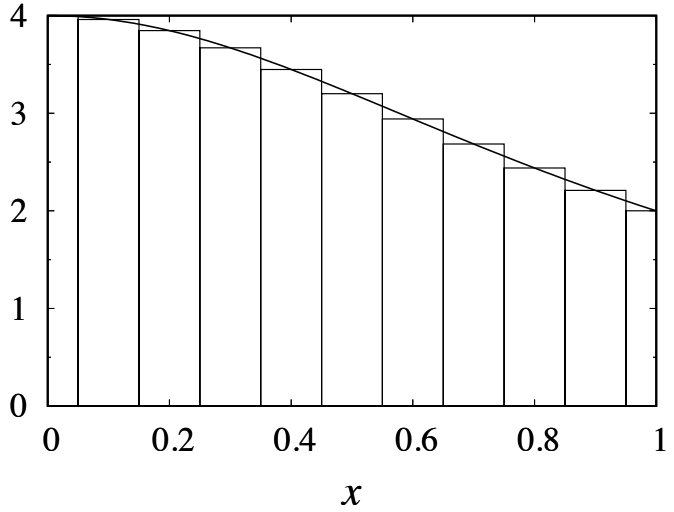
ジョブスクリプト
fibonacci.sh

```
#!/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

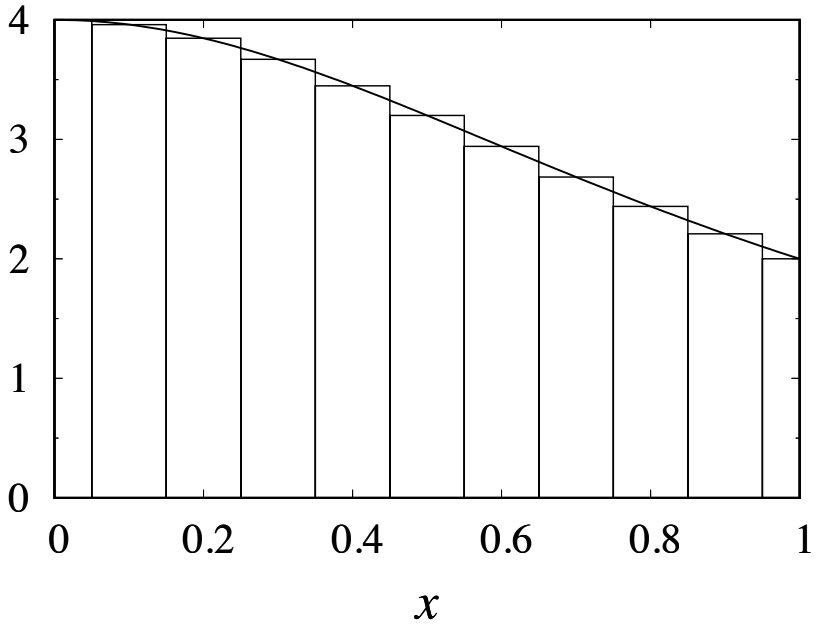
数値積分を並列化 → 性能が向上する。

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 $x = \tan\theta$

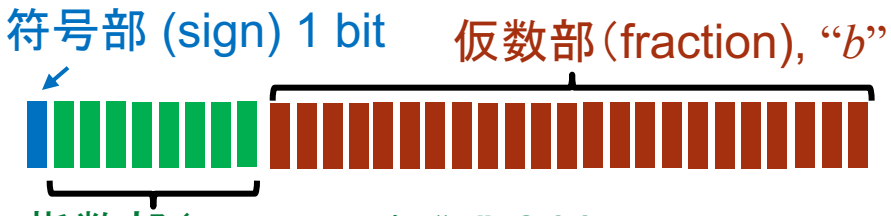
$$dx = \frac{d\theta}{\cos^2\theta}$$

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

コンピュータにおける演算の仕組み

(ノイマン型) コンピューター上では、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



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

$\log_{10}(2^{23}) \sim 7$ 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

倍精度浮動小数点 = 64ビットで1つの実数を表現

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

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

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("Exectution time = ", t2 - t1, " (sec.)"
```

プログラムなど一式を自分の /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_mpi
```

Fortran の方

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

アスタリスク = ワイルドカード
「ここはなんでも良い」

C の方

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

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_n1c0004.sh
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ pjsub run_n1c0028.sh
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ pjsub run_n1c0056.sh
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ pjsub run_n2c0112.sh
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ pjsub run_n4c0224.sh
[tUVXYZ@obcx01 calc_pi_mpi]$ pjsub run_n8c0448.sh
```

- 1ノード, 4コア
- 1ノード, 28コア
- 1ノード, 56コア
- 2ノード, 112コア
- 4ノード, 224コア
- 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]$ pjstat
```

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_n1c0004.txt	result_n4c0448.txt	run_n4c0224.sh
result_n1c0028.txt	run_n1c0004.sh	run_n8c0448.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_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.)

==> result_n8c0448.txt <==
PI(MPI) = 3.141592653589797557
Number of cores utilized = 448
Execution time = **.******** (sec.)
```

参考情報：OBCXのリソースグループ

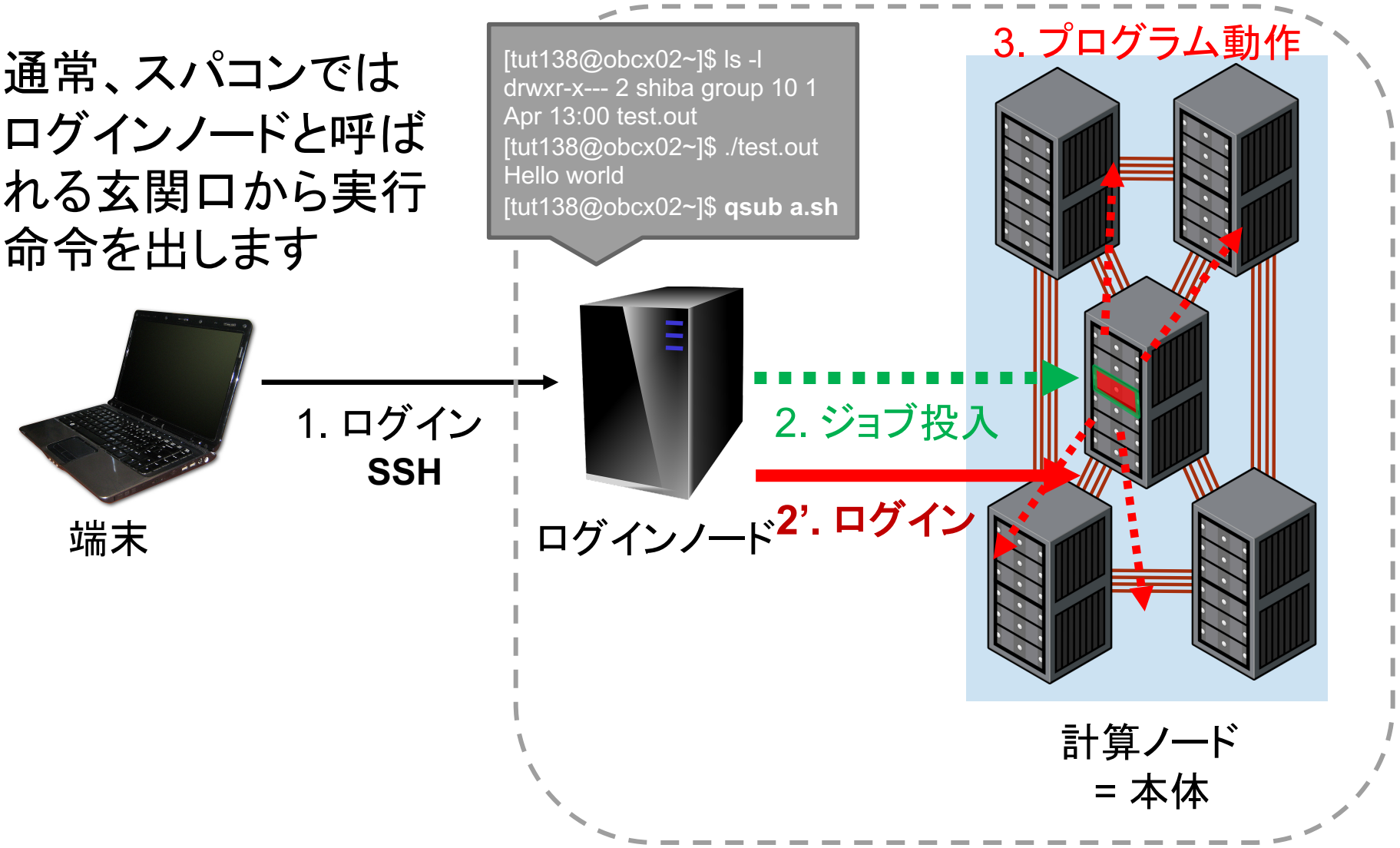
リソースグループ毎のノード数および最長実行時間一覧

リソースグループ名	ノード数	最長実行時間	説明
debug	1～16	30分	デバッグ用
short	1～8	8時間	短いジョブ用
regular	1～128	48時間	通常使うリソースグループ
	129～256	24時間	
interactive	1	2時間	インタラクティブジョブ用（後述）
	2～8	10分	
tutorial	1～8	15分	講習会用
lecture	1～8	15分	講習会後一か月間有効

- 講習会中はtutorialをご使用ください。
- 講習会後から利用期限まではlectureをご利用ください。
- それ以外のリソースグループは使用できません。

参考情報：計算ノードで直接操作したい場合

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



参考情報：計算ノードで直接操作したい場合

インタラクティブジョブ
対話型のジョブ デバッグなどに便利

手元で実行しているのと同様の挙動

```
[tUVXYZ@obcx04 tUVXYZ]$ pjsub --interact -g gt00 -L rscgrp=interactive,node=1
[INFO] PJM 0000 pjsub Job 517079 submitted.
[INFO] PJM 0081 .connected.
[INFO] PJM 0082 pjsub Interactive job 517079 started.
[tUVXYZ@cx0065 tUVXYZ]$
```

ログインノード(obcx04)から計算ノード(cx0065)へログインしたような状態で
プログラムの実行が可能

ログインノードとは違い専用の領域にいるので、負荷のある実行をして良い

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ー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 fibonacci.txt
/work/00/gt00/tUVXYZ/fibonacci.txt      100%  171    11.9KB/s   00:00

sftp > exit
Mac-mini:~ shiba$ ls
fibonacci.txt
```