東北大学サイバーサイエンスセンター講習会
はじめてのスパコン
～ スーパーコンピュータAOBAの紹介と利用法入門 ～

2021年5月28日

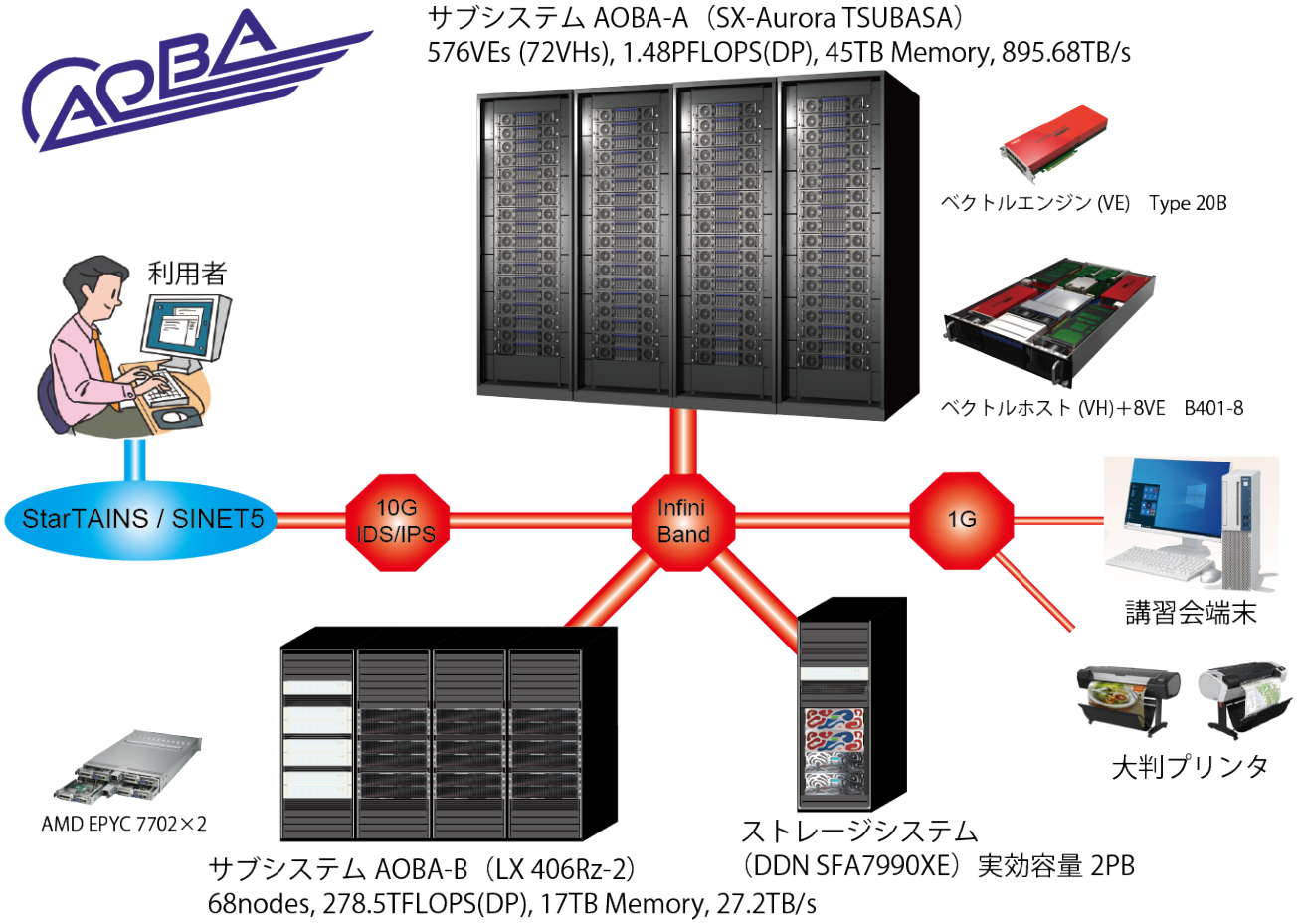
東北大学 サイバーサイエンスセンター
東北大学 情報部 情報基盤課

内容

- スーパーコンピュータAOBAの紹介
- スーパーコンピュータとは？
- サイバーサイエンスセンターでの応用例
- 計算機の種類
- AOBAシステムの特徴
- AOBA-AとAOBA-Bどちらを使うか？
- 利用者向けウェブサイトとポータルサイト
- プログラム開発の流れ（実習）
- 並列実行とは
- プログラムのコンパイル方法
- ジョブの実行方法と実行キュー
- 負担金制度と利用申請方法
- 利用者講習会・利用相談・高速化支援

スーパーコンピュータAOBAの紹介

- サブシステムAOBA-A　：SX-Aurora TSUBASA
- サブシステムAOBA-B　：LX 406Rz-2
- ストレージシステム　：DDN SFA7990XE（2PB）
- 利用者向けサーバー　：ログインサーバ，フロントエンドサーバ，ファイル転送サーバ
- センター内施設　：講習会端末，大判プリンタ（A0判）



- スーパーコンピュータ（Supercomputer、略称：スパコン）とは、内部の演算処理速度がその時代の一般的なコンピュータより非常に高速な計算機（コンピュータ）のこと。

- HPCサーバ(High Performance Computing Server)と呼ばれることもある。

スーパーコンピュータとは？（2/3）

- top500 (www.top500.org)
- 世界中の高性能なコンピュータシステムのランキングサイト
- 年2回（6月と11月）発表
- LINPACKベンチマーク(HPL)によるランキング
- 実アプリケーションとの性能乖離も指摘される

Flop/s (Floating point number Operations Per Second)

- １秒間に浮動少数点演算が何回できるかを表す性能指標
- CPUの性能を表す際に用いられる

TOP500 LIST - NOVEMBER 2020

R_{max} and R_{peak} values are in TFlops. For more details about other fields, check the TOP500 description.

R_{peak} values are calculated using the advertised clock rate of the CPU. For the efficiency of the systems you should take into account the Turbo CPU clock rate where it applies.

1-100 | 101-200 | 201-300 | 301-400 | 401-500 | →

Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	Rpeak (TFlop/s)	Power (kW)
1	**Supercomputer Fugaku** - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442,010.0	537,212.0	29,899
2	**Summit** - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	2,414,592	148,600.0	200,794.9	10,096
3	**Sierra** - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM / NVIDIA / Mellanox DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,480	94,640.0	125,712.0	7,438

スーパーコンピュータとは？（3/3）

- HPCGベンチマーク(http://hpcg-benchmark.org/)
- 実アプリケーションの挙動に近い新しい指標
- 密行列、疎行列ベクトル計算をしており、実アプリケーションに近い多様な計算が含まれる

HPCG LIST - NOVEMBER 2020

R_{max} and **R_{peak}** values are in TFlops. For more details about other fields, check the TOP500 description.

R_{peak} values are calculated using the advertised clock rate of the CPU. For the efficiency of the systems you should take into account the Turbo CPU clock rate where it applies.

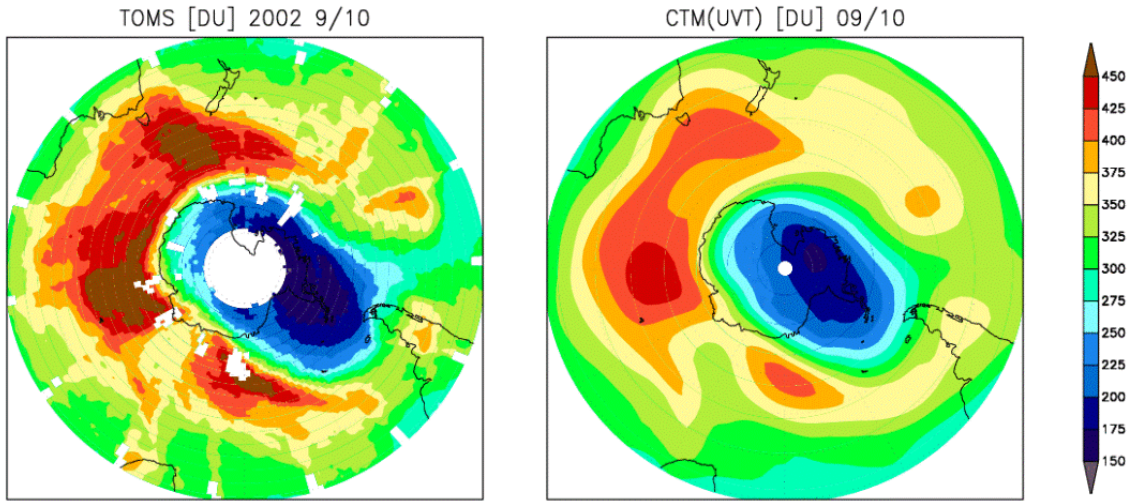
Rank	TOP500 Rank	System	Cores	Rmax (TFlop/s)	HPCG (TFlop/s)
1	1	**Supercomputer Fugaku** - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442,010.0	16004.50
2	2	**Summit** - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.07GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	2,414,592	148,600.0	2925.75
3	3	**Sierra** - IBM Power System AC922, IBM POWER9 22C 3.1GHz, NVIDIA Volta GV100, Dual-rail Mellanox EDR Infiniband, IBM / NVIDIA / Mellanox DOE/NNSA/LLNL United States	1,572,480	94,640.0	1795.67

- 航空・宇宙
- 気象・地球環境
- 電磁解析
- 分子化学・分子設計
- 原子力・核融合
- ライフサイエンス
- 資源探索、軍事利用、金融　等

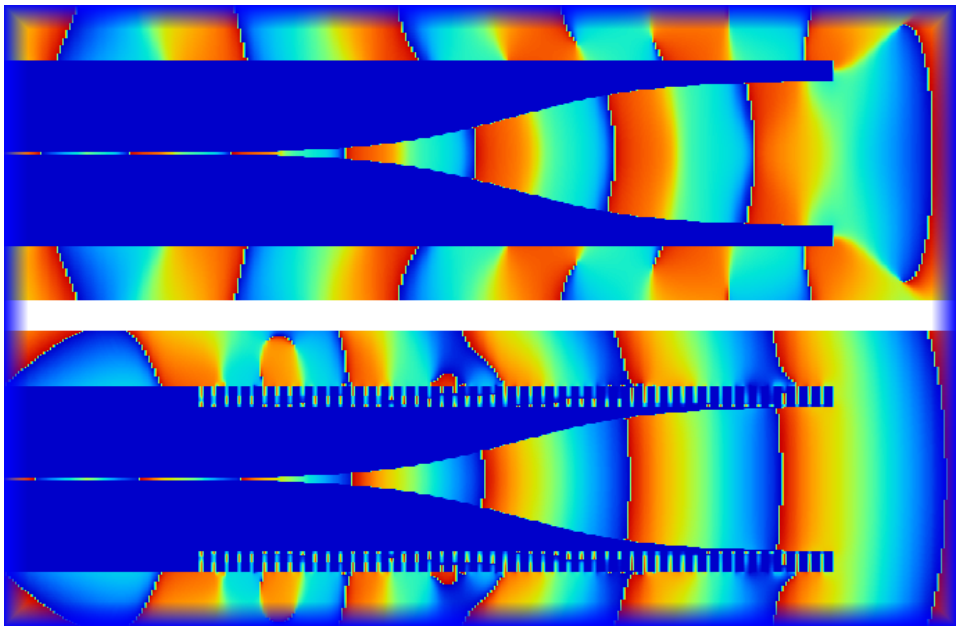
複雑な物理現象の数値シミュレーションに用いられる

サイバーサイエンスセンターでの応用例（1/4）

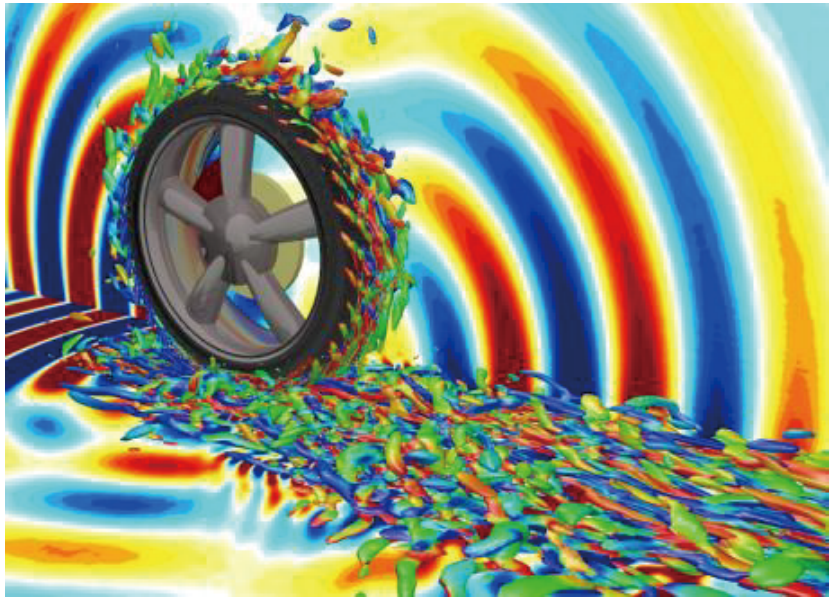
気象シミュレーション



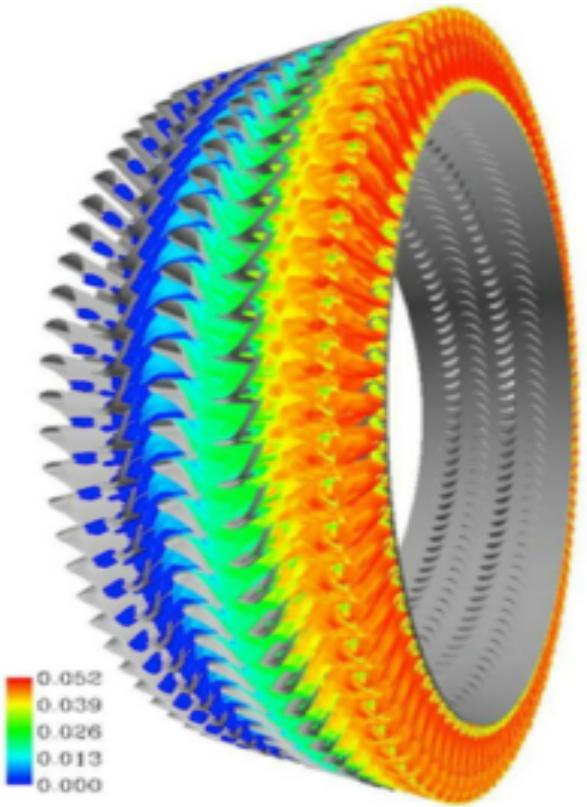
アンテナ開発



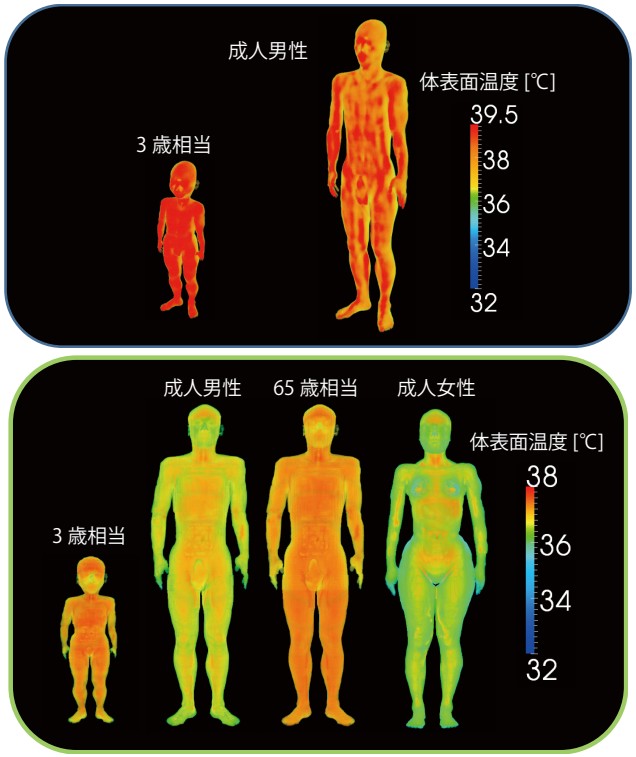
低騒音タイヤ開発



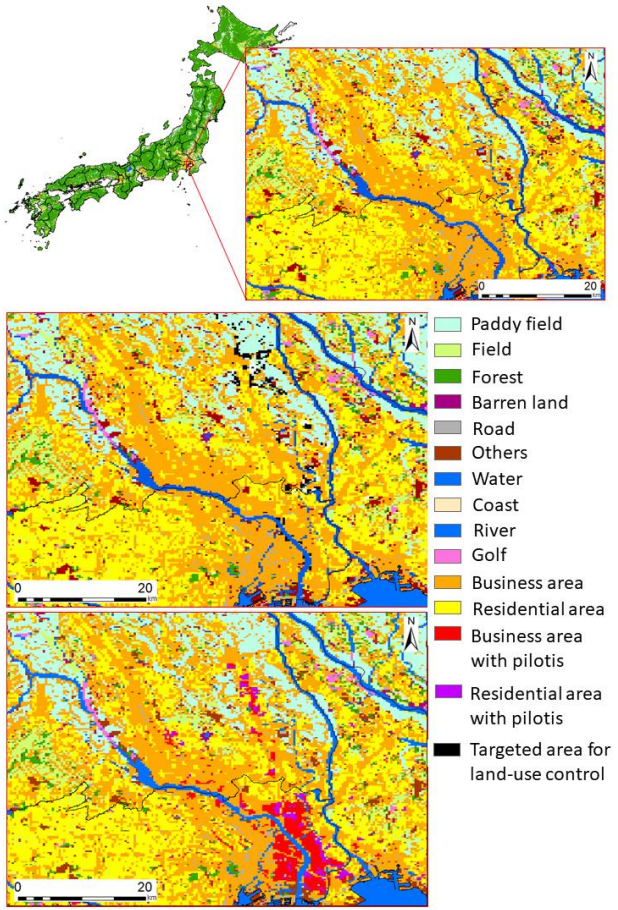
CO2削減 タービン設計



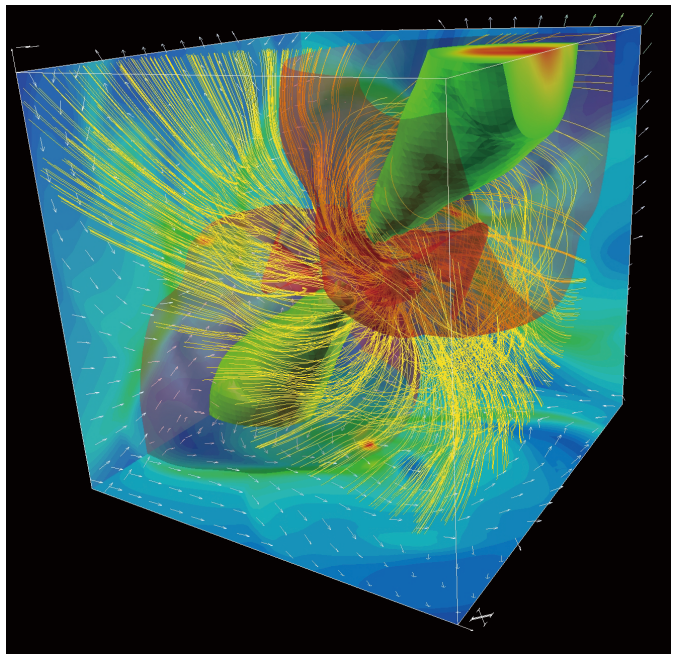
熱中症シミュレーション



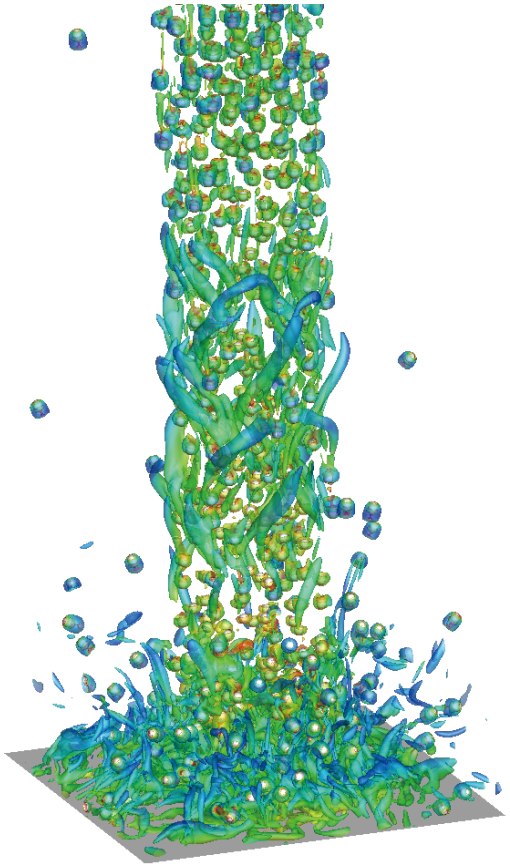
洪水被害予測シミュレーション



星と惑星形成の
大規模シミュレーション



大規模混相流解析



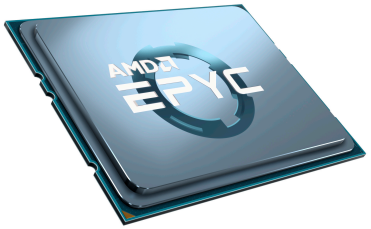
①プロセッサによる分類

a. ベクトル計算機

b. スカラ計算機

c. GPU(Graphics Processing Unit)

NEC SX-Aurora Type 20B
(AOBA-A)



AMD EPYC 7720
(AOBA-B)

②メモリ構成による分類

a. 共有メモリ型

b. 分散メモリ型

NVIDIA Tesla V100

①-a. ベクトル計算機

- ベクトル演算のための専用ハードウェアを持つプロセッサを搭載した計算機
- SXシリーズ（NEC）、地球シミュレータ（NEC）
- 1980年代から1990年代にかけて、スパコンと言えばベクトル計算機のことだった
- SX-Aurora TSUBASAはx86 CPUとの組み合わせが必要
- AOBA-Aに採用

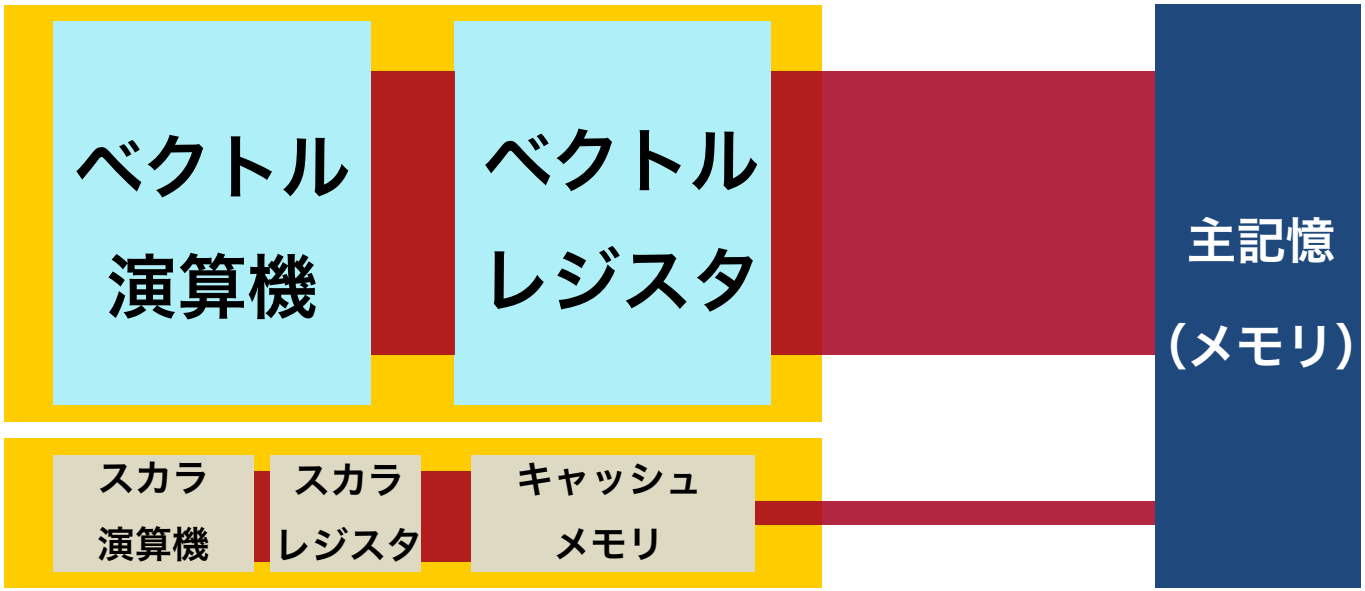
①-b. スカラ計算機

- 汎用プロセッサを搭載した計算機
- 汎用プロセッサは Xeon(Intel), EPYC(AMD), POWER(IBM), ARM(ARM)等、普及品化しているプロセッサ
- 1990年代中盤以降、安価な汎用プロセッサを複数搭載した並列計算機が主流となる
- HPCサーバ、PCクラスタ
- AOBA-Bに採用

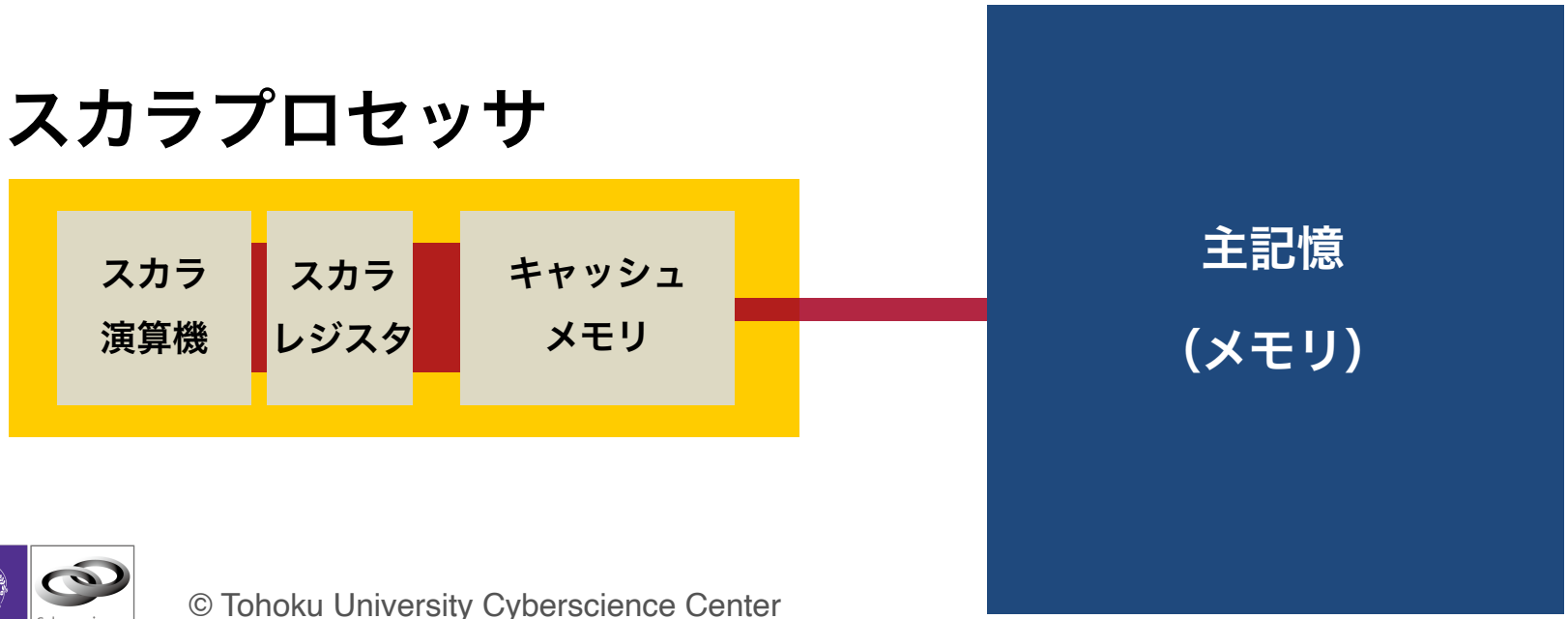
①-c. GPU

- コンピュータゲームに代表されるリアルタイム画像処理に特化した演算装置
- GPUのハードウェアを、より一般的な計算に活用
- Tesla(NVIDIA), Radeon(AMD)
- 映像出力端子を持たない専用製品や、深層学習ベースのAI向けに特化した演算器を搭載
- 汎用CPUとの組み合わせが必要

ベクトルプロセッサ

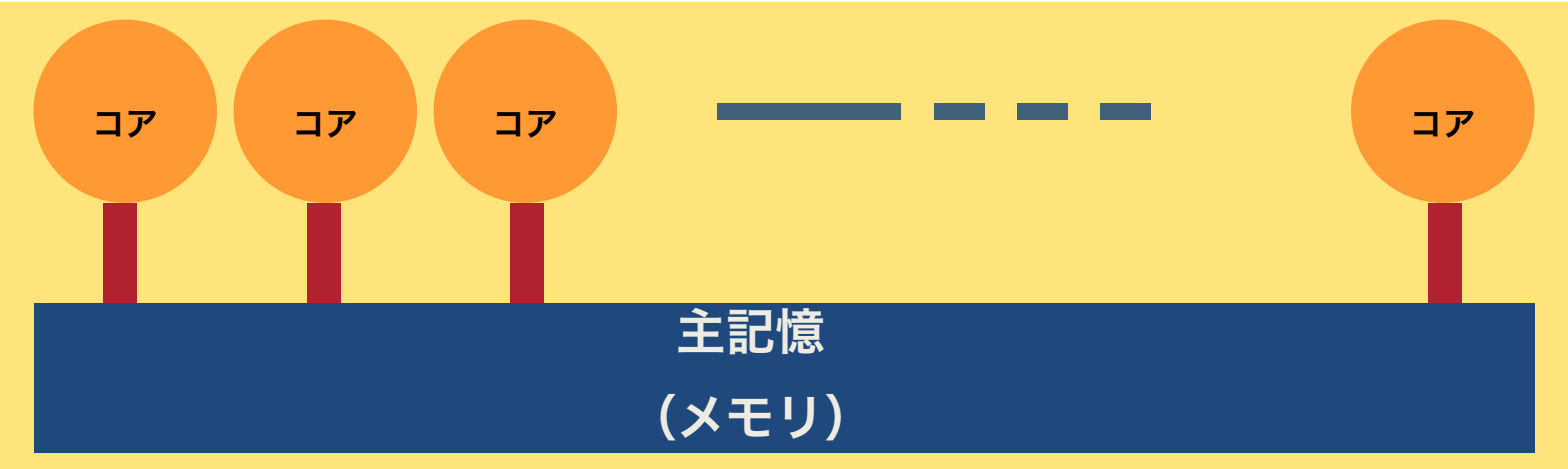


スカラプロセッサ



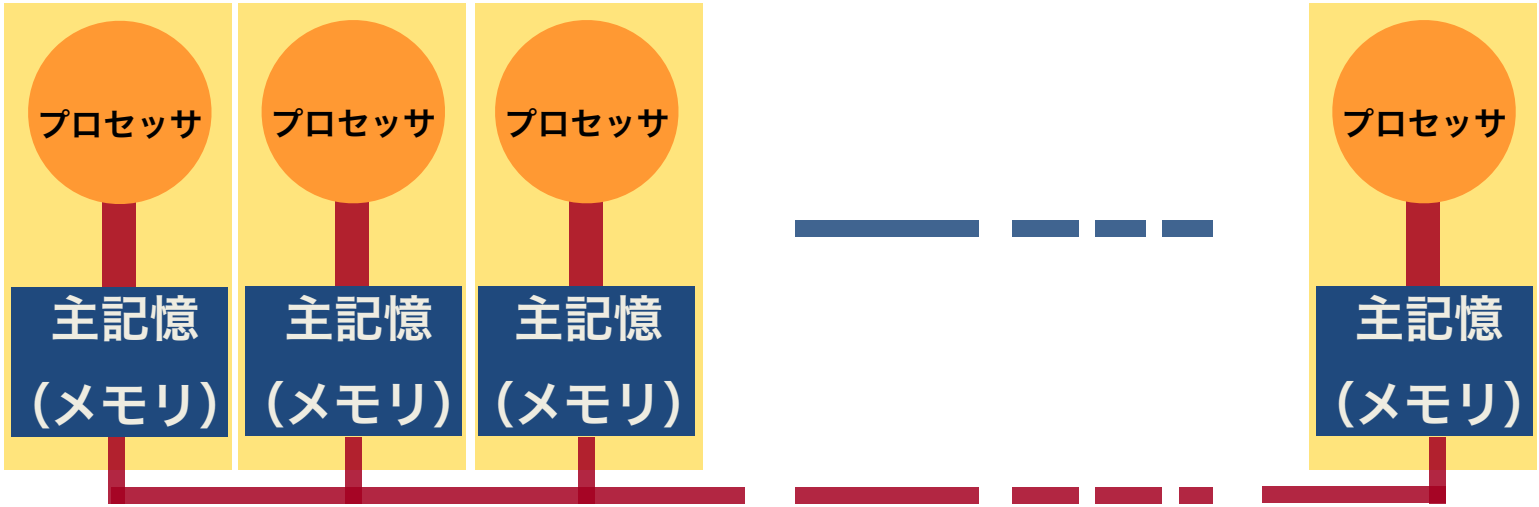
②-a. 共有メモリ型

- １つの物理メモリを複数のプロセッサで共有するタイプ（SMP：Symmetric Multiple Processor ）
- 自動並列化およびOpenMPによる並列化実行が可能
- MPI(Message Passing Interface)による並列化実行も可能
- AOBA-Aの各**VE内**並列、AOBA-Bの各**ノード内**並列



②-b. 分散メモリ型

- プロセッサごとにローカルな物理メモリを持ち、それらをInfiniBandなどのネットワークで複数接続するタイプ
- MPIにより並列実行する
- 自動並列化およびOpenMPによる並列化実行も同時利用が可能
- AOBA-Aの**複数VE**並列、AOBA-Bの**複数ノード**並列



サブシステムAOBA-A ：SX-Aurora TSUBASA【ハードウェア】

・ベクトルプロセッサ＋x86/Linuxアーキテクチャの構成

ベクトルエンジン（**VE**）は演算処理を行う

→ 本システムではType 20B を8個搭載

ベクトルホスト（**VH**）はOS処理，VE制御，I/O制御等を行う

→ 本システムでは EPYC 7402P を1個搭載

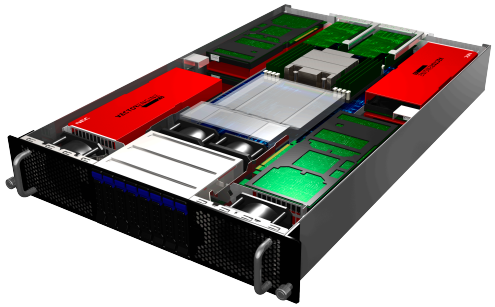
基本システム単位は 1**VH** ＋ 8**VE**

システム全体では 72**VH**＋576**VE**　最大利用は32VH+256VE

ノード間接続は InfiniBand HDR（200Gbps）×2

ベクトルエンジン（**VE**）
Type 20B

ベクトルホスト（**VH**）
AMD EPYC 7402P



1**VH**＋8**VE**
B401-8

・**VE**はSX-ACEを継承するベクトルアーキテクチャ

マルチコアベクトルプロセッサ（8コア）とHBM2メモリを搭載

ベクトル演算による高い演算性能：**VE**あたり 2.45TFLOPS（DP）4.91TFLOPS（SP）

コア間共有メモリ：**VE**あたり 48GB

高いメモリバンド幅：**VE**あたり 1.53TB/s

演算性能とデータ転送性能のバランス：0.65B/F

・**VH**のLinux OS環境とVEを連携した利用が可能

24コア 1.075TFLOPS（DP） 256GBメモリを搭載（ジョブは136GBまで利用可能）

【**VH**でプリ処理 → **VE**で演算処理 → **VH**でポスト処理】を1ジョブで完結するなどの利用が可能

サブシステムAOBA-A ：SX-Aurora TSUBASA【ソフトウェア】

・自動ベクトル化・自動並列化機能機能を備えた，Fortran/C/C++コンパイラを利用可能
　x86向けに開発されたFortran/C/C++ソースコードも，コンパイラがベクトル性能を引き出す
　SX-ACE向けに開発されたアプリケーションの移植もサポート
　MPIライブラリによる分散メモリ並列実行に対応
　GNU互換環境を装備（SX-ACE向けコンパイラからオプション，指示行に仕様の変更あり）

・ベクトルアーキテクチャに最適化された科学技術計算ライブラリ（Fortran/C）
　BLAS，FFTW，LAPACK，ScaLAPACKのインターフェースをそのまま利用可能
　ASLインタフェースも利用可能

・実行時性能解析ツールを利用可能
　PROGING，FTRACE，Ftrace Viewer

・AI分野への活用
　ミドルウェア「Frovedis」による統計的機械学習処理の高速化
　「TensorFlow」と「Python」の利用も可能

・一部の量子化学分野のアプリもインストール済
　VASP，Quantum Espressoを**VE**でも利用可能

サブシステムAOBA-B ：LX 406Rz-2【ハードウェア・ソフトウェア】

・x86/Linuxアーキテクチャ構成

1ノードにAMD EPYC 7702（64コア）を2個，256GBメモリを搭載

ノード性能は 4.096TFLOPS（DP）8.192TFLOPS（SP）409.6GB/s

システム全体では68ノード　最大利用は16ノード

ノード間接続は InfiniBand HDR（200Gbps）×1

AMD EPYC 7720

・AMDプロセッサに最適化された Fortran/C/C++コンパイラ，科学技術計算ライブラリを利用可能

AOCC (AMD Optimizing C/C++ Compiler)
AMD uProf, AMD Optimizing CPU Libraries
Open MPI

・AMDコンパイラ，GNUコンパイラ，Intelコンパイラが利用可能

AOCC (AMD Optimizing C/C++ Compiler, Fortran) , OpenMPI
GNU Compiler Collection, OpenMPI
Intel OneAPI ベース&HPCツールキット（ライセンス数限定）

LX 406Rz-2 4ノード

・Linux OSに対応したアプリを準備中

Gaussian16，GRRM17，Quantum Espresso，OpenFOAM

（利用者限定商用アプリ）Mathematica，MATLAB

他OSSなどもユーザ領域にインストール可能

AOBA-AとAOBA-Bのどちらを使うか？（1/2）　ハードウェア性能での比較

	AOBA-A (SX)	AOBA-B (LX)
利用**最小**単位	1VE	1ノード
コア数	8	**128**
理論演算性能 [TFLOPS]	2.45	**4.09**
メモリ容量 [GB]	48	**256**
コア性能 [GFLOPS]	**307**	32
メモリ転送性能 [TB/s]	**1.53**	0.40

	AOBA-A (SX)	AOBA-B (LX)
利用**最大**単位	256VE	16ノード
コア数	2,048	2,048
理論演算性能 [TFLOPS]	**627.2**	65.5
メモリ容量 [TB]	**12**	4

AOBA-Aを選択

・シングルコア実行のプログラム

・メモリ転送性能が律速になるプログラム

・MPIによる大規模並列を行う場合

AOBA-Bを選択

・ノード内並列化（OpenMP並列・自動並列）されているプログラム

・ノード内でメモリ容量を多く使うプログラム

AOBA-Aを選択

・SX-ACEで利用していたプログラム
・ベクトル化率が99.0%以上，平均ベクトル長が128以上のプログラム
　→ 実行時性能の取得方法と，さらなるベクトル高速化については利用相談をご利用下さい。
・お試しで使いたい
　→ IVEを1時間まで利用できる無料のキューがあります。（同時実行数1）

AOBA-Bを選択

・商用アプリ，OSSなどソースコードを改変しにくいプログラム
・ベクトル性能が出ないと分かっているプログラム
・AOBA-A向けにコンパイル出来ないプログラム
・Fortran/C/C++以外のコンパイラを使用するプログラム
・Gaussian16，GRRM17，MATLAB（バッチ処理），OpenFOAMを使う場合

両方で実行を試した後に選択

・AOBA-A，AOBA-Bの両方で実行できるアプリケーション（Quantum Espresso6.3のpw.x）

利用者向けウェブサイトとポータルサイト

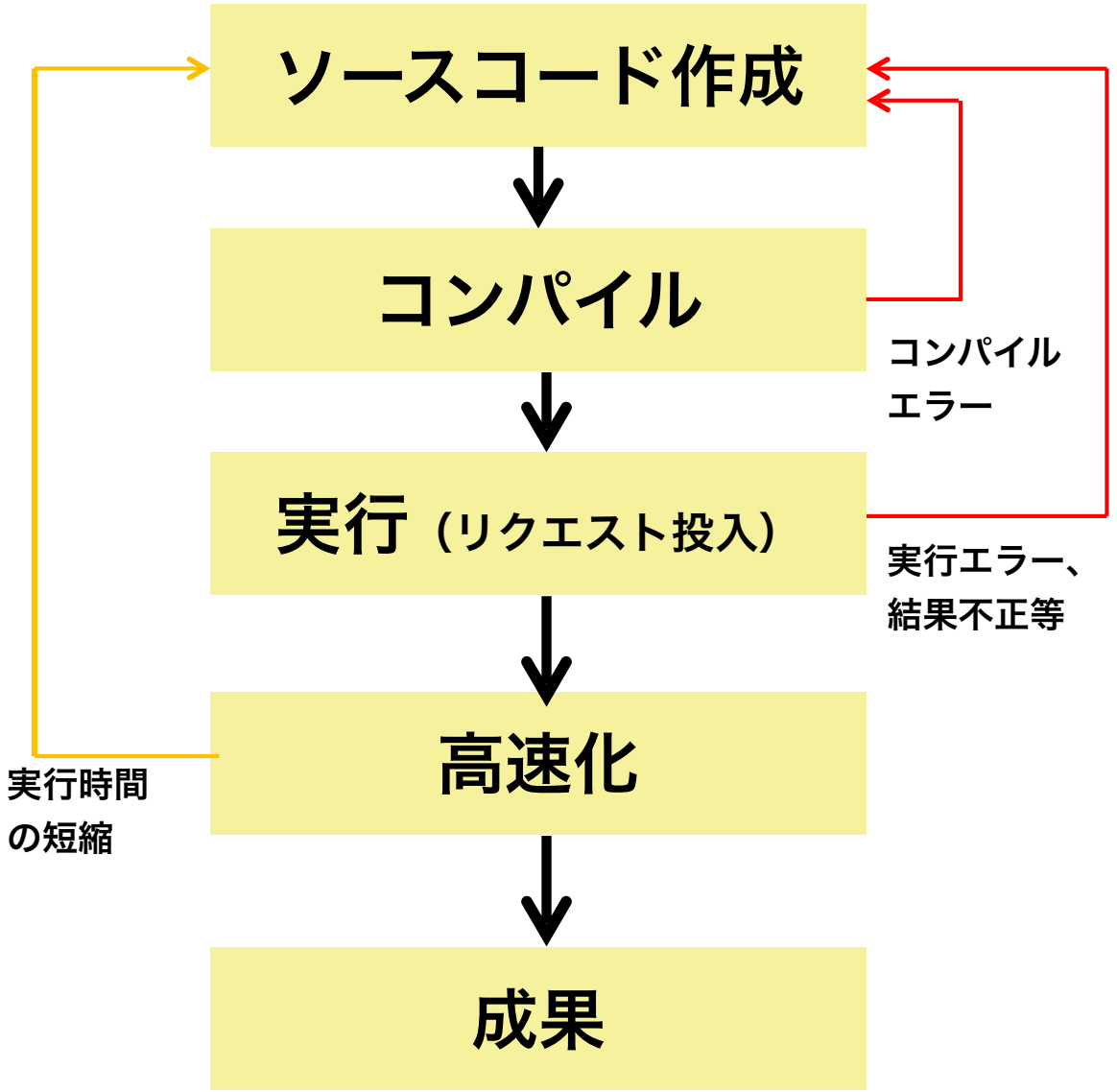
・サイバーサイエンスセンター 大規模科学計算システムのウェブサイト　https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/
  - システムの利用マニュアル
  - 運用についてのお知らせ
  - 利用相談などの連絡先
  - 講習会予定

・利用申請からログインまでについては以下を参照

https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/first-use/

・利用者用ポータルサイト（LDAP認証連携）
  - 公開鍵・秘密鍵ペアの作成
  - 利用状況（負担金，合計課金対象時間，ジャーナルレコード等）の確認

プログラム開発の流れ



逐次実行

front$（プロンプト）に続くコマンドを入力します。

【ソースコード】

ソースコードのコピー（ディレクトリごと）

```
front$  cd ~
front$  cp -r /mnt/stfs/ap/lecture/super/prog1 ./
```

【コンパイル】

AOBA-A（SX）向けにコンパイル

```
front$  cd prog1
front$  nfort vec.f90（逐次実行Fortranプログラム）
```

（コンパイルメッセージが表示）

```
front$  ls （実行ファイル a.out が作成されていることを確認）
```

【リクエスト投入】

AOBA-A（SX）にバッチリクエストファイルの投入

```
front$  qsub run.sh
```

（投入先のプロジェクトコードを確認）

【リクエストの状況確認】

バッチリクエストの実行待ち、実行中を確認

```
front$  reqstat
```

（ジョブが終了するとなにも表示されません）

【結果の確認】

標準出力ファイルの確認

front$ ls （標準出力ファイル名の確認）

front$ cat run.sh.o12345

```
vc(1,1)=   2.4090824133883015E+05
```

【実効性能の確認】

標準エラー出力ファイルの確認

front$ ls （標準エラー出力ファイル名の確認）

front$ cat run.sh.e12345

```
          ********  Program  Information  ********
Real Time (sec)                          :            0.567144
User Time (sec)                          :            0.565389
Vector Time (sec)                        :            0.564730
Inst. Count                              :           748558400
V. Inst. Count                           :           318832677
V. Element Count                         :         81621164350
V. Load Element Count                    :          5368709152
FLOP Count                               :         65498251483
MOPS                                     :       187019.400582
MOPS (Real)                              :       186325.393686
MFLOPS                                   :       115918.156629
MFLOPS (Real)                            :       115487.998047
A. V. Length                             :          255.999997
V. Op. Ratio (%)                         :           99.593345
L1 Cache Miss (sec)                      :            0.000185
CPU Port Conf. (sec)                     :            0.000000
V. Arith. Exec. (sec)                    :            0.497569
V. Load Exec. (sec)                      :            0.067061
VLD LLC Hit Element Ratio (%)            :            0.042813
FMA Element Count                        :         23622320128
Power Throttling (sec)                   :            0.000000
Thermal Throttling (sec)                 :            0.000000
Memory Size Used (MB)                    :        33264.000000

Start Time (date)        :       Fri Nov 13 14:47:09 2020 JST
End   Time (date)        :       Fri Nov 13 14:47:09 2020 JST
```

自動並列実行

【ソースコード】

ソースコードのコピー（ディレクトリごと）

front$ cd ~
（front$ cp -r /mnt/stfs/ap/lecture/super/prog1 ./）　（逐次実行プログラムと同じ）

【コンパイル】

AOBA-A（SX）向けにコンパイル

front$ cd prog1
front$ nfort -mparallel vec.f90（自動並列実行Fortranプログラム）
（コンパイルメッセージが表示）
front$ ls （実行ファイル a.out が作成されていることを確認）

【リクエスト投入】

AOBA-A（SX）にバッチリクエストファイルの投入

front$ qsub run.sh
（投入先のプロジェクトコードを確認）

【リクエストの状況確認】

バッチリクエストの実行待ち、実行中を確認

front$ reqstat

（ジョブが終了するとなにも表示されません）

OpenMP並列実行

【ソースコード】

ソースコードのコピー（ディレクトリごと）

```
front$  cd ~
front$  cp -r /mnt/stfs/ap/lecture/super/prog2 ./
```

【コンパイル】

AOBA-A（SX）向けにコンパイル

```
front$  cd prog2
front$  nfort -fopenmp omp.f90（OpenMP並列実行Fortranプログラム）
```

（コンパイルメッセージが表示）

ls （実行ファイル a.out が作成されていることを確認）

【リクエスト投入】

AOBA-A（SX）にバッチリクエストファイルの投入

```
front$  qsub run.sh
```

（投入先のプロジェクトコードを確認）

【リクエストの状況確認】

バッチリクエストの実行待ち、実行中を確認

```
front$  reqstat
```

（ジョブが終了するとなにも表示されません）

MPI並列実行

【ソースコード】

ソースコードのコピー（ディレクトリごと）

```
front$  cd ~
front$  cp -r /mnt/stfs/ap/lecture/super/prog3 ./
```

【コンパイル】

AOBA-A（SX）向けにコンパイル

```
front$  cd prog3
front$  mpinfort mpi.f90（MPI並列実行Fortranプログラム）
（コンパイルメッセージが表示）
ls （実行ファイル a.out が作成されていることを確認）
```

【リクエスト投入】

AOBA-A（SX）にバッチリクエストファイルの投入

```
front$  qsub run.sh
（投入先のプロジェクトコードを確認）
```

【リクエストの状況確認】

バッチリクエストの実行待ち、実行中を確認

```
front$  reqstat

（ジョブが終了するとなにも表示されません）
```

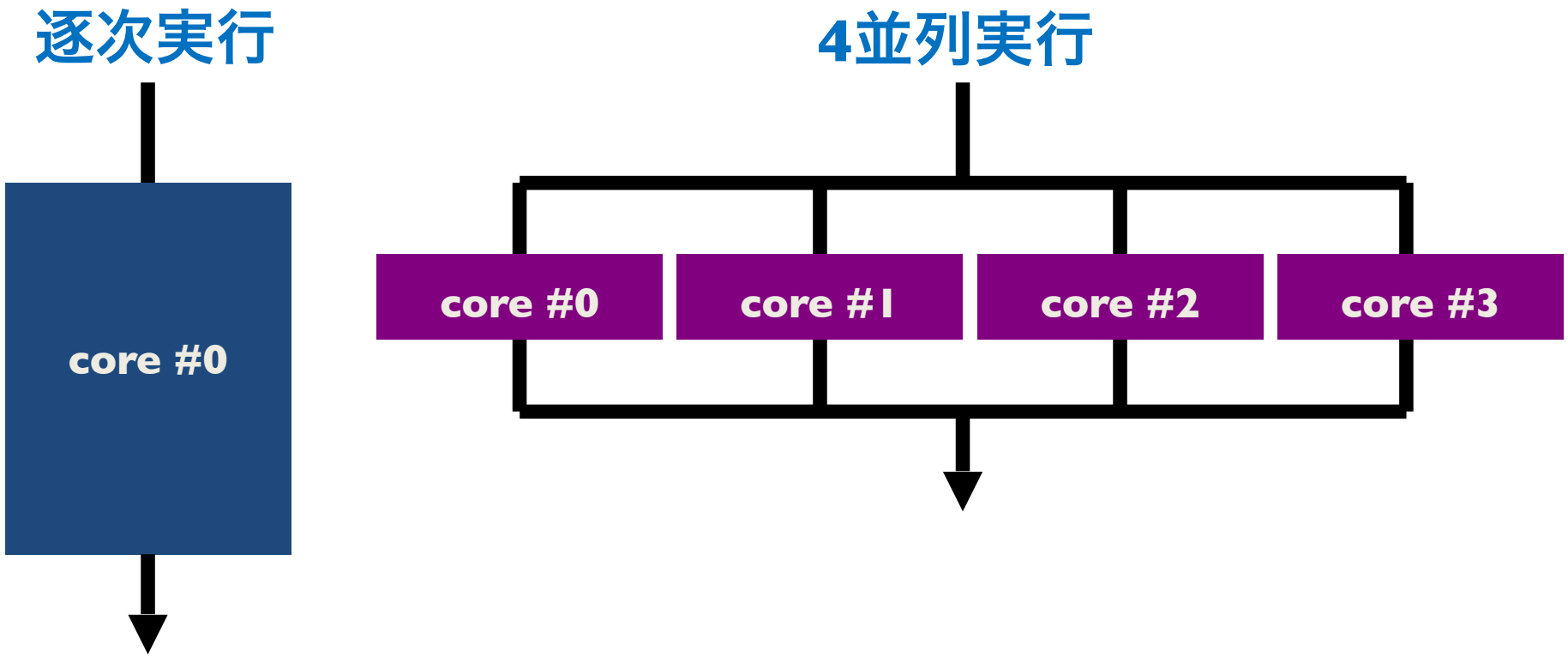
計算機と実行形式と演算結果および演算時間の比較

AOBA-A (SX) 1VE 8core 2.45TFLOPS	コンパイルコマンド	全体演算時間 [sec]	演算部のみ[sec]
逐次実行	nfort vec.f90	0.567	—
自動並列実行(8core)	nfort -mparallel vec.f90	0.161	—
OpenMP並列実行(8core)	nfort -fopenmp omp.f90	0.195	—
MPI並列実行 (1VE)	mpinfort mpi.f90	0.491	0.133
MPI並列実行 (8VE)	mpinfort mpi.f90	0.744	0.014

AOBA-B (LX) 1node 128core 4.096TFLOPS	コンパイルコマンド ※	全体演算時間 [sec]	演算部のみ[sec]
逐次実行	ifort vec.f90 -mcmodel=medium -march=core-avx2	7.093	—
自動並列実行(128core)	ifort -parallel vec.f90 -mcmodel=medium -march=core-avx2	0.872	—
OpenMP並列実行(128core)	ifort -fopenmp omp.f90 -march=core-avx2	1.611	—
MPI並列実行(1node)	mpiifort mpi.f90 -march=core-avx2	13.303	1.232
MPI並列実行(2node)	mpiifort mpi.f90 -march=core-avx2	29.822	0.599

※ Intel OneAPIの利用は、bash環境（/bin/bashの実行）で
source source /opt/oneapi/setvars.sh intel64 コマンドの実行が必要

- 演算範囲を複数のプロセッサ（コア）で分割し、時間的に並列処理すること



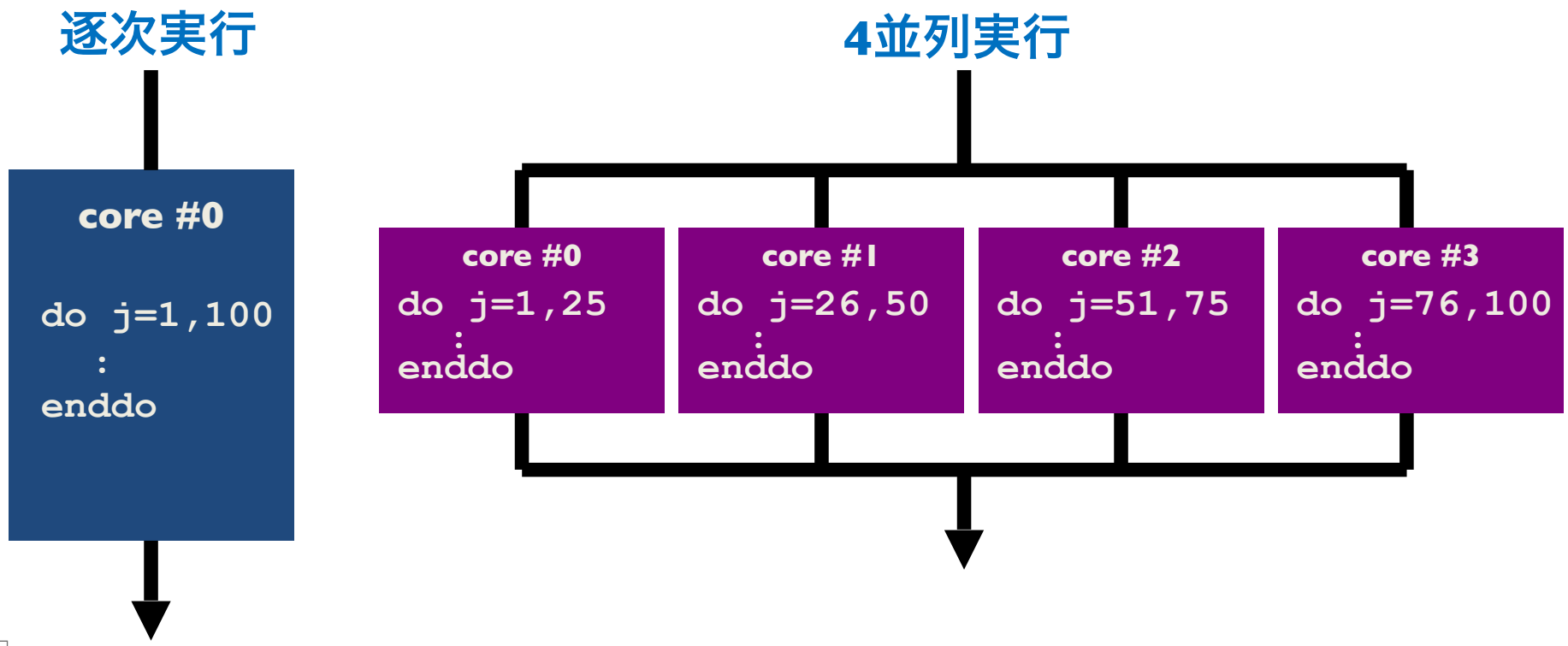
• 自動並列化の例

```
do j=1,100
  do i=1,2048
    a(i,j)=b(i,j)+c(i,j)
  enddo
enddo
```

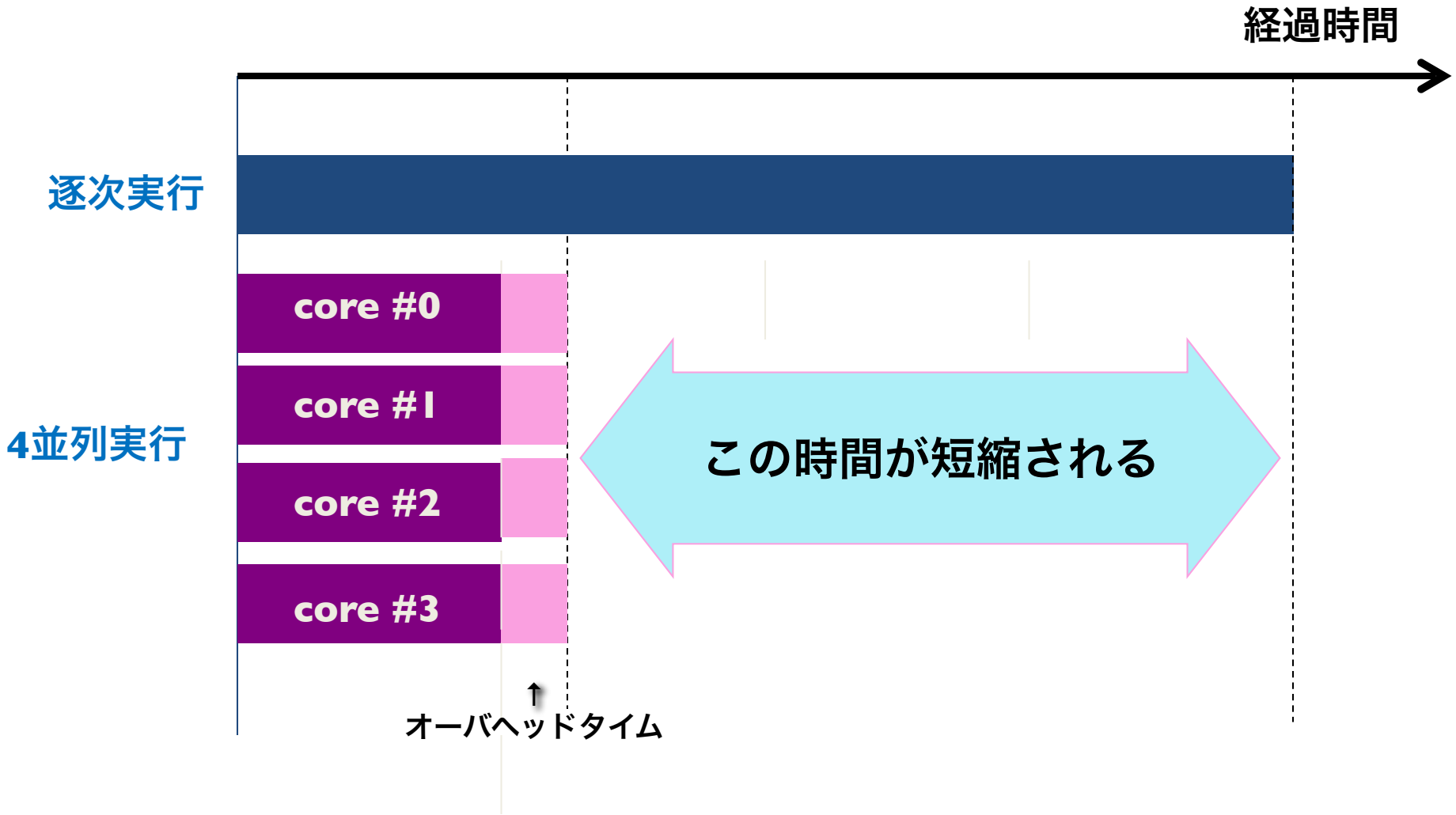
基本方針

内側のループはベクトル実行

外側のループを並列化



- CPU時間が短縮されるのではなく、経過時間が短縮される



• 並列処理の方法

■ **自動並列**

コンパイラが並列可能な箇所（ループ）を見つけ自動的に並列化する。
実行並列数は、割り当てられたプロセッサ数で決定する。

■ **OpenMP**

ユーザが、ソースコード中の並列化する箇所に指示文（ディレクティブ）を指定する。実行並列数は、割り当てられたプロセッサ数で決定する。

■ **MPI*(Message Passing Interface)***

メッセージ交換用ライブラリによりプロセッサ間データ通信を行う。
データの分割、処理方法等の並列処理の手順を、ユーザが明示的にプログラミングしなければならない。

- 並列処理の特徴

	既存のソースコード（逐次処理用）を利用可能か？	並列化に要する作業	複数ノードでの実行が可能か？	その他
自動並列	○	ない コンパイルオプションを付ける	× MPI並列化が必要	コンパイラまかせのためお手軽だが、高効率で実行するにはユーザの一手間が必要な場合あり。センターで最も利用されている並列化手法。
OpenMP	指示行の挿入が必要	ある 並列化可能な箇所をユーザが判断し、ソースコードに指示文を追加する	× MPI並列化が必要	ユーザの指示により並列化を行うため、意図したとおりに動作する。演算結果の検証が必要。自動並列の手動版的な手法。
MPI	MPI用のソースコードに改変が必要	多い MPI用のソースコードを作成する必要あり	○	MPI用プログラムを作成する必要はあるが、大規模並列化には不可欠。分散メモリ、共有メモリともに利用可能。

• 自動並列化の条件

- **自動並列化の対象ループで、かつそのループ中の文、データ型、演算が自動並列化対象であること**
- **ループ中のデータに依存関係がないこと**
- **並列化により演算順序が変わっても正しい演算結果となること**
- **並列化によって性能向上が期待できること**

NEC Software Development kit for Vector Engine

・逐次実行

front$ **nfort** コンパイルオプション Fortranソースファイル名

front$ **ncc** コンパイルオプション Cソースファイル名

front$ **nc++** コンパイルオプション C++ソースファイル名

・自動並列化

front$ **nfort -mparallel** コンパイルオプション Fortranソースファイル名

front$ **ncc -mparallel** コンパイルオプション Cソースファイル名

front$ **nc++ -mparallel** コンパイルオプション C++ソースファイル名

・OpenMP並列化

front$ **nfort -fopenmp** コンパイルオプション Fortranソースファイル名

front$ **ncc -fopenmp** コンパイルオプション Cソースファイル名

front$ **nc++ -fopenmp** コンパイルオプション C++ソースファイル名

・MPI並列化（自動並列化，OpenMP並列化の併用も可能）

front$ **mpinfort** コンパイルオプション Fortranソースファイル名

front$ **mpincc** コンパイルオプション Cソースファイル名

front$ **mpinc++** コンパイルオプション C++ソースファイル名

AMD Optimizing C/C++ Compiler （AOCC）

・逐次実行

front$ **flang**コンパイルオプション Fortranソースファイル名

front$ **clang** コンパイルオプション Cソースファイル名

front$ **clang++** コンパイルオプション C++ソースファイル名

・OpenMP並列化

front$ **flang -fopenmp** コンパイルオプション Fortranソースファイル名

front$ **clang -fopenmp** コンパイルオプション Cソースファイル名

front$ **clang++ -fopenmp** コンパイルオプション C++ソースファイル名

・MPI並列化（OpenMPIを利用，OpenMP並列化の併用も可能）

front$ **mpifort** コンパイルオプション Fortranソースファイル名

front$ **mpicc** コンパイルオプション Cソースファイル名

front$ **mpic++** コンパイルオプション C++ソースファイル名

最適化のコンパイルオプション　-march=znver2 でRome向け最適化コンパイル

Intel OneAPI ベース&HPCツールキット

Intelコンパイラ環境に切り替えるために、bash環境で以下のコマンドを実行する必要がある

front$ source /opt/oneapi/setvars.sh intel64

・逐次実行

front$ **ifort** コンパイルオプション Fortranソースファイル名

front$ **icc** コンパイルオプション Cソースファイル名

front$ **icpc** コンパイルオプション C++ソースファイル名

・自動並列化

front$ **ifort -parallel** コンパイルオプション Fortranソースファイル名

front$ **icc -parallel** コンパイルオプション Cソースファイル名

front$ **icpc -parallel** コンパイルオプション C++ソースファイル名

・OpenMP並列化

front$ **ifort -qopenmp** コンパイルオプション Fortranソースファイル名

front$ **icc -qopenmp** コンパイルオプション Cソースファイル名

front$ **icpc -qopenmp** コンパイルオプション C++ソースファイル名

・MPI並列化（OpenMPIを利用，OpenMP並列化の併用も可能）

front$ **mpiifort** コンパイルオプション Fortranソースファイル名

front$ **mpiicc** コンパイルオプション Cソースファイル名

front$ **mpiicpc** コンパイルオプション C++ソースファイル名

リクエストの実行方法と実行キュー（1/5）

・ジョブスクリプトファイルを作成し，qsub コマンドでリクエストを投入

front$ **qsub** ジョブスクリプトファイル名

・バッチリクエストの実行状況，リクエストIDは，reqstat コマンドで確認

front$ **reqstat**

・バッチリクエストのキャンセル，途中終了はqdelコマンド

front$ **qdel** リクエストID

【逐次実行】

```
#!/bin/sh                          #シェルを指定
#PBS -q sx --venode 1              #SX-Auroraを1VE使用する
#PBS -l elapstim_req=2:00:00       #実行時間を2時間に設定
cd $PBS _O_WORKDIR                 # qsubを実行したディレクトリに移動
./a.out                            #カレントディレクトリのa.outを実行
```

【自動並列／OpenMP並列実行】

```
#!/bin/sh                          #シェルを指定
#PBS -q sx --venode 1              #SX-Auroraを1VE使用する
#PBS -l elapstim_req=2:00:00       #実行時間を2時間に設定
#PBS -v OMP_NUM_THREADS=8          #1VEあたり8コアで実行（1～8）
cd $PBS _O_WORKDIR                 # qsubを実行したディレクトリに移動
./a.out                            #カレントディレクトリのa.outを実行
```

【MPI実行】

```
#!/bin/sh                          #シェルを指定
#PBS -q sx --venode 8              #SX-Auroraを8VE使用する
#PBS -l elapstim_req=2:00:00       #実行時間を2時間に設定
cd $PBS _O_WORKDIR                 # qsubを実行したディレクトリに移動
mpirun -np 64 ./a.out              #カレントディレクトリのa.outを64プロセスで実行
```

【MPIと自動並列／OpenMP並列の同時利用】

```
#!/bin/sh                          #シェルを指定
#PBS -q sx --venode 8              #SX-Auroraを8VE使用する
#PBS -l elapstim_req=2:00:00       #実行時間を2時間に設定
#PBS -v OMP_NUM_THREADS=8          #1VEあたり8コアで実行（1～8）
cd $PBS _O_WORKDIR                 # qsubを実行したディレクトリに移動
mpirun -np 8 ./a.out               #カレントディレクトリのa.outを8プロセス×8コア並列で実行
```

AOCCの場合

【逐次実行】

```
#!/bin/sh                          #シェルを指定
#PBS -q lx -b 1                    #LX 460Rz-2を1ノード使用する
#PBS -l elapstim_req=2:00:00       #実行時間を2時間に設定
cd $PBS _O_WORKDIR                 #qsubを実行したディレクトリに移動
./a.out                            #カレントディレクトリのa.outを実行
```

【OpenMP並列実行】

```
#!/bin/sh                          #シェルを指定
#PBS -q lx -b 1                    #LX 460Rz-2を1ノード使用する
#PBS -l elapstim_req=2:00:00       #実行時間を2時間に設定
#PBS -v OMP_NUM_THREADS=128        #1ノードあたり128コアで実行（1～128）
cd $PBS _O_WORKDIR                 #qsubを実行したディレクトリに移動
./a.out                            #カレントディレクトリのa.outを実行
```

【MPI実行】

```
#!/bin/sh                          #シェルを指定
#PBS -q lx -b 2                    #LX 460Rz-2を2ノード使用する
#PBS -l elapstim_req=2:00:00       #実行時間を2時間に設定
#PBS -T openmpi                    #OpenMPIライブラリを使うことを指定
cd $PBS _O_WORKDIR                 #qsubを実行したディレクトリに移動
mpirun $NQSV_MPIOPTS  -np 256 ./a.out   #カレントディレクトリのa.outを256プロセスで実行
```

【MPIとOpenMP並列の同時利用】

```
#!/bin/sh                          #シェルを指定
#PBS -q lx -b 2                    #LX 460Rz-2を2ノード使用する
#PBS -l elapstim_req=2:00:00       #実行時間を2時間に設定
#PBS -T openmpi                    #OpenMPIライブラリを使うことを指定
#PBS -v OMP_NUM_THREADS=64         #1ノードあたり64コアで実行（1～128）
cd $PBS _O_WORKDIR                 #qsubを実行したディレクトリに移動
mpirun $NQSV_MPIOPTS --map-by ppr:2:node  -np 4 ./a.out
                                   #カレントディレクトリのa.outを4プロセス×64コア並列で実行
```

Intel OneAPIの場合

【逐次実行】

```
#!/bin/sh                                  #シェルを指定
#PBS -q lx -b 1                            #LX 460Rz-2を1ノード使用する
#PBS -l elapstim_req=2:00:00               #実行時間を2時間に設定
source /opt/oneapi/setvars.sh intel64      #プログラム実行環境をIntelコンパイラに切替え
cd $PBS _O_WORKDIR                         #qsubを実行したディレクトリに移動
./a.out                                    #カレントディレクトリのa.outを実行
```

【OpenMP並列実行】

```
#!/bin/sh                                  #シェルを指定
#PBS -q lx -b 1                            #LX 460Rz-2を1ノード使用する
#PBS -l elapstim_req=2:00:00               #実行時間を2時間に設定
#PBS -v OMP_NUM_THREADS=128                #1ノードあたり128コアで実行（1～128）
source /opt/oneapi/setvars.sh intel64      #プログラム実行環境をIntelコンパイラに切替え
cd $PBS _O_WORKDIR                         #qsubを実行したディレクトリに移動
./a.out                                    #カレントディレクトリのa.outを実行
```

【MPI実行】

```
#!/bin/sh                                  #シェルを指定
#PBS -q lx -b 2                            #LX 460Rz-2を2ノード使用する
#PBS -l elapstim_req=2:00:00               #実行時間を2時間に設定
#PBS -T intmpi                             #Intel MPIライブラリを使うことを指定
source /opt/oneapi/setvars.sh intel64      #プログラム実行環境をIntelコンパイラに切替え
cd $PBS _O_WORKDIR                         #qsubを実行したディレクトリに移動
mpirun -np 256 ./a.out     #カレントディレクトリのa.outを256プロセスで実行
```

【MPIとOpenMP並列実行の同時利用】

```
#!/bin/sh                                  #シェルを指定
#PBS -q lx -b 2                            #LX 460Rz-2を2ノード使用する
#PBS -l elapstim_req=2:00:00               #実行時間を2時間に設定
#PBS -T intmpi                             #Intel MPIライブラリを使うことを指定
#PBS -v OMP_NUM_THREADS=64                 #1ノードあたり64コアで実行（1～128）
source /opt/oneapi/setvars.sh intel64      #プログラム実行環境をIntelコンパイラに切替え
cd $PBS _O_WORKDIR                         #qsubを実行したディレクトリに移動
mpirun -hostfile ${PBS_NODEFILE} -ppn 2 -np 4 ./a.out
                                           #カレントディレクトリのa.outを4プロセス×64コア並列で実行
```

リクエストの実行方法と実行キュー（5/5）

サブシステムAOBA-A（SX-Aurora TSUBASA）

実行キュー名	利用可能VE数	実行時間制限 規定値／最大値	ジョブの実行形態
sxf	1	1時間／1時間	1VEジョブ 1時間無料 (VH を共用する)
sx	1	72時間／720時間	1VEジョブ (VH を共用する)
	2～256		8VE 単位で確保 (VH を共用しない)
sxmix	2～8		1VE 単位で確保 (VH を共用する)
個別設定	契約VE数	720時間	占有利用

サブシステムAOBA-B（LX 406Rz-2）

実行キュー名	利用可能ノード数	実行時間制限 規定値／最大値	ジョブの実行形態
lx	1～16	72時間／720時間	ノードを共用しない
個別設定	契約ノード数	720時間	占有利用

・バイナリを作成するのに利用したコンパイラと，投入する計算機のキューの確認が必要

→ GNUコンパイラで作成したバイナリをSXのキューに投入すると，VH（EPYC）で実行されてしまう

負担金制度（1/3）

・利用者番号（アカウント）の初期登録料，年間維持費**なし**

▫ 従量課金を基本とするため，計算機を利用しない場合の負担金請求は**0円**

※ 利用者番号は年度を超える場合も自動継続され，ホーム領域（/uhome）のデータも保存されます。

・計算機利用負担金

▫ 共有利用・従量

課金対象時間（利用VH数または利用ノード数と，利用時間の積）に比例した課金方式

▫ 共有利用・定額

利用負担金の先払いにより，負担額の課金対象時間相当まで計算機を利用可能

年度途中に定額負担金の追加も可能

▫ 占有利用

3ヶ月単位でAOBA-A（8VE単位）またはAOBA-B（1ノード単位）を占有して利用

特定利用者で計算資源を占有するため，他利用者のジョブ待ちが無い

・ストレージ負担経費

▫ ホーム領域 5TBまで無料

▫ 追加1TBにつき年額3,000円

・出力負担経費

▫ センターの大判プリンタ1枚につき ソフトクロス紙 1,200円　光沢紙 600円

・民間企業利用については 成果公開型は2倍，成果非公開型は4倍の課金単価

負担金制度（2/3）

サブシステムAOBA-A（SX-Aurora TSUBASA）

利用形態	負担額および利用可能課金対象時間
共有 （無料）	利用 **VE 数 1**（実行数，実行時間の制限あり）**無料**
共有 （従量）	課金対象時間 ＝（利用 VE 数÷ 8 を切り上げた数）×経過時間（秒） 課金対象時間の合計 1 時間につき **125 円** 課金対象時間は半期毎 (4〜9 月および 10〜3 月) に合計し，1 時間未満を切上げて負担金を請求する 。
共有 （定額）	負担額 **10 万円**につき 課金対象時間の合計 **800時間**
占有	利用**VE数8**，利用期間**3ヶ月**につき **270,000円**

サブシステムAOBA-B（LX 406-Rz2）

利用形態	負担額および利用可能課金対象時間
共有 （従量）	課金対象時間 ＝ 利用ノード数 × 経過時間（秒） 課金対象時間の合計 1 時間につき **22 円** 課金対象時間は半期毎 (4〜9 月および 10〜3 月) に合計し，1 時間未満を切上げて負担金を請求する 。
共有 （定額）	負担額 **10 万円**につき 課金対象時間の合計 **4,600時間**
占有	利用**ノード数1**，利用期間**3ヶ月**につき **47,000円**

・民間企業利用については 成果公開型は**2倍**，成果非公開型は**4倍**の課金単価

利用申請方法（利用者番号の取得）

センターに利用申請　https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/apply-for-use/ をご参照ください。

・大学・学術利用

　　□ 負担金請求あり，随時申請可能

・民間企業利用（成果公開型／成果非公開型）

　　□ 負担金請求あり，課題審査あり，トライアルユースあり，随時申請可能

・センターとの共同研究（大学・学術・民間企業利用対象）

　　□ 負担金請求あり，共同研究割引あり，応募期間あり

各機関での課題募集

・学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点公募型共同研究（JHPCN）https://jhpcn-kyoten.itc.u-tokyo.ac.jp/

　　□ 採択予算超過の場合に負担金請求あり，応募期間あり（締切1月頃）

・革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）http://www.hpci-office.jp/

　　□ 負担金請求なし（採択資源量まで利用可能），応募期間あり（締切11月頃）

利用者講習会・利用相談・高速化支援

利用者支援　https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/support/ をご参照ください。

・利用者講習会
- □ システムの利用法，コードの高速化・並列化，ネットワーク・セキュリティ，アプリケーション利用方法について，年間10回程度開催
- □ センター内端末機室および遠隔配信で実施

・利用相談
- □ 利用申請の方法，システムの利用方法，コンパイルエラー，ジョブの投入方法，コードの高速化など
- □ 利用相談フォームで受け付け https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/consultation/
- □ メールで継続的にサポート
- □ 年間約100件

・高速化支援
- □ コードを預かり，利用者，センター教職員，ベンダーが協力してコードの高速化・並列化を実施
- □ コード大規模化のサポート，JHPCN課題，HPCI課題へのステップアップを支援
- □ 1997年から継続的な取り組み
- □ 年間5〜10件程度を実施
- □ SX-ACEシステム（2015年度〜2020年度）ではベクトル高速化またはMPI並列化を30件実施
  （平均16.7倍）　（平均約2.4倍）