[解 説]

スーパーコンピュータ AOBA での MATLAB の並列処理

— MATLAB の並列処理を大規模にスケールアウト —

齊藤 甲次朗 加藤 順之 MathWorks Japan

1. はじめに

東北大学サイバーサイエンスセンター様が提供するスーパーコンピュータ AOBA では、サブシス テム AOBA-B において MATLAB®のデスクトップ環境(MATLAB、Parallel Computing Toolbox[™]など) やクラスター環境(MATLAB Parallel Server[™])が用意されています。MATLAB の並列処理を AOBA の リソースを活用して大規模にスケールアウトすることができます。

2. AOBA-B での MATLAB の並列処理のワークフロー

AOBA-B で MATLAB の並列処理を実行するためのワークフローは以下のとおりです。

まず AOBA-B のログインサーバに SSH でログインし、フロントエンドサーバ(front1 または front2)に SSH ログインします。フロントエンドサーバで MATLAB を起動し、並列処理を実行しま す。並列処理の設定や処理内容に応じて、NEC Networking Queueing System V (NQSV)と連携を行 うスクリプトが qsub などのコマンドを自動生成します。NQSV でジョブの割当がされると計算サ ーバで MATLAB Parallel Server のワーカーが起動し、MATLAB の並列処理を実行します。並列処 理の結果は NQSV の出力ファイルとして保存され、フロントエンドサーバの MATLAB から変数の読 み取りを行うと結果が MATLAB のワークスペースへと転送されます。



これを図示したものが図1です。

図 1 AOBA-B での MATLAB の並列処理ワークフロー

3.1 連携の概要

ここでは MATLAB および MATLAB Parallel Server と NQSV との連携について説明します。MATLAB と NQSV は連携スクリプトとクラスタープロファイルによって連携されています。それぞれの役割 については表 1 のとおりです。

表 1 MATLAB と NQSV の連携

用語	役割
クラスタープロファイル	MATLAB の並列処理をどの環境で実行させるか
	の設定を定義します。
連携スクリプト	MATLAB の並列処理のコマンド実行時に、クラス
	タープロファイルの設定や要求するタスクに応
	じて、NQSV のコマンドを動的に生成します。

連携スクリプトの詳細は図2のとおりです。



3.2 連携スクリプトの使い方

3.2.1 連携スクリプトのコピー

サイバーサイエンスセンター様にて、連携スクリプトのマスターを管理しています。 /mnt/stfs/ap/aoba-b_shared のディレクトリを任意の場所にコピーしてください。

3.2.2 設定ファイルの編集

フロントエンドサーバにログインし、テキストエディタを使って連携スクリプトの設定ファイル(mdcs.rc)を編集します。設定ファイルのそれぞれの項目は表 2 のとおりです。

項目	デフォルト値	備考
Туре	local	AOBA-B ではフロントエンドサーバの MATLAB のマシンから直接 NQS のコマンドを実行しま すので、デフォルトの「local」にします。
NumWorkers	128	使用する MATLAB Parallel Server の最大ワー カー数
ClusterMatlabRoot	R2020b:/mnt/stfs/ap/M ATLAB,R2020a:/mnt/stf s/ap/MATLAB.R2020a	MATLAB Parallel Server がインストールされ たディレクトリのパス。複数バージョンがあ る場合は、「<バージョン名>:インストールデ ィレクトリ」をカンマでつなげます。
ClusterHost	無し	AOBA-B の場合、使用しません。
LocalJobStorageLocation	無し	MATLAB クライアントのジョブを格納するパス です。デフォルトの空のままにします。
RemoteJobStorageLocatio /uhom		MATLAB から投げられたジョブやデータのファ イルを格納するクラスター側のパスです。ユ ーザーusera がクライアントホスト front1 か らジョブを実行した場合、 RemoteJobStorageLocation = /uhome/と設定 すると、 /uhome/usera/MdcsDataLocation/aoba-b/fro nt1/R2020b/local にジョブファイルなどが作成されます。
JobStorageLocationOnPC	無し	AOBA-Bの場合、使用しません。

表 2 連携スクリプトの設定ファイル(mdcs.rc)

3.2.3 連携スクリプトの設定

フロントエンドサーバで MATLAB を起動し、連携スクリプトを MATLAB のカレントフォルダまた はパスが通っているところに置きます。例えば、連携スクリプトを/uhome/user1/matlab のディ レクトリに置いた場合、MATLAB から以下のコマンドでパスを追加できます。

>> addpath('/uhome/user1/matlab')

MATLAB から以下のコマンドを実行して連携スクリプトを設定します。

>> configCluster

これにより AOBA-B 用のクラスタープロファイルが作成されます。

3.2.4 クラスタープロファイルの確認

次に、設定されたクラスタープロファイルの確認を行います。MATLABの「並列」メニューから 「クラスタープロファイルの作成と管理」をクリックします。

レイアウト ・	・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・
_	. 既定のクラスターの選択 > . クラスターの検出
	クラスターの作成と管理
	ジョブの監視
	レイアウト ・

図 3 クラスタープロファイルの作成と管理をクリック

クラスタープロファイルの一覧に AOBA-B 用のクラスタープロファイル(例: aoba-b local R2020b)が既定として設定されていることを確認します。もし既定になっていなかったら「プロファイルの管理」から「既定の値として設定」をクリックします。

📣 クラスター プロ:	ファイル マネージャー								-		×
Q クラスター の検出(C)	ター ブロファイル クラ の追加 マ 作成	つう クラスターの作成 の の 作成 ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・ ・	- インポート(I)	グ 編集(E)	№ 複製(U)	 ✔ 名前の変更(R) ◆ 既定の値として設定(S) プロファイルの管理 	ビング エクスポート(X) マ	✓ 検証(V) 検証	 ♣ ライセンスとアラートの管理 ◆ クラウドの接続テスト ▲ Cloud Center クラウド 	(?) ヘルプ(F	H)
クラフ	スター プロファイル		aoba-b loca	I R20201	b				タイプ: Gene	eric (橿成	(方法)
		_	プロパティ 検問	E							
aoba-b local R2020b (原定の設定) このクラスターの説明 aoba-b local R2020b Descript ion				^							
local クライアントでジョブ データが保存されるフォルダー JobStorageLocation											
		クラスターで使用可能なワーカーの数 NumWorkers		128							
		-	各ワーカーで NumThread	使用する計 s	+ 算スレッドの数		1 (既定の設定)				

図 4 クラスタープロファイルを確認

3.2.5 クラスタープロファイルの変更

必要に応じてクラスタープロファイルの設定値を変更します。

クライアントおよびクラスターノードからジョブ保存場所にア	false				~
HasSharedFilesystem	既定値は true です				
スケジューラプラグイン					
スケジューラ ブラヴインのスクリブトを格納するフォルダー PluginScriptsLocation	ired\R2020b\aoba-b\matl	ab\IntegrationScripts\aoba	-b 1	��.	
ブラヴイン スクリプト用の追加プロパティ Additions.IProperties	名前	値	껲	4	
	NodeCount	1	數值	Y	^
	ProcsPerNode	64	數值	Y	
	ProjectCode		string	v	
	QueueName	lx	string	×	
	RemoteJobStorageLocat	/tmp/ksaito/MdcsDataL	string	~	
	RequestName		string	Y	~
		這力	0	前的	

図 5 必要に応じてクラスタープロファイルの設定を変更

クラスタープロファイルの項目と対応する NQSV のオプションについては表 3 及び表 4 のとお りです。

プロパティ名	説明	対応する NQSV の オプション	デフォルト値
JobStorageLocation	クライアントでジョブデータを		/uhome/ユーザー名
	保存するディレクトリ		/MdcsDataLocation/aoba-b
			/ホスト名/R2020b/local
NumWorkers	クラスターで使用可能なワーカ	—	128
	ーの数		
NumThreads	1 ワーカーあたりのスレッド数		1
			(推奨は1です)
ClusterMatlabRoot	MATLAB Parallel Server がイン	—	R2020b の場合:
	ストールされているディレクト		/mnt/stfs/ap/MATLAB
	IJ		R2020a の場合:
			/mnt/stfs/ap/MATLAB.R202
			0a
LicenceNumber	MATLAB Parallel Server オンラ	—	無し
	インライセンスを使用する場合		(オンラインライセンスを
	のライセンス番号		使用しないため)
RequiresOnlineLicens	MATLAB Parallel Server のオン	—	False
ing	ラインライセンスを使用するか		(オンラインライセンスを
	どうか		使用しないため)
OperatingSystem	クラスター計算ノードの OS		unix
HasSharedFilesystem	MATLAB クライアントのマシンと	—	true
	クラスターの計算ノードとでフ		
	ァイル共有サーバがあるかどう		
	カ		
PluginScriptsLocatio	連携スクリプトを格納している	—	configCluster.m がある
n	ディレクトリ		IntegratonScripts のディ
			レクトリ
AddtionalProperties	クラスターに渡す追加のプロパ		—
	ティ		
AddtionalSubmitArg	追加で渡す qsub の引数		
S			
DebugMessagesTurne	デバッグ用フラグ	—	false
dOn			
EmailAddress	ジョブ投入時、終了時にメール通	-M <メールアド	無し
	知をする場合のメール受信先	レス〉-m b -m e	
IdentityFile	SSH の鍵ファイルのパス。鍵ファ	—	無し
	イルを使用する場合は		
	UseIdentityFile を true にして		
	ください。		

表 3 クラスタープロファイルの項目と対応する NQSV のオプション

プロパティ名	説明	対応する NQSV の オプション	デフォルト値
MaxElapseTime	最大経過時間	-l elapstim_req	24:00:00
NodeCount	ノード数	-b	1
ProcsPerNode	1ノードあたりのプロセス数	(-b のノード数	128
		算出に使用)	
QueueName	キュー名	-q	lx
RequestName	リクエスト名	-N	無し
RequestRerun	リクエストのリランの有無	-r y / -r n	false
UseIdentityFile	SSH をパスワードではなく鍵フ		false
	ァイルでログインするオプショ		
	ン。 true にした場合は		
	IndentityFile にファイルパス		
	を指定します。		
AutoAttachFiles	MATLAB Parallel Server のクラ		true
	スターに依存関係のあるファイ		
	ルを自動的に送信するかの設定		
AttachedFiles	MATLAB Parallel Server のクラ	—	無し
	スターに送信するファイルまた		
	はディレクトリ		
AdditionalPaths	ワーカーの検索パスに追加する	—	無し
	フォルダ		
NumWorkerRange	ジョブを実行するワーカー数の	—	[1 inf]
	範囲		
CaptureDiary	コマンドウィンドウへ出力を返	—	false
	す設定		
EnvironmentVariables	MATLAB クライアントから MATLAB	—	無し
	Parallel Server のワーカーにコ		
	ピーする環境変数		

表 4 クラスタープロファイルの項目と対応する NQSV のオプション(続き)

また、MATLAB Parallel Server を AOBA-B で実行する際の、その他の NQSV オプションは以下の とおりです。

表 5 その他の NQSV のオプション

NQSV のオプション	備考
-T intmpi	複数ノードをまたぐ処理の場合、MPI の実行環境を
	Intel MPI に指定しています。

3.2.6 MATLAB の並列処理の設定の変更

次に、MATLABの並列処理の設定変更を行います。MATLABのメニュー画面から「基本設定」をクリックします。



図 6 MATLAB の「基本設定」をクリック

複数ノードで並列処理できるようにするため、「Parallel Computing Toolbox」のメニューで推 奨される並列プールでのワーカー数を、デフォルトの12から、200などの大きな値に変更します。

基本設定			-		×
コマンド ウィンドウ	^	Parallel Computing Toolbox 基本設定			
比較		n=n n			
現在のフォルター		/////			
エテイダー/テバッカー		既定のクラスター: aoba-b local R2020b ~			
Figure のコピー テンフレート	_				
ノオント		クラスターフロフア1ルのYF成と編集は、 <u>クラスターフロフア1ル マネージヤー</u> で美行できます。			
一般					
MAI ノア1ル					
確認ダイアログ		並列プール			
ソース管理		推奨される並列プールでのワーカー数:200			
Java E=7 XE9					
GOIDE		メモ:使用可能なワーカー数やコア数がこれより少ない場合、並列プールを構成する実際のワーカー数;	が少なくな	る可能性	が
イルノ キーデード		あります。			
イーハート プロジェクト					
		☑ parfor などの並列キーワードが実行された場合に並列プールを自動的に作成する (まだ存在してい)	ない場合)	
シールバー					
Web		√ 次の指定時間以降もアイドル状態になっている並列プールをシャットダウンして削除する。			
ロークスペース		30 4			
Simulink					
Computer Vision Toolbox					
Image Acquisition Toolbox					
Image Processing Toolbox					
Instrument Control Toolbox					
MATLAB Compiler					
MATLAB Report Generator					
Parallel Computing Toolbox					
Simscape					
Simulink 3D Animation					
Simulink Control Design	~				
-				A 11 -	4
		OK キャンセル 適用		~JV.	/

図 7 推奨される並列プールでのワーカー数を変更

4. MATLAB での動作確認

4.1 クラスタープロファイルの検証

設定したクラスタープロファイルの検証を行います。AOBA-Bのクラスタープロファイルを選択 していることを確認し、検証項目5つ目の「並列プールテスト」だけチェックを外します。そし て右下の「検証」ボタンをクリックして検証を実行します。

◆ クラスターブロファイルマネージャー Q	
クラスター プロファイル	aoba-b local R2020b 9/1方: Generic (進成方法) プロ/守ィ 特証
1.「aoba-b local R2020b」のクラスター プロファイルを選択	R% 27-92 説明 Synopsing Syn
	3. 「検証」をクリック
	検証(5) レポートの表示(0)

図 8 クラスタープロファイルの検証を実行

「プールジョブテスト」までの4つの検証をパスすれば問題ありません。

4.2 オフロードジョブのテスト

次に batch でのオフロード処理をテストします。parallelServerSample.m というファイルを作り、以下のコードを記載します。

parallelServerSample.m

MATLAB のコマンドウィンドウから、batch コマンドを使用してジョブを実行します。Pool オプ ションに使用するワーカー数から1を引いた値を入れます。

>> job1 = batch('parallelServerSample', 'Pool', 3, 'AutoAddClientPath',false);

ジョブ投入後、MATLABの「並列」メニューから「ジョブの監視」をクリックします。



図 9 ジョブの監視をクリック

クラスターサーバに投入したジョブの一覧が表示されます。処理が進むに連れ「状態」欄が 「queued」、「running」、「finished」と遷移します。

	ジョブ モ	EIØ-			💿 🗾 Iディタ・	getCommon	SubmitArgs.m
I	לםל	ァイルの選択:	(既定の設定)				
	ID 2	ユーザー名	送信時間 Fri Jan 15 19:06:47 JST 2021	終了時間	97) 4	状態 queued	説明 バッチ ジョブの実行スクリプト
l							
I	_						
	最終	更新: Fri Jan 15 19:02:	19 JST 2021				ê

図 10 ジョブの一覧とステータス表示

ステータスが finished になったら、ジョブモニターで右クリック「変数の読み込み」をクリッ クすることでクラスターサーバに投げた処理結果を取得できます。または、以下のコマンドで処 理結果を取得することもできます。

- >> wait(job1);
- >> fetchOutputs(job1);

5. 参考情報

5.1 用語の説明

このドキュメントの用語の意味は以下のとおりです。

用語	意味
ワーカー	MATLAB Parallel Server の並列処理を実行する MATLAB プロセスの こと。
インタラクティブジョブ	MATLAB の並列処理のうち、MATLAB クライアントとワーカーとの間 に通信を張って処理を行う並列処理のこと。処理中は MATLAB クラ イアントを起動したままにする必要があります。
オフロードジョブ	MATLAB の並列処理のうち、MATLAB クライアントとワーカーとの間 で通信を張らずに処理を行う並列処理のこと。ジョブ投入後は MATLAB クライアントを停止させてもワーカー内で処理が継続され ます。

表 6 用語集

5.2 Web ページ

参考になる Web ページのリンクは以下のとおりです。

• MATLAB および Simulink による並列計算

https://jp.mathworks.com/solutions/parallel-computing.html

- Parallel Computing Toolbox について https://jp.mathworks.com/products/parallel-computing.html
- MATLAB Parallel Server について
 https://jp.mathworks.com/products/matlab-parallel-server.html
- Parallel Computing Toolbox 入門
 <u>https://jp.mathworks.com/help/parallel-computing/getting-started-with-parallel-computing-toolbox.html</u>

・ MATLAB のバッチ処理のサンプル

https://jp.mathworks.com/help/parallel-computing/batch-processing.html

5.3 問い合わせ窓口

AOBA-B での MATLAB および MATLAB Parallel Server についての問い合わせ先は以下のとおりです。

• MathWorks サポート窓口

https://jp.mathworks.com/support/contact_us.html

・ コミュニティ Q&A サイト

https://jp.mathworks.com/matlabcentral/answers/