

[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 甲次郎 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 (NQS)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。NQS 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 NQS 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。

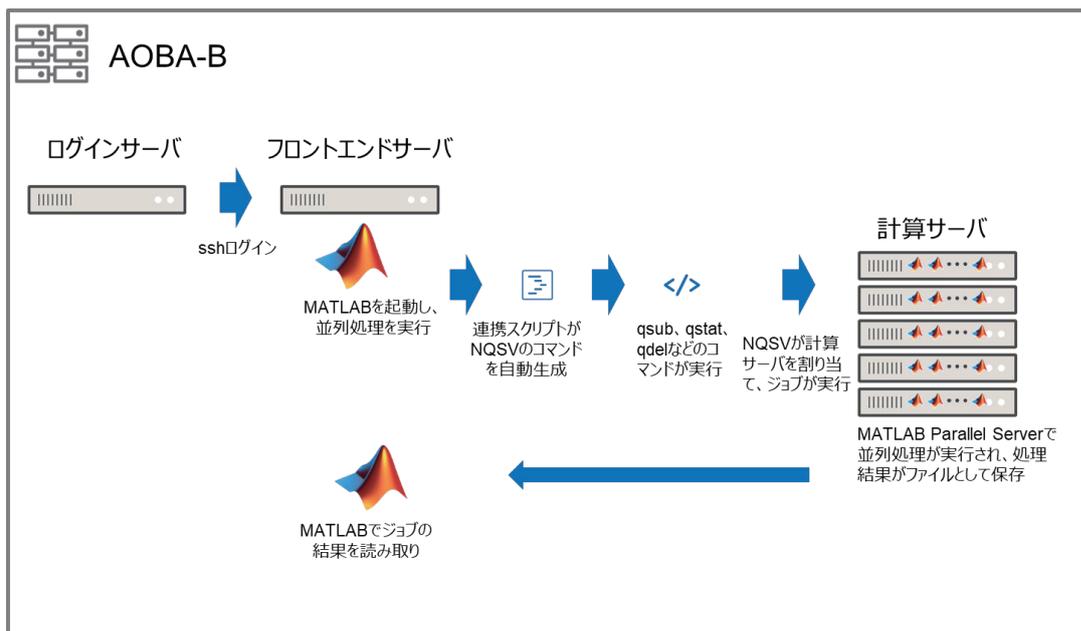


図 1 AOBA-B での MATLAB の並列処理ワークフロー

3. MATLAB Parallel Server と NQSV の連携

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。

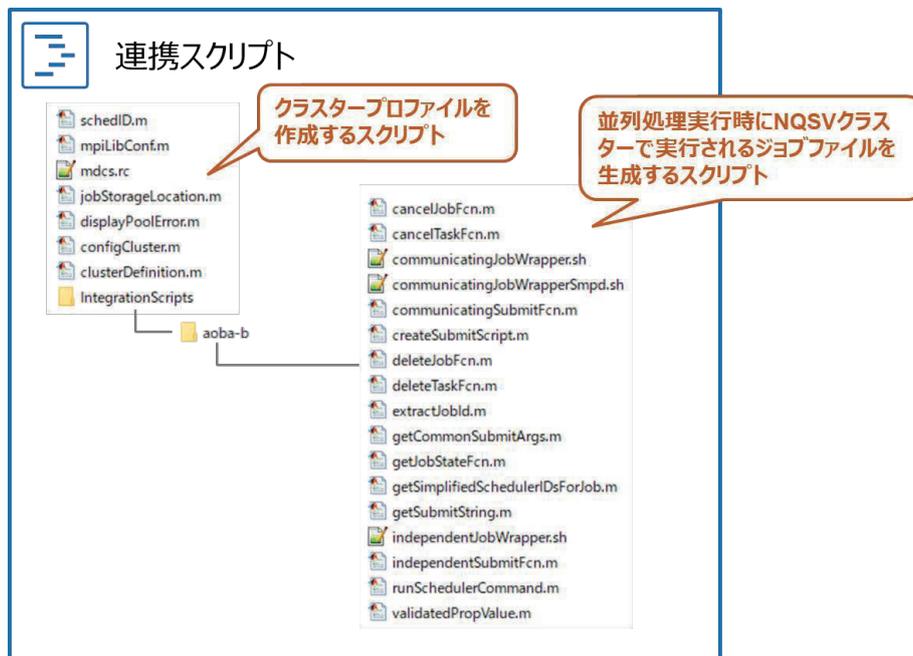


図 2 NQSV との連携スクリプト

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。

表 2 連携スクリプトの設定ファイル(mdcs.rc)

項目	デフォルト値	備考
Type	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/MATLAB, R2020a:/mnt/stfs/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。
RemoteJobStorageLocation	/uhome/	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/front1/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。

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 クラスタプロフィールの確認

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



図 3 クラスタプロフィールの作成と管理をクリック

クラスタプロフィールの一覧に AOBA-B 用のクラスタプロフィール(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「プロフィールの管理」から「既定の値として設定」をクリックします。



図 4 クラスタプロフィールを確認

3.2.5 クラスタプロフィールの変更

必要に応じてクラスタプロフィールの設定値を変更します。

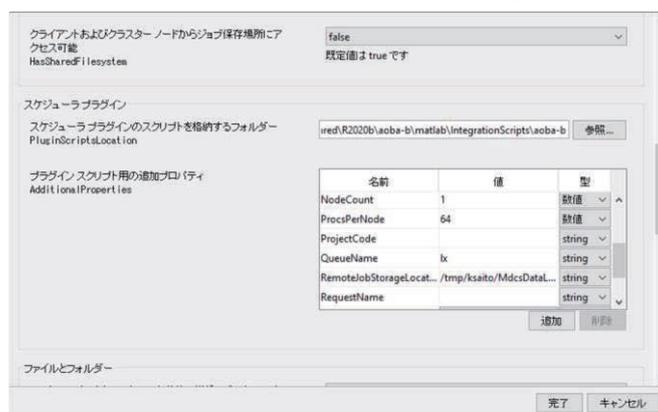


図 5 必要に応じてクラスタプロフィールの設定を変更

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。

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
JobStorageLocation	クライアントでジョブデータを保存するディレクトリ	—	/uhome/ユーザー名 /MdcDataLocation/aoba-b /ホスト名/R2020b/local
NumWorkers	クラスターで使用可能なワーカーの数	—	128
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 がインストールされているディレクトリ	—	R2020b の場合： /mnt/stfs/ap/MATLAB R2020a の場合： /mnt/stfs/ap/MATLAB. R2020a
LicenceNumber	MATLAB Parallel Server オンラインライセンスを使用する場合のライセンス番号	—	無し (オンラインライセンスを使用しないため)
RequiresOnlineLicensing	MATLAB Parallel Server のオンラインライセンスを使用するかどうか	—	False (オンラインライセンスを使用しないため)
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か	—	true
PluginScriptsLocation	連携スクリプトを格納しているディレクトリ	—	configCluster.m がある IntegratonScripts のディレクトリ
AdditionalProperties	クラスターに渡す追加のプロパティ	—	—
AdditionalSubmitArguments	追加で渡す qsub の引数	—	—
DebugMessagesTurnedOn	デバッグ用フラグ	—	false
EmailAddress	ジョブ投入時、終了時にメール通知をする場合のメール受信先	-M <メールアドレス> -m b -m e	無し
IdentityFile	SSH の鍵ファイルのパス。鍵ファイルを使用する場合は UseIdentityFile を true にしてください。	—	無し

表 4 クラスタプロフィールの項目と対応する NQSV のオプション (続き)

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 のノード数算出に使用)	128
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ァイルでログインするオプション。true にした場合は IdentityFile にファイルパスを指定します。	—	false
AutoAttachFiles	MATLAB Parallel Server のクラ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	—	true
AttachedFiles	MATLAB Parallel Server のクラスターに送信するファイルまたはディレクトリ	—	無し
AdditionalPaths	ワーカーの検索パスに追加するフォルダ	—	無し
NumWorkerRange	ジョブを実行するワーカー数の範囲	—	[1 inf]
CaptureDiary	コマンドウィンドウへ出力を返す設定	—	false
EnvironmentVariables	MATLAB クライアントから MATLAB Parallel Server のワーカーにコピーする環境変数	—	無し

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。

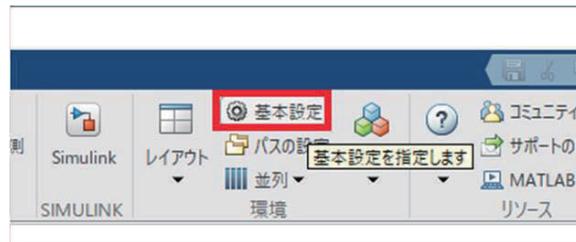


図 6 MATLAB の「基本設定」をクリック

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。

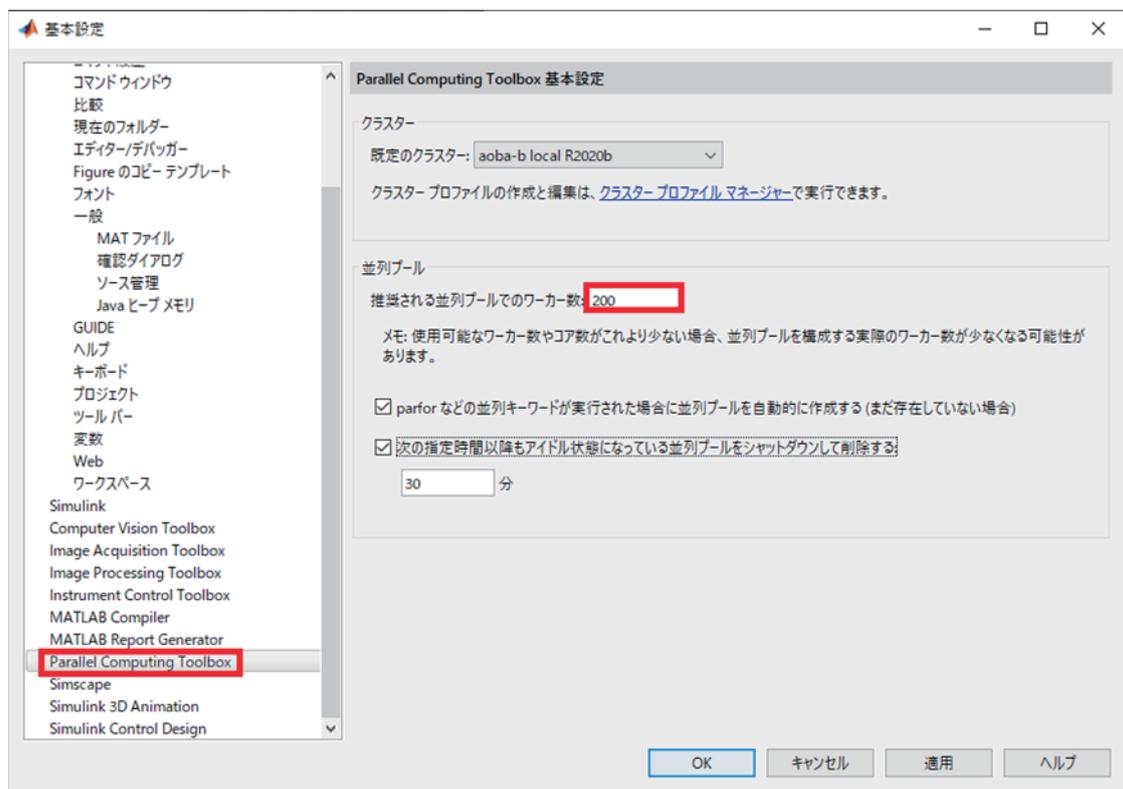


図 7 推奨される並列プールでのワーカー数を変更

4. MATLAB での動作確認

4.1 クラスタプロフィールの検証

設定したクラスタプロフィールの検証を行います。AOBA-B のクラスタプロフィー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。

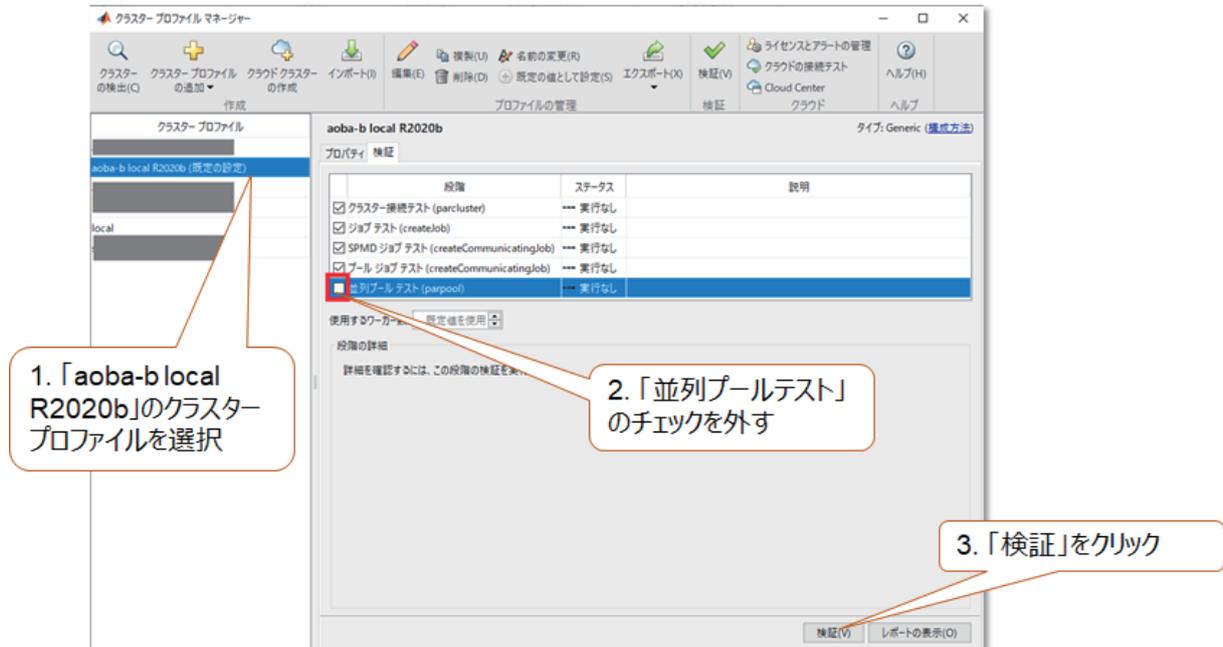


図 8 クラスタプロフィールの検証を実行

「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

```
n = 200;
A = 500;
a = zeros(n);
parfor i = 1:n
    a(i) = max(abs(eig(rand(A)))));
end
```

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。

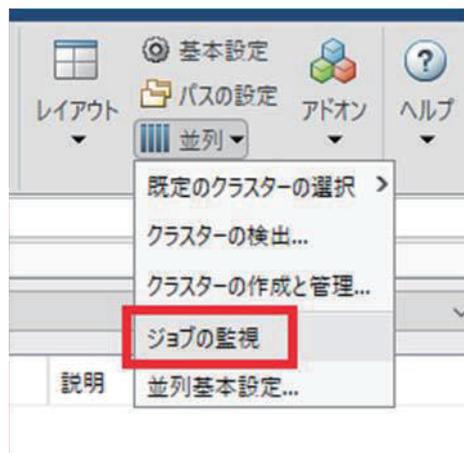


図 9 ジョブの監視をクリック

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。

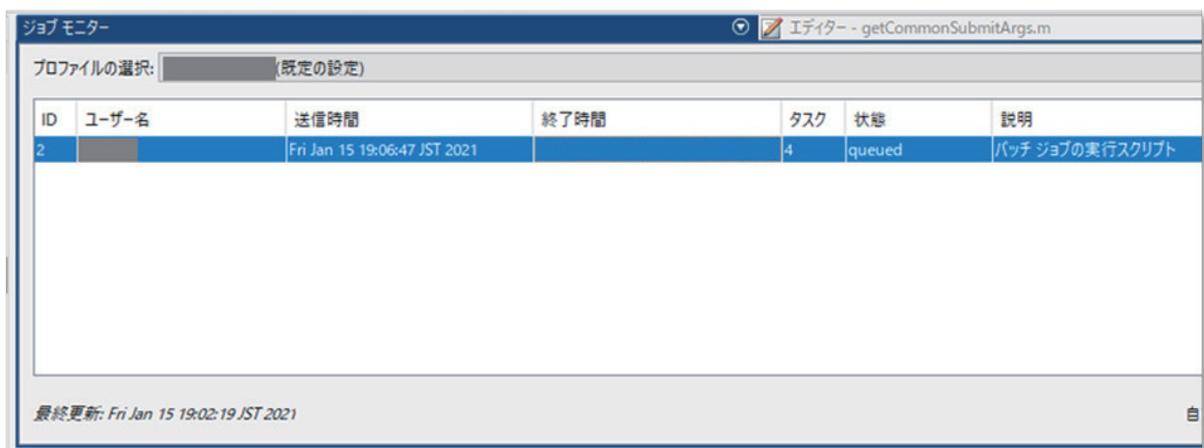


図 10 ジョブの一覧とステータス表示

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。

表 6 用語集

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。

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
<https://jp.mathworks.com/help/parallel-computing/getting-started-with-parallel-computing-toolbox.html>

- 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/>