サイバーメディアセンター
大規模計算機システムの利用

大阪大学 情報推進部 情報基盤課

本日のプログラム

I. システムのご紹介
II. 利用方法の解説・実習
    i. システムへの接続
    ii. プログラムの作成・コンパイル
    iii. ジョブスクリプトの作成
    iv. ジョブスクリプトの投入
III. 利用を希望する方へ

SX-ACE

NEC製のベクトル型スーパーコンピュータ

	ノード毎	1クラスタ（512ノード）	総合（3クラスタ）
CPU数	1	512	1536
コア数	4	2048	6144
演算性能	276 GFLOPS	141 TFLOPS	423 TFLOPS
ベクトル性能	256 GFLOPS	131 TFLOPS	393 TFLOPS
メモリ	64GB	32TB	96TB

VCC (大規模可視化対応PCクラスタ)

NEC製のスカラ型クラスタシステム

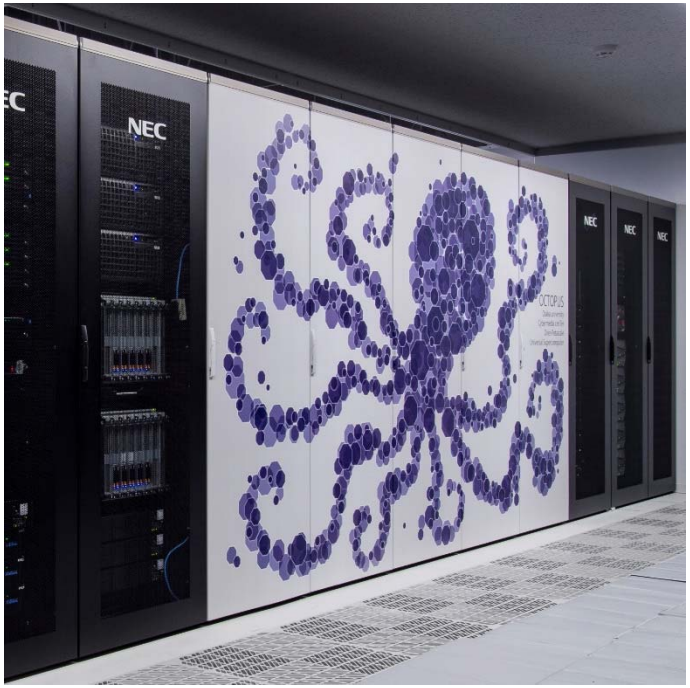
GPU計算や可視化装置との連動が可能

	1ノード	総合(66ノード)
CPU数	2	132
コア数	20	1320
演算性能	0.4 TFlops	26.0 Tflops
メモリ	64 GB	4.160 TB
GPU	59枚 (69.03 Tflops)	

2017/4 増設	1ノード	総合(3ノード)
CPU数	2	6
コア数	28	84
演算性能	1.5 TFlops	4.7 Tflops
メモリ	64 GB	192 GB

OCTOPUS

NEC製のスカラ型クラスタシステム
構成の異なる4種類のノードで構成されている



	CPUノード	GPUノード	Xeon Phi ノード	大容量主記憶 搭載ノード	合計
CPU数	2	2	1	8	606
コア数	24	24	64	128	9624
演算性能	1.996 TFLOPS	23.196 TFLOPS	2.662 TFLOPS	8.192 TFLOPS	1.463 PFLOPS
メモリ	192GB	192GB	192GB	6TB	72.864TB
ノード数	236ノード	37ノード	44ノード	2ノード	319ノード

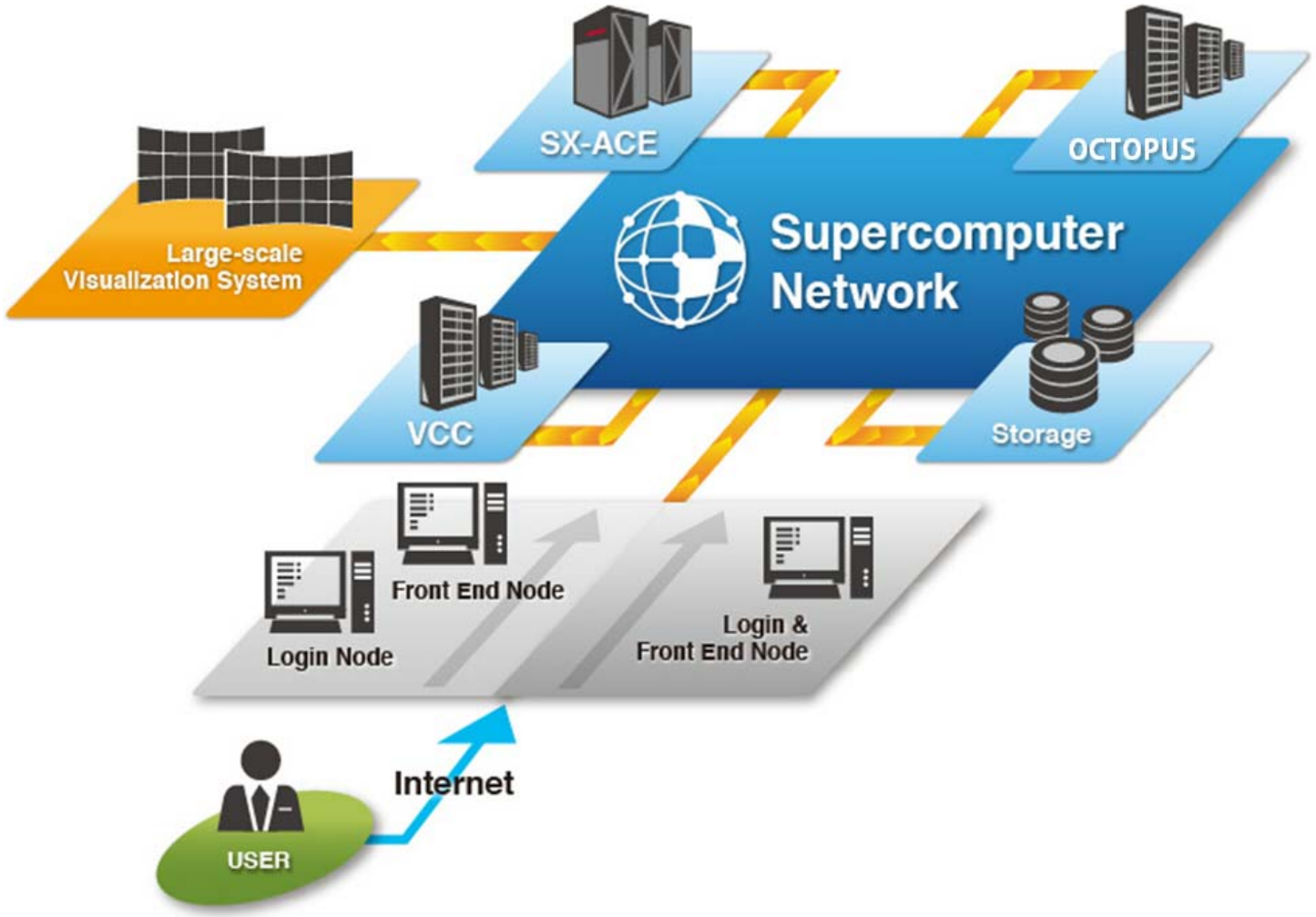
フロントエンド端末

プログラムのコンパイルや計算結果の確認を行うための作業用端末

フロントエンド端末から各計算機に対して
処理の実行を指示　※詳細は後述

計算機自体へのログインは原則禁止(一部例外有)

システム全体図


SX-ACE
OCTOPUS
Large-scale
Visualization System
Supercomputer
Network
VCC
Storage
Front End Node
Login Node
Login &
Front End Node
Internet
USER

本日のプログラム

I. システムのご紹介

II. 利用方法の解説・実習

- i. システムへの接続
- ii. プログラムの作成・コンパイル
- iii. ジョブスクリプトの作成
- iv. ジョブスクリプトの投入

III. 利用を希望する方へ

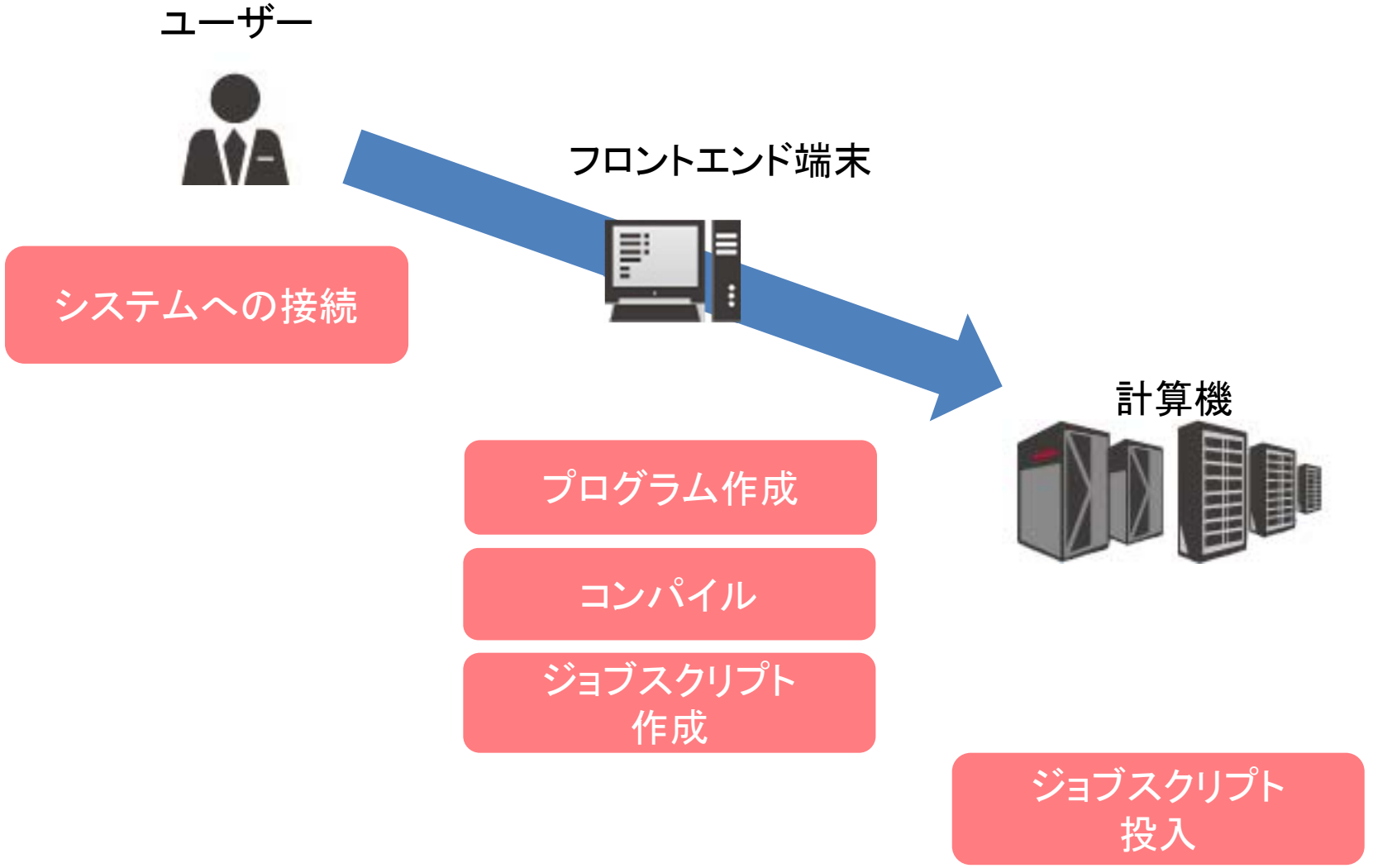
利用方法の解説・実習

本項では初心者を対象に
大規模計算機システムの利用方法を解説します

途中、実習も行います

- 配布したアカウントは講習会後もしばらく利用可能
- ご自宅からでもシステムに接続できます

利用の流れ


ユーザー
フロントエンド端末
計算機
システムへの接続
プログラム作成
コンパイル
ジョブスクリプト
作成
ジョブスクリプト
投入

本日のプログラム

I. システムのご紹介

II. 利用方法の解説・実習

- i. システムへの接続
- ii. プログラムの作成・コンパイル
- iii. ジョブスクリプトの作成
- iv. ジョブスクリプトの投入

III. 利用を希望する方へ

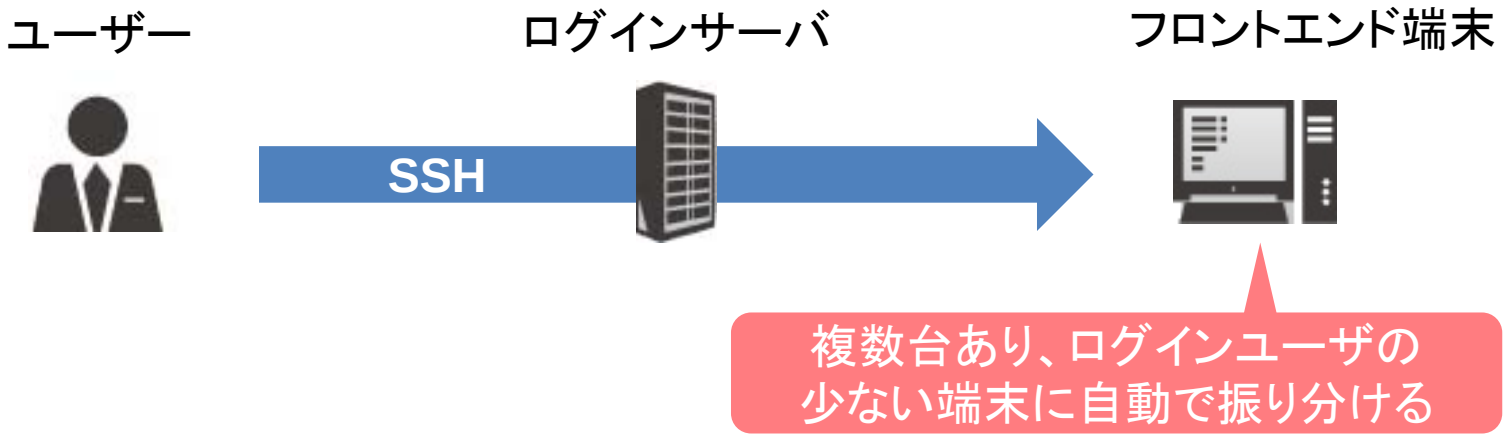
システムへの接続

ログインはSSH（Secure Shell）接続

Win: TeraTermなど, Mac: ターミナルを使用

接続先は SX-ACE, VCC：**login.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp**

OCTOPUS　：**octopus.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp**



本日のプログラム

I. システムのご紹介

II. 利用方法の解説・実習

i. システムへの接続

ii. プログラムの作成・コンパイル

iii. ジョブスクリプトの作成

iv. ジョブスクリプトの投入

III. 利用を希望する方へ

プログラムの作成

計算機を利用するために、まずプログラムを作成する必要があります

今回はプログラムを用意しました

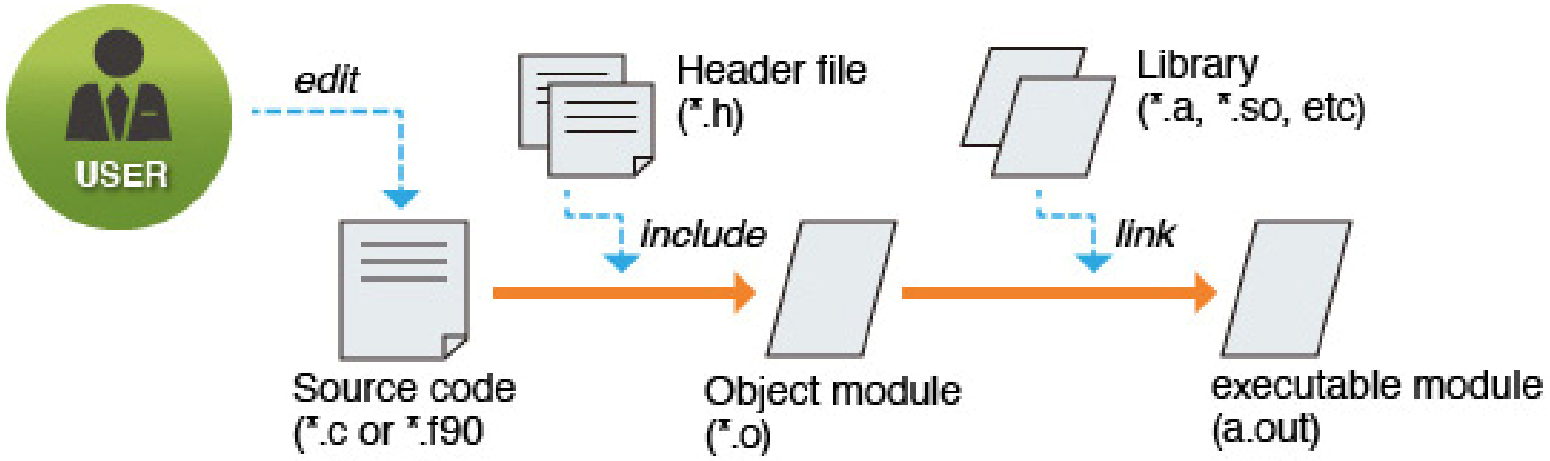
当センターの計算機で使用可能な言語

Fortran言語、C言語、C++言語

「プログラムの書き方」については
特に説明しません

コンパイル

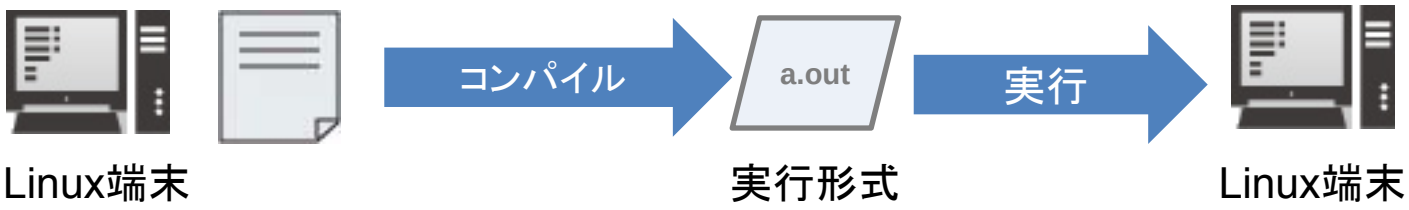
プログラムを「機械が実行できる形式」に
変換すること



コンパイルの種類

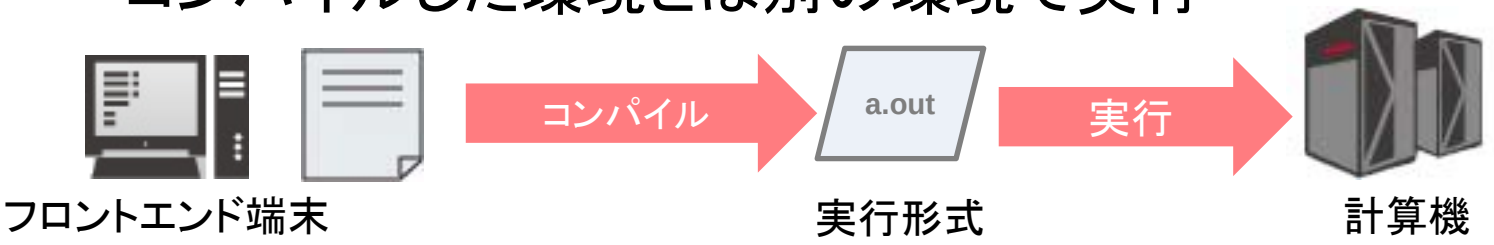
セルフコンパイル

コンパイルした環境と同じ環境で実行



クロスコンパイル

コンパイルした環境とは別の環境で実行



当センターでは「クロスコンパイル」を使用

コンパイルの方法

コンパイルを行う際のコマンド

	Fortran言語	C言語	C++言語
SXクロスコンパイラ（SX-ACE用）	sxf90	sxc++	
Intelコンパイラ（OCTOPUS,VCC用）	ifort	icc	icpc

コマンド例(SX-ACE用Fortranプログラム)

$ sxf90 program.f

→実行形式ファイル「a.out」が生成

コンパイルオプション

コンパイル時にオプションを指定することで
様々な機能を使用することが可能

```
$ sxf90 program.f -option
```

オプションの一例

-o [filename] : 実行形式のファイル名を指定
指定しない場合は「a.out」が出力

-Rn : 翻訳リスト出力（ nには0～5を指定）
最適化等によるプログラムの変形内容を出力

-ftrace : 簡易性能解析機能
ジョブスクリプトに“setenv F_FTRACE YES ”の指定が必要
プログラム実行後に解析ファイルを出力

コンパイルオプション(参考)

オプションの一例

-P [suboption]：並列化オプション

並列化処理を使用する場合に指定

suboptionには、auto、openmp、multi等を指定可能

-C [suboption]：最適化オプション

ベクトル化、最適化のレベル指定

suboptionには、hopt、vopt、vsafe、ssafe、debugを指定可

詳しい解説は下記の講習会にて行います

SX-ACE 高速化技法の基礎	2019年9月11日(水) 13:30 – 17:30
並列コンピュータ 高速化技法の基礎	2019年9月12日(木) 13:30 – 16:30

演習1（コンパイル）

1. 演習用プログラムを取得してください

(例) $ cp /sc/cmc/apl/kousyu/nyumon/sample.f ~/

2. sample.f をSX用にコンパイルしてください

(例) $ sxf90 sample.f -o sx.out

3. sample.f をVCC用にコンパイルしてください

(例) $ ifort sample.f -o vcc.out

※文字入力時は [Tab]キーでの補完機能を活用してください

本日のプログラム

I. システムのご紹介

II. 利用方法の解説・実習

i. システムへの接続

ii. プログラムの作成・コンパイル

iii. ジョブスクリプトの作成

iv. ジョブスクリプトの投入

III. 利用を希望する方へ

計算機の利用方法

会話型（インタラクティブ利用）

コマンド等を通してコンピュータに直接命令し、リアルタイムで処理を実行

操作として手軽

一括処理型（バッチ利用）

コンピュータにまとめて処理を命令し実行

処理の命令が終われば、ログアウトしてもOK

会話型

原則として利用不可

旧SXでは会話型が利用可能だった

→**現在稼働中の計算機では利用不可**

ただし“会話型風”の機能はあり

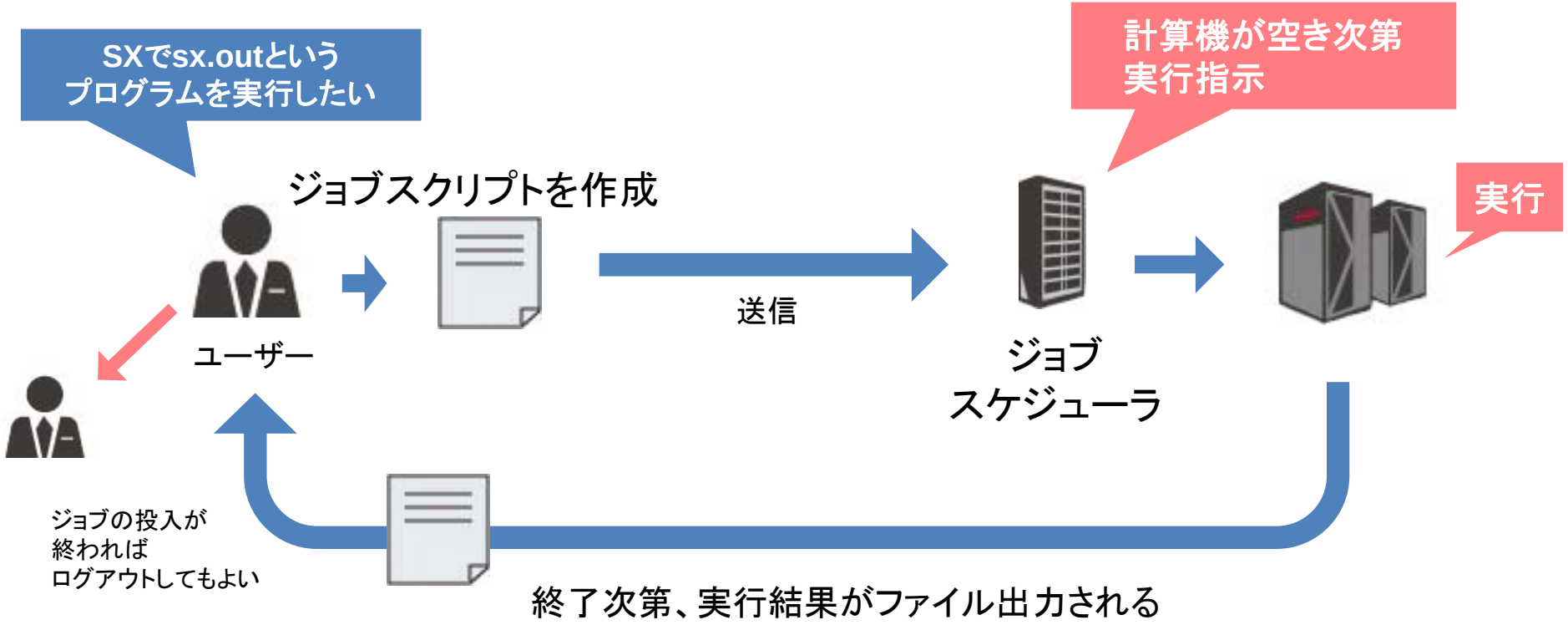
フロントエンド端末での計算実行も禁止

基本的に「一括処理型」で利用

一括処理型

処理を「ジョブスクリプト」に記述

スクリプトに基づき計算機が処理を実行



ジョブスクリプト

ジョブスクリプトの構成

リソースや環境設定：#PBSから始まるNQSオプション

計算機に実行させる処理の記述：シェルスクリプト

ジョブスクリプトの例

```
#!/bin/csh

#PBS -q ACE
#PBS -l elapstim_req=1:00:00,memsz_job=60GB

cd $PBS_O_WORKDIR
./sx.out > result.txt
```

リソース、環境設定の指定

計算機に実行させる処理の記述

リソース、環境設定の指定

NQSIIオプション(以下)でリソースや環境の設定を行う

オプション	説明
#PBS -q	**ジョブクラスを指定し、計算に使用する計算機やリソースを指定する**
#PBS -l	**使用する資源値**
	elapstim_req ： ジョブの経過時間
	memsz_job ： 1ノードあたりのメモリ量
	cpunum_job ： 1ノード当たりのCPU数
#PBS -m	計算の処理状態に変化が起きたときメール通知を行う
	a ： ジョブが異常終了したとき
	b ： ジョブが開始したとき
	e ： ジョブが終了したとき
#PBS -M	メールの通知先アドレスを指定する
#PBS -v	環境変数の指定(setenvではなくこちらを使うことを推奨する)
#PBS -T	MPI 実行時に指定
	mpisx ： MPI/SX 利用時
	intmpi ： IntelMPI 利用時
#PBS -b	使用するノード数

必須！

ジョブクラス一覧(SX-ACE)

使用する計算機、リソースはジョブクラスで指定
NQSIIオプション「#PBS -q」の後に続けて記述

ジョブクラス	利用可能 経過時間	利用可能 最大Core数	利用可能 メモリ	同時利用可能 ノード数
ACE	120時間	1024Core (4Core×256ノード)	1.5TB (60GB×256ノード)	256ノード
DBG	20分	32Core (4Core×8ノード)	480GB (60GB×8ノード)	8ノード

ジョブクラス一覧(VCC)

ジョブクラス	利用可能経過時間	利用可能最大Core数	利用可能メモリ	同時利用可能ノード数
VCC	120時間	640Core (20Core×32ノード)	1920GB (60GB×32ノード)	32ノード
	336時間	40Core (20Core×2ノード)	120GB (60GB×2ノード)	2ノード
V1C+	120時間	28Core (28Core×1ノード)	60GB (60GB×1ノード)	1ノード (増設ノードで実行)
V1C-hybrid	120時間	20Core (20Core×1ノード)	60GB (60GB×1ノード)	1ノード (通常or増設ノードで実行)
GVC (GPU利用)	120時間	180Core (20Core×9ノード)	540GB (60GB×9ノード)	9ノード

ジョブクラス一覧(OCTOPUS)

ジョブクラス	利用可能 経過時間	利用可能 CPU数	利用可能 メモリ	同時利用 可能ノード数
OCTOPUS	120時間	3,072Core (24Core×128ノード)	24,576GB (192GB×128ノード)	128ノード
OCTPHI	120時間	2,048Core (64Core×32ノード)	6,144GB (192GB×32ノード)	32ノード
OCTMEM	120時間	256Core (128Core×2ノード)	12TB (6TB×2ノード)	2ノード

計算機に実行させる処理の記述

ファイルやディレクトリの実行・操作を記述

記述方法はシェルスクリプト

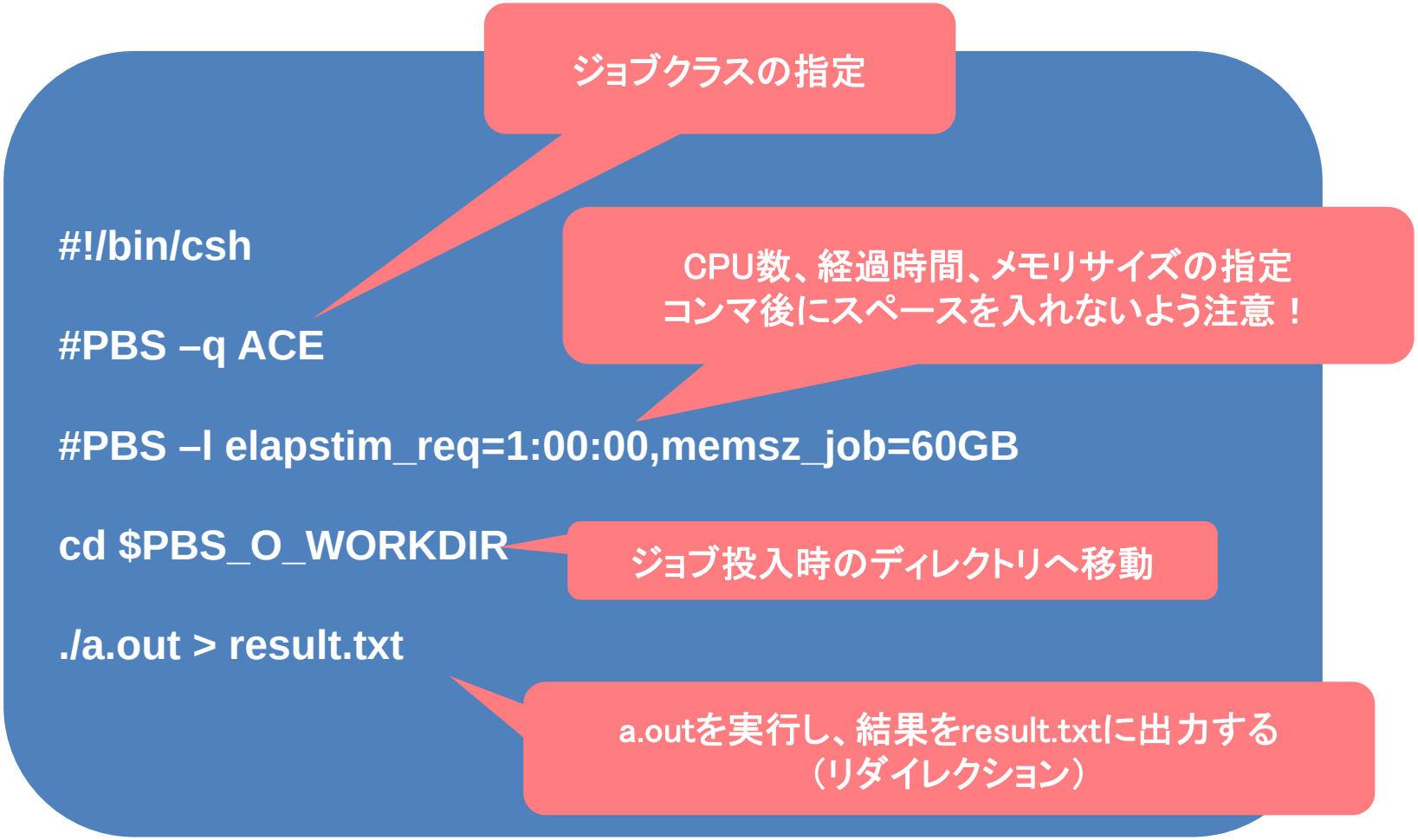
よく使用するNQSII 用の環境変数

$PBS_O_WORKDIR : ジョブ投入時のディレクトリが設定される

標準出力／標準エラー出力の容量制限
⇒ 100MB以上出力したい場合はリダイレクション(>)

処理の記述の最終行に改行を入れること！
⇒ 未入力の場合、その行のコマンドが実行されない

ジョブスクリプト解説


ジョブクラスの指定
#!/bin/csh
#PBS –q ACE
CPU数、経過時間、メモリサイズの指定
コンマ後にスペースを入れないよう注意！
#PBS –l elapstim_req=1:00:00,memsz_job=60GB
cd $PBS_O_WORKDIR
ジョブ投入時のディレクトリへ移動
./a.out > result.txt
a.outを実行し、結果をresult.txtに出力する
（リダイレクション）

演習2(ジョブスクリプト)

1. 演習用スクリプトを取得してください

(例)$ cp /sc/cmc/apl/kousyu/nyumon/sample.nqs ~/

2. sample.nqsを元にSX-ACE用のジョブスクリプトを作成してください

(例) $ cp sample.nqs sx.nqs

$ emacs sx.nqs -nw

ジョブクラスはDBGを使用してください

本日のプログラム

I. システムのご紹介

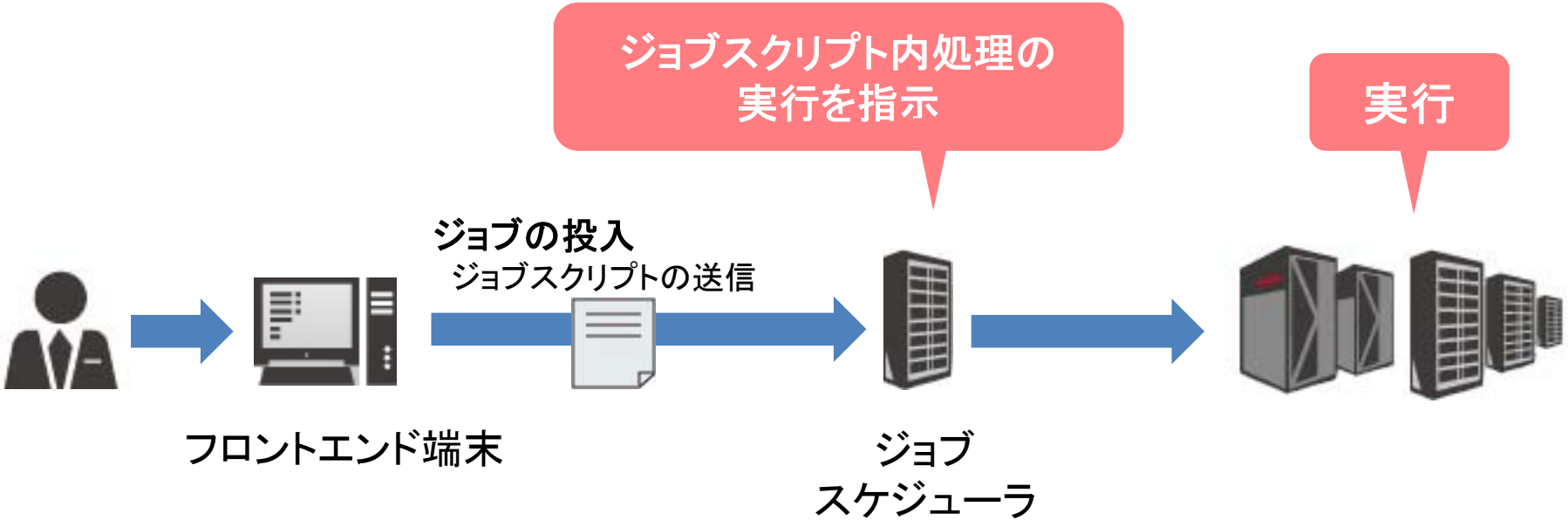
II. 利用方法の解説・実習

- i. システムへの接続
- ii. プログラムの作成・コンパイル
- iii. ジョブスクリプトの作成
- iv. ジョブスクリプトの投入

III. 利用を希望する方へ

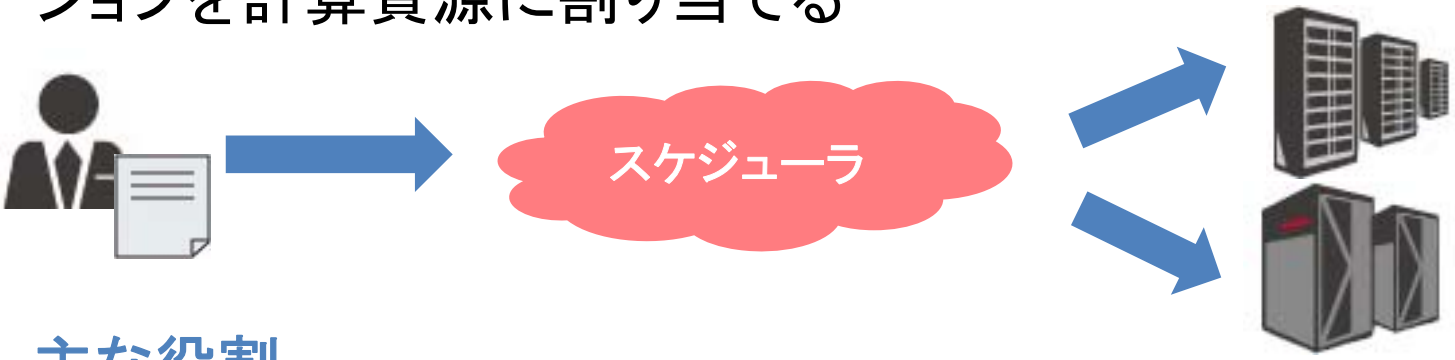
実行までの流れ

ジョブスクリプトは**ジョブスケジューラ**が受け付ける
ジョブスケジューラが各計算機にジョブの実行を指示



スケジューラとは

あらかじめ管理者によって設定された資源割当ポリシーに従い、
ジョブを計算資源に割り当てる



主な役割

クラスタを構成する計算機(ノード)の静的情報※を把握

※ディスク容量、メモリ容量、CPU性能、etc

ノード毎の資源使用率を定期的に監視、管理

ユーザより実行したいジョブ要求を受信

ジョブを実行するのに適切なノードを選定

ジョブ実行に伴う入出力データのファイル転送

スケジューラとは

当センターではバックフィル型を採用

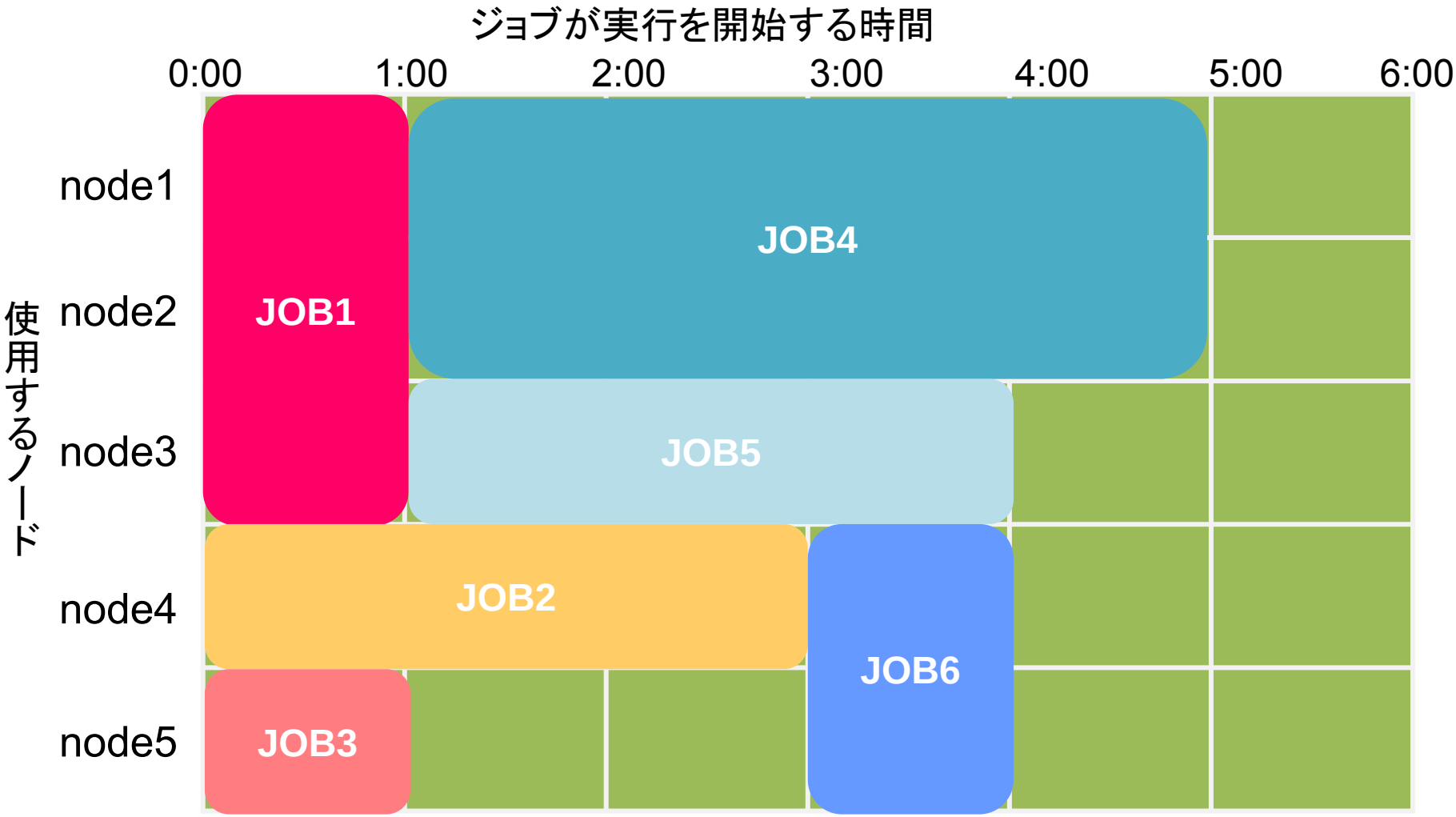
特徴

ジョブの実行開始時間のマップを作成する

マップに載れば、実行開始時間と経過時間が保障される

実行中は指定したリソースを占有して割当てる

スケジューラのイメージ



ジョブの投入方法

フロントエンド端末からジョブを投入

コマンド

$ qsub [ジョブスクリプトファイル]

（参考）特殊な投入方法

リクエスト連携：順番通りにジョブを実行したい場合に利用

$ qsub [JobScript1] [JobScript2] ・・・

※ 順番無く複数のジョブを同時に投入する場合は
上記のようにしないよう注意

投入済みジョブの確認方法

ジョブの状態を確認することが可能

コマンド

```
$ qstat
```

実行結果

RequestID	ReqName	UserName	Queue	STT	Memory	CPU	Elapse
12345.cmc	nqs-test	a61234	ACE	RUN	8.72G	830.66	208

ジョブの状態

待ち状態では「QUE」 実行が始まると「RUN」となる。

実行時間

CPU：実際にジョブが消費した時間
複数CPU指定の場合は、全CPUを累積表示

Elapse：ジョブが実行されてからの経過時間

投入済みジョブの確認方法

ジョブの予約状況の確認することが可能

コマンド

```
$ sstat
```

実行結果

RequestID	ReqName	UserName	Queue	Pri	STT	PlannedStartTime
12345.cmc	nqs-test	a61234	ACE	-1.5684/ -1.5684	ASG	2015-06-16 00:01:23

状態監視

実行時刻が決まると「ASG」表示になる。

混雑具合や優先度により、「実行時間の決定」までの待ち時間が異なるが、一旦実行時間が決定されるとその時刻にジョブ実行が始まる。

実行開始時刻

システムメンテナンスやトラブル時は
再スケジュールされることをご了承ください。

投入済みジョブの操作方法

ジョブのキャンセル

コマンド

```
$  qdel [RequestID]
```

実行結果

```
$ qdel 12345.cmc
Request 12345.cmc was deleted.
```

実行結果の確認方法

実行結果や実行エラーは指定しない限り「標準出力」となる

標準出力は**ジョブスクリプト名.oリクエストID**
標準エラー出力は**ジョブスクリプト名.eリクエストID**
というファイル名で自動出力される

catやlessコマンドでファイルの内容を出力し確認

```
$ cat nqs.o12345
```

※リダイレクション（./a.out > result.txt）を使った場合は、そちらも確認

意図通りの結果が表示されていれば計算は成功

演習3（ジョブスクリプトの投入）

1. 作成したジョブスクリプトを使用してジョブを投入
   $ qsub sx.nqs

2. 投入したジョブの状態を確認
   $ sstat
   $ qstat

3. 結果ファイルの確認
   $ cat sx.nqs.o12345
   $ cat sx.nqs.e12345

早く終わった方はVCCにも
ジョブを投入してみましょう

より高度な利用に向けて

利用の参考になるWebページ

サイバーメディアセンター 大規模計算機システム Webページ
http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/

利用方法
http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/

FAQ
http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/faq/

お問い合わせ
http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/support/contact/auto_form/

研究成果
http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/researchlist/

より高度な利用に向けて

本日以降に実施予定の講習会

講習会名	日時	場所
SX-ACE　高速化技法の基礎	9月11日(水) 13:30 - 17:30	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階中会議室
並列コンピュータ高速化技法の基礎 （OCTOPUS,VCC向け）	9月12日(木) 13:30 - 16:30	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階中会議室
並列プログラミング入門(MPI)	9月19日(木) 10:00 - 16:30	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階中会議室

本日のプログラム

I. システムのご紹介
II. 利用方法の解説・実習
    i. システムへの接続
    ii. プログラムの作成・コンパイル
    iii. ジョブスクリプトの作成
    iv. ジョブスクリプトの投入
III. 利用を希望する方へ

利用を希望する方へ

本センターの大規模計算機システムは
どなたでも**利用可能**です！

大学院生　教員　研究者

大阪大学　他大学　民間企業

利用負担金が必要になります

利用負担金

SX-ACE

共有利用

SX-ACE

占有利用

VCC

共有利用

VCC

占有利用

OCTOPUS

共有利用

ディスク
容量追加
オプション
(1TB単位)

SX-ACE、VCC利用者の方は500GB
OCTOPUSの利用者の方は1TB
無償で利用可能です

計算機の提供方法

共有利用

「ノード時間」,単位で
ノードを利用

利用者全員で一定数のノードを共有

大規模なノード間並列を試せる
「待ち時間」が発生する

占有利用

「年度/月」単位で
ノードを利用

他の利用者のグループとノードを共有しない

大規模なノード間並列は試し難い
「待ち時間」が発生しない

「ノード時間」とは

ノード時間 ＝
　計算に使用するノード数 × 計算時間(単位:時間)

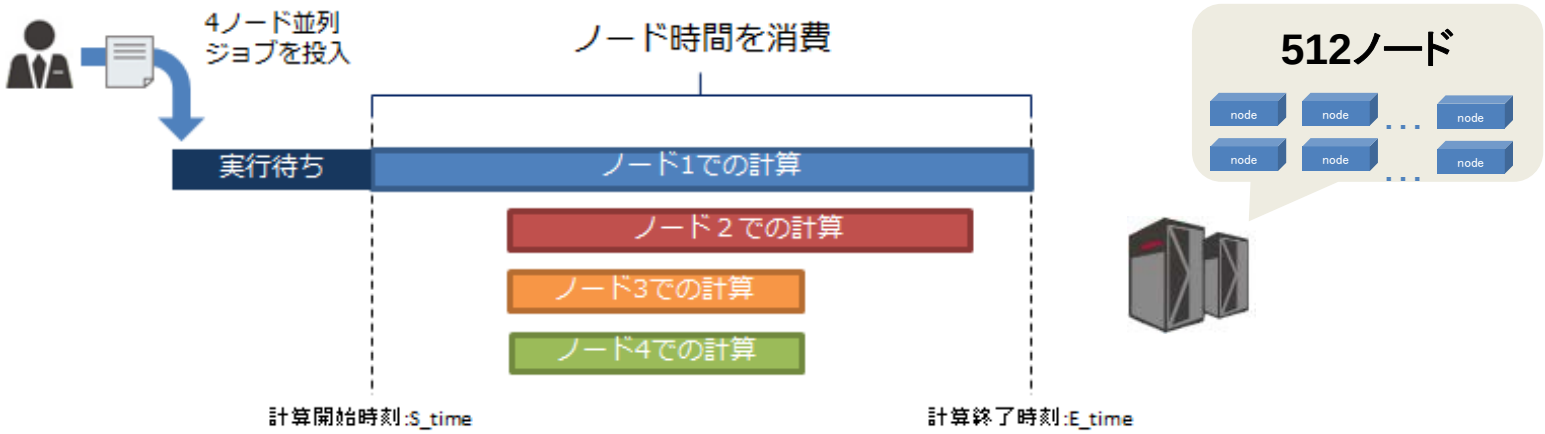
（例）

1ノードで3時間の計算	→	3ノード時間消費
30ノードで5時間の計算	→	150ノード時間消費
100ノードで1時間の計算	→	100ノード時間消費
1ノードで100時間の計算	→	100ノード時間消費

「ノード時間」の注意点

ノード内で使用するコアを限定しても、ノード時間は変わりません

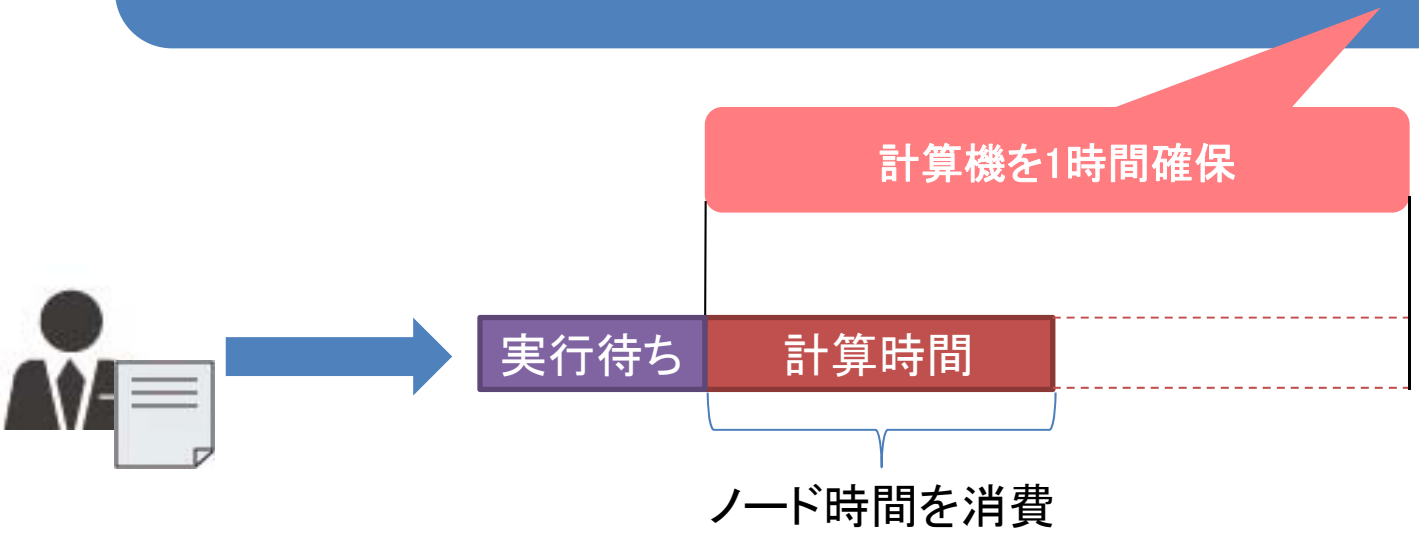
「ノード時間」の注意点



ノード時間は4ノード × (計算終了時間 - 計算開始時間)です

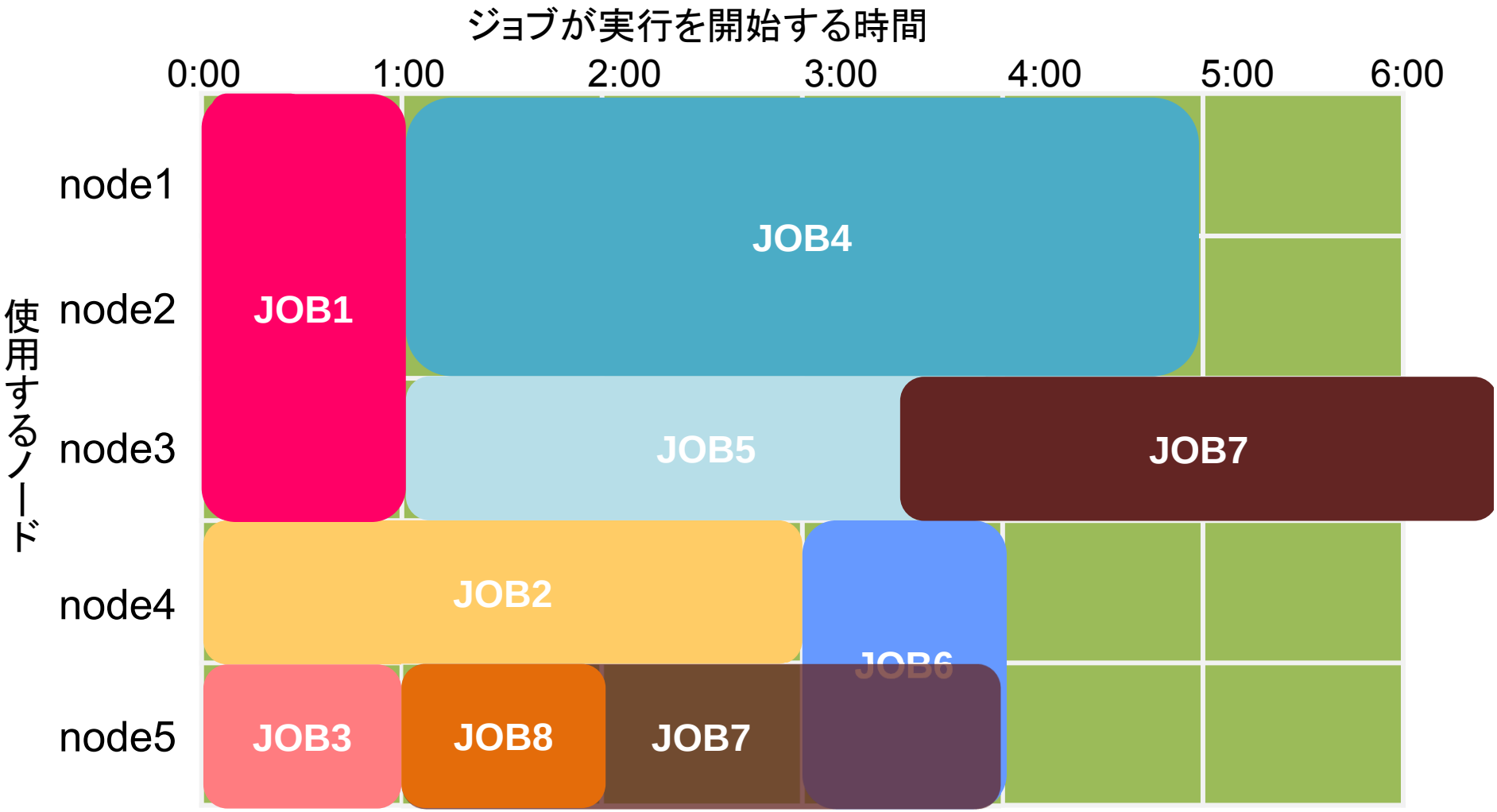
「ノード時間」の注意点

```
#!/bin/csh
#PBS -q DBG
#PBS -l memsz_job=1GB,elapstim_req=1:00:00
```



消費するノード時間は、実際かかった計算時間のみです

スケジューラのイメージ



「OCTOPUSポイント」とは

「OCTOPUS」への申請で全てのノードを自由に
使用可能とすることを目的に導入された制度です。

「OCTOPUSポイント」とは

OCTOPUSポイントの消費量は
以下の計算式から算出されます

使用したノード時間 × 消費係数 × 季節係数

「消費係数」について

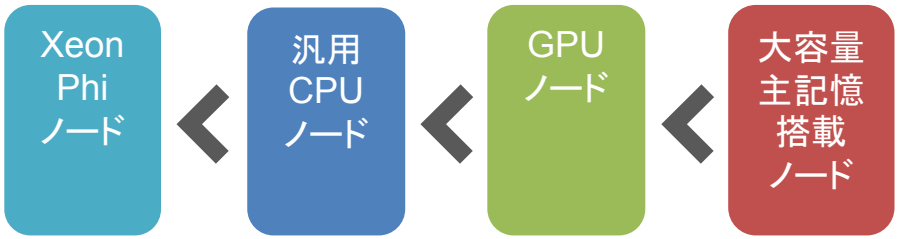
使用したノード時間 × 消費係数 × 季節係数

消費係数

各ノード群の消費電力を元に設定

ノード群	消費係数
CPUノード	0.0520
GPUノード	0.2173
Xeon Phiノード	0.0418
大容量主記憶搭載ノード	0.3703

同じノード時間を使用しても、
OCTOPUSポイントの消費量は異なる



「季節係数」について

使用したノード時間 × 消費係数 × 季節係数

季節係数

前年度の利用率を元に
0を超える1 以下の値を設定

ノード群	4～6月	7～9月	10～12月	1～3月
CPUノード	1			
GPUノード	1			
Xeon Phiノード	0.5	0.7	1	1
大容量主記憶搭載ノード	0.8	0.8	1	1

(例)

2018年度4月～6月の
Xeon Phiノード群の利用率が30%程度

2019年度4月～6月の
Xeon Phiノード群の季節係数を0.5に設定

「OCTOPUS」ポイントとは

消費OCTOPUSポイント =
使用ノード時間 × 消費係数 × 季節係数

（例）

・CPUノードを10ノード並列実行で3時間使用（季節係数：1）

10 × 3 × 0.0520 × 1 = 1.560 → **1.56ポイント消費**

・GPUノードを10ノード並列実行で3時間使用（季節係数：1）

10 × 3 × 0.2137 × 1 = 6.519 → **6.519ポイント消費**

「OCTOPUS」ポイントとは

消費OCTOPUSポイント =
使用ノード時間 × 消費係数 × 季節係数

（例）

・Xeon Phiノードを10ノード並列実行で3時間使用（季節係数：1）

10 × 3 × 0.0418 × 1 = 1.254 → **1.254ポイント消費**

・Xeon Phiノードを10ノード並列実行で3時間使用（季節係数：0.5）

10 × 3 × 0.0418 × 0.5 = 6.519 → **0.627ポイント消費**

まずは試用制度をお試しください

3カ月間 以下の資源をご提供　**無料**

SX-ACE

共有利用

500 ノード時間
+ ディスク 500GB

VCC

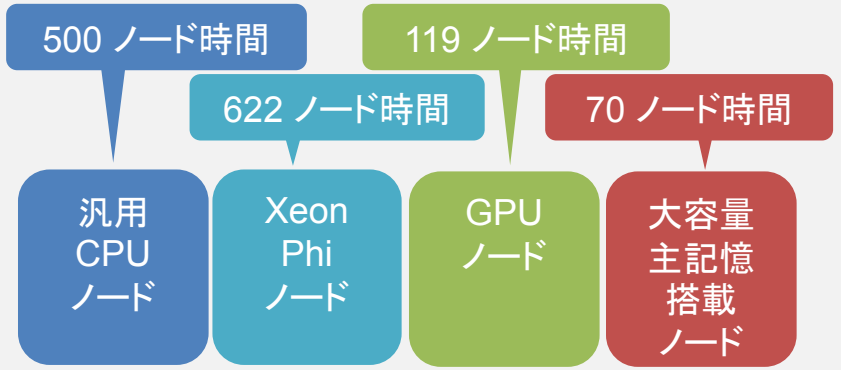
共有利用

500 ノード時間
+ ディスク 500GB

OCTOPUS

共有利用

26 OCTOPUSポイント
+ ディスク 1TB



※季節係数が1の場合

利用可能なアプリケーション

AVS/Express *
IDL *
VisIt

（フロントエンド端末で提供）

Chainer
TensorFlow
Caffe
Theano
Torch
GAMESS

（OCTOPUSでのみ提供）

Gaussian09,16
GROMACS
LAMMPS
OpenFOAM
Relion

（VCC,OCTOPUSで提供）

利用申請方法

大規模計算機システムの利用申請は
随時受け付け中です！

申請は年度単位(4月から翌年3月まで)です
申請はWEBフォームから受け付けています

詳細は下記のページをご覧ください！

一般利用(学術利用)　http://osku.jp/u094
試用制度による利用　http://osku.jp/e029

大規模計算機システムに関するご質問は

大阪大学 情報推進部 情報基盤課
研究系システム班
system@cmc.osaka-u.ac.jp

までお気軽にご連絡ください！