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 ～

2023年5月25日

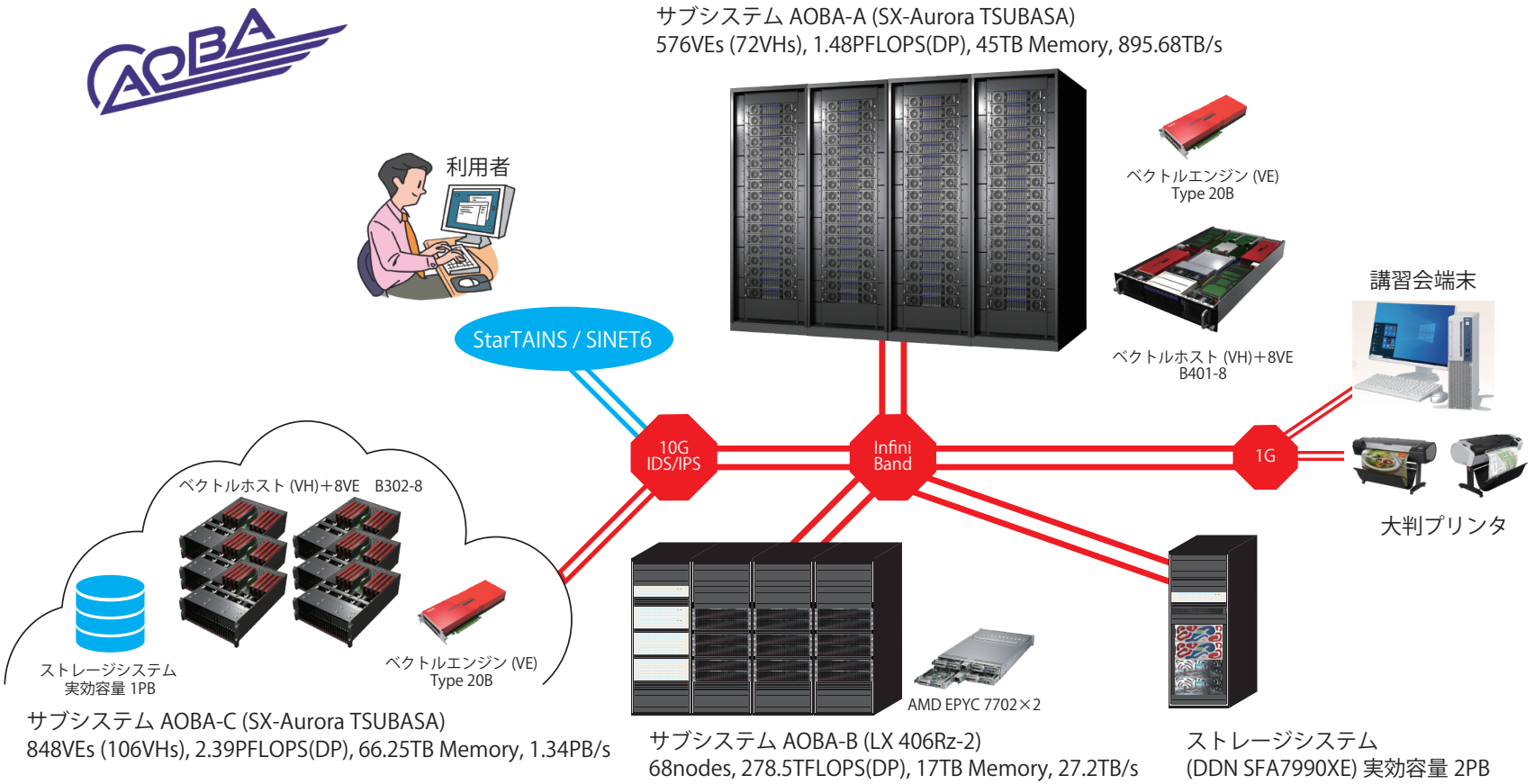
東北大学 サイバーサイエンスセンター
東北大学 情報部デジタルサービス支援課

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
- 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
- 並列実行とは
- プログラム開発の流れ
- ジョブの実行方法
- コンパイル・リクエスト投入・結果確認（実習）
- プログラムのコンパイル方法
- ジョブスクリプトファイル例

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 20B
- サブシステムAOBA-B：AMD EPYC 7702
- クラウドサービスAOBA-C：SX-Aurora TSUBASA 20B（7月末サービス終了）
- ストレージシステム：DDN SFA7990XE 実効容量 2PB
- ログインサーバ、フロントエンドサーバ（AOBA-A,B用、AOBA-C用）、ファイル転送サーバ
- 講習会端末 (Windows)、大判プリンタ（A0判）



2023.5.25

- スーパーコンピュータ（Supercomputer、略称：スパコン）とは、科学技術計算を主目的とする大規模なコンピュータのこと。
- HPC（ High Performance Computer / Computing ）とも呼ばれる。

スーパーコンピュータとは？（2/4）

- 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
- HPLベンチマークによるランキング
- 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 - JUNE 2023

R_{max} and R_{peak} values are in PFlop/s. 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 (PFlop/s)	Rpeak (PFlop/s)	Power (kW)
1	**Frontier** - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	8,699,904	1,194.00	1,679.82	22,703
2	**Supercomputer Fugaku** - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442.01	537.21	29,899
3	**LUMI** - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE EuroHPC/CSC Finland	2,220,288	309.10	428.70	6,016

スーパーコンピュータとは？（3/4）

- 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 - JUNE 2023

The TOP500 list has incorporated the High-Performance Conjugate Gradient (HPCG) benchmark results, which provide an alternative metric for assessing supercomputer performance. This score is meant to complement the HPL measurement to give a fuller understanding of the machine.

HPCG Release

THE LIST

- Supercomputer Fugaku remains the leader on the HPCG benchmark with 16 PFlop/s.
- The DOE system Frontier at ORNL claims the second position with 14.05 HPCG-Pflop/s.
- The third position was captured by the upgraded LUMI system with 3.40 HPCG-petaflops.

Rank	TOP500 Rank	System	Cores	Rmax (PFlop/s)	HPCG (TFlop/s)
1	2	**Supercomputer Fugaku** - Supercomputer Fugaku, A64FX 48C 2.2GHz, Tofu interconnect D, Fujitsu RIKEN Center for Computational Science Japan	7,630,848	442.01	16004.50
2	1	**Frontier** - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	8,699,904	1,194.00	14054.00
3	3	**LUMI** - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE EuroHPC/CSC Finland	2,220,288	309.10	3408.47

スーパーコンピュータとは？（4/4）

- Green500(http://www.green500.org/)
- 電力効率の良い高性能計算機のランキング
- HPLベンチマークによる演算性能をシステム電力で除した、消費電力1Wあたりの性能

Green500 Data

Rank	TOP500 Rank	System	Cores	Rmax (PFlop/s)	Power (kW)	Energy Efficiency (GFlops/watts)
1	255	**Henri** - ThinkSystem SR670 V2, Intel Xeon Platinum 8362 32C 2.8GHz, NVIDIA H100 80GB PCIe, Infiniband HDR, Lenovo Flatiron Institute United States	8,288	2.88	44	65.396
2	34	**Frontier TDS** - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE DOE/SC/Oak Ridge National Laboratory United States	120,832	19.20	309	62.684
3	12	**Adastra** - HPE Cray EX235a, AMD Optimized 3rd Generation EPYC 64C 2GHz, AMD Instinct MI250X, Slingshot-11, HPE Grand Equipement National de Calcul Intensif - Centre Informatique National de l'Enseignement Suprieur (GENCI-CINES) France	319,072	46.10	921	58.021

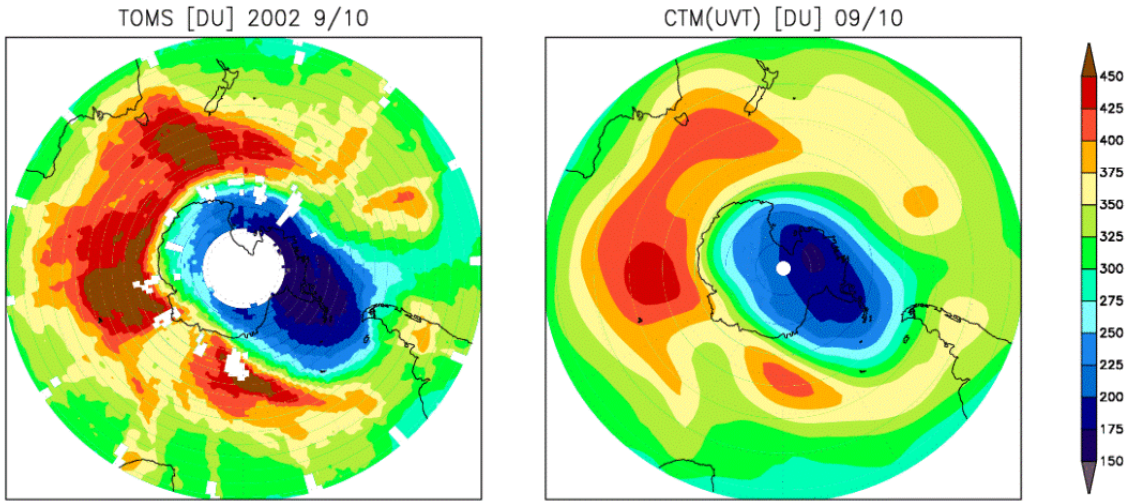
スーパーコンピュータの応用分野

- 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

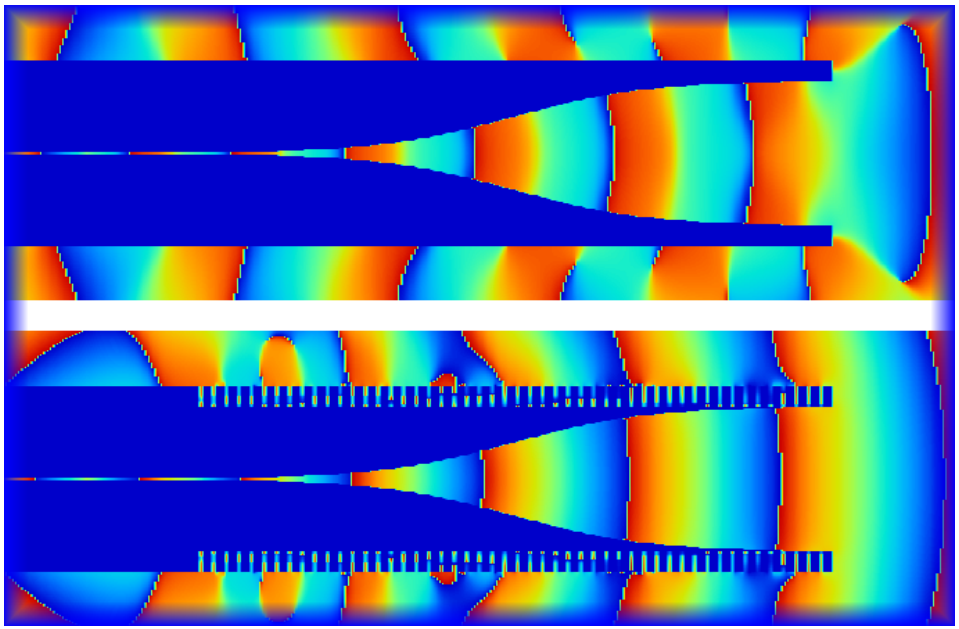
複雑な物理現象の数値シミュレーションに用いられる

サイバーサイエンスセンターでの応用例（1/4）

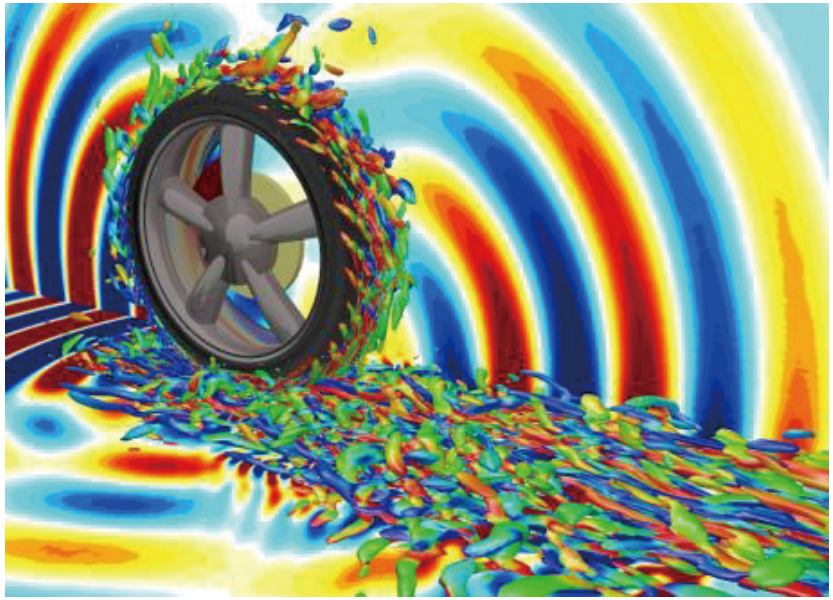
気象シミュレーション



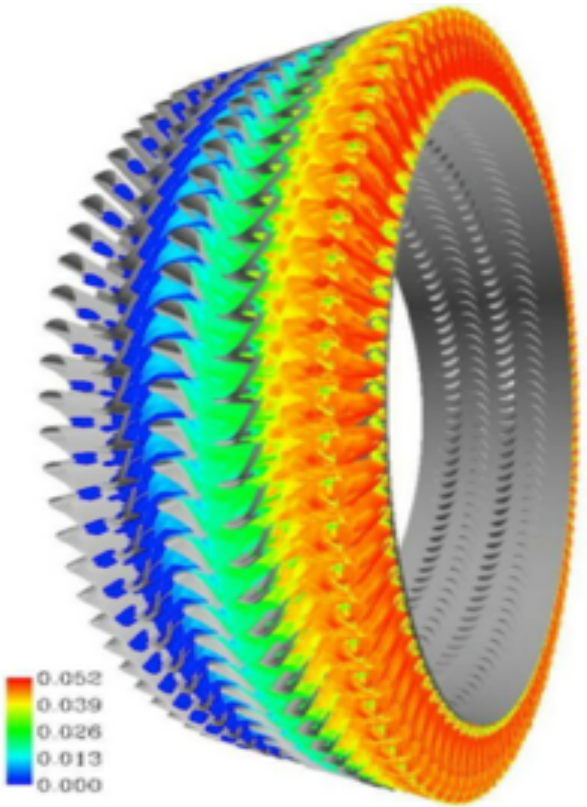
アンテナ開発



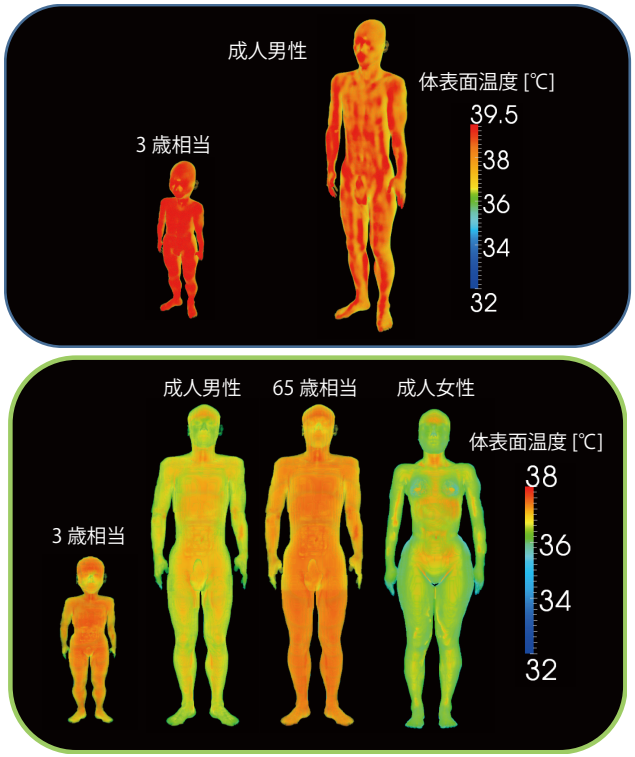
低騒音タイヤ開発



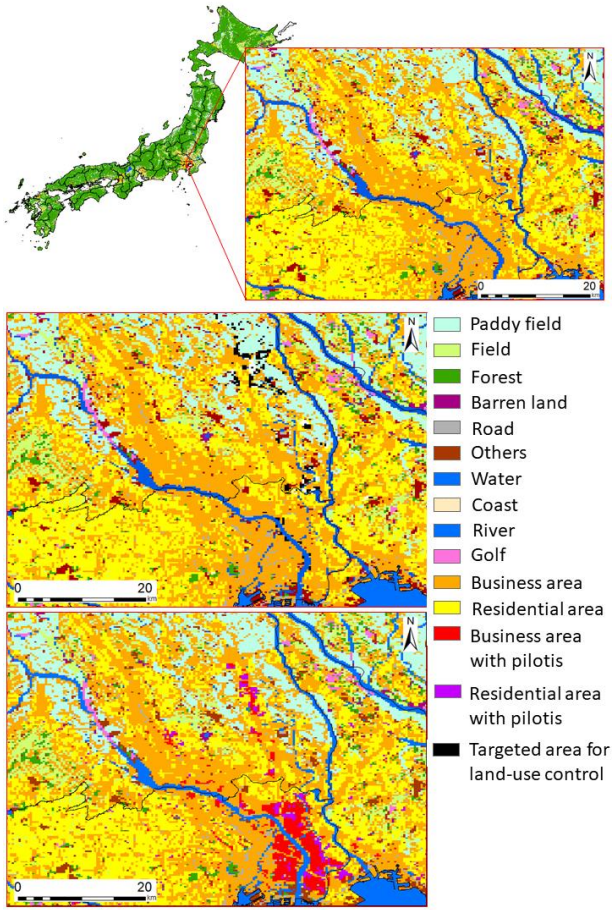
CO2削減 タービン設計



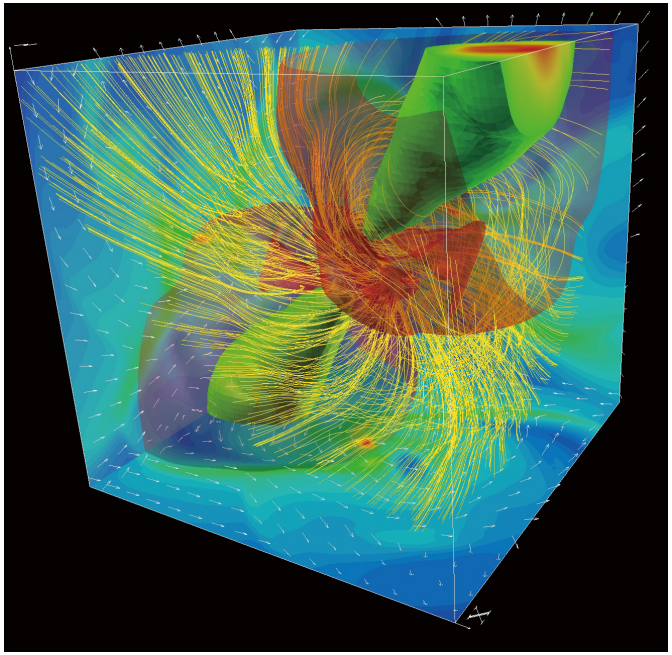
熱中症シミュレーション



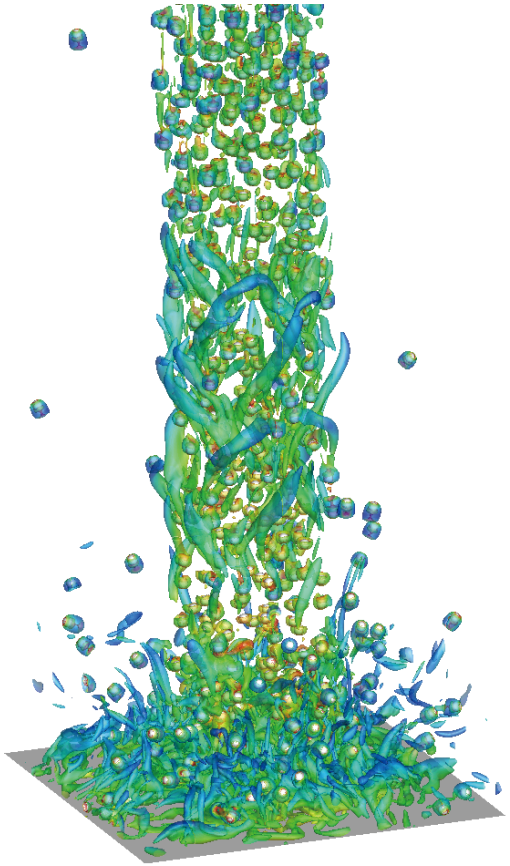
洪水被害予測シミュレーション



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

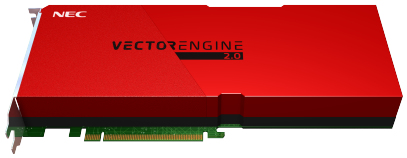


①プロセッサによる分類

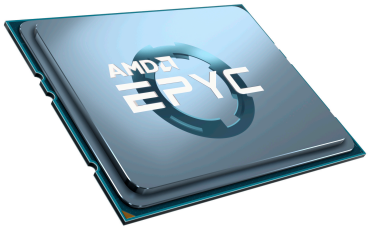
a. ベクトル計算機

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 A100

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
- センターではAOBA-AとAOBA-Cに採用

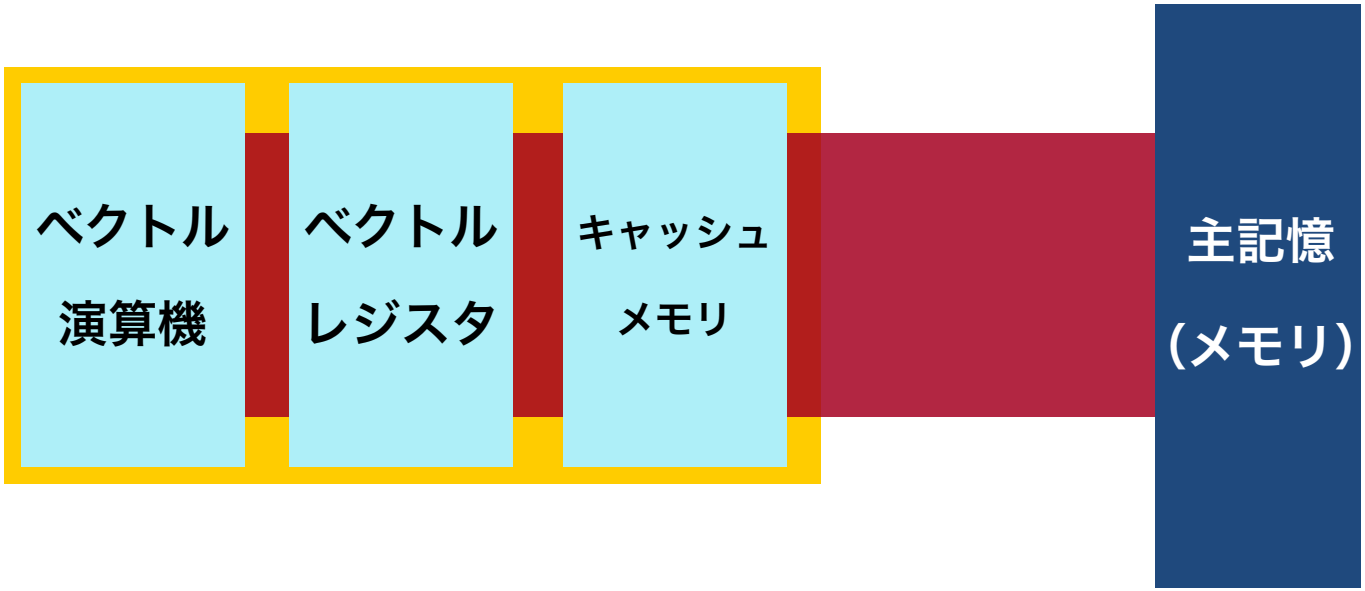
①-b. スカラ計算機

- 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
- いわゆるHPCサーバ、PCクラスタ
- AOBA-Bに採用

①-c. GPU

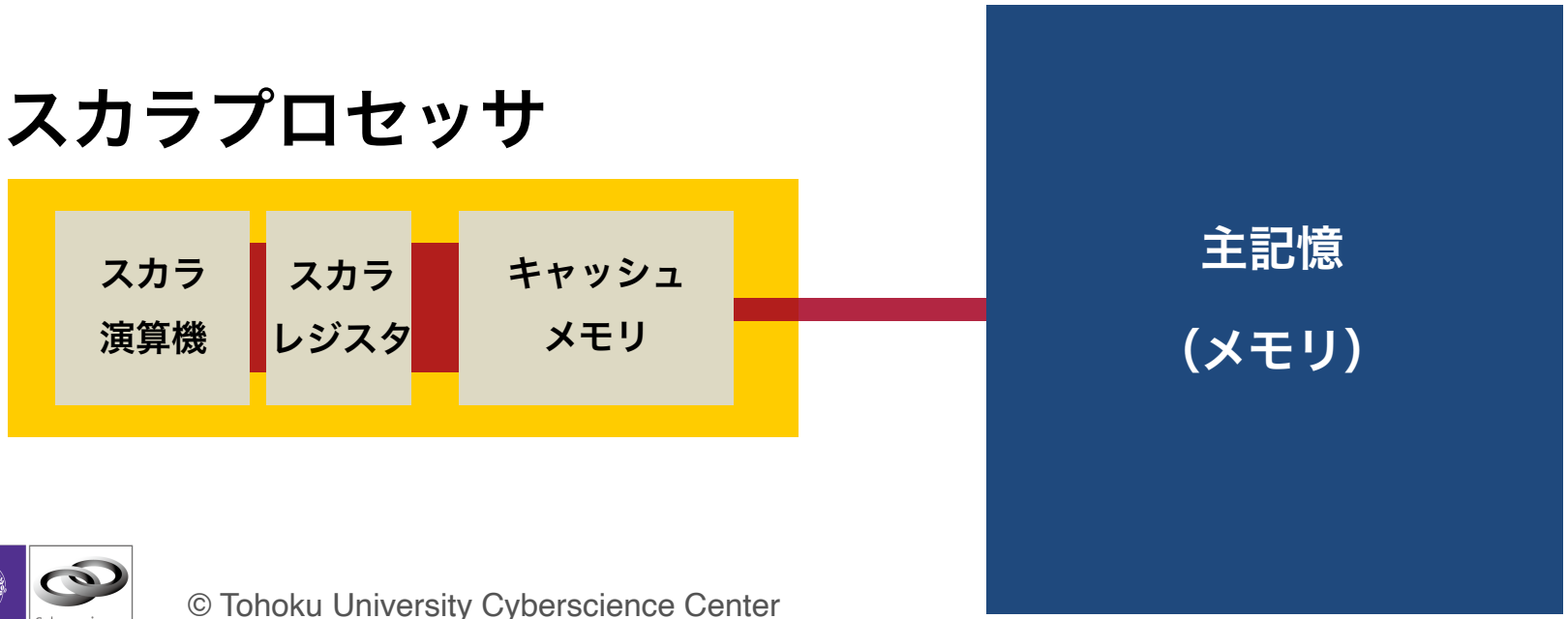
- 本来はコンピュータゲームに代表される、リアルタイム画像処理に特化した演算装置
- GPUのハードウェアを、より一般的な計算に活用
- A100(NVIDIA), INSTINCT(AMD)
- 映像出力端子を持たない専用製品や、深層学習ベースのAI向けに特化した演算器を搭載
- 汎用CPUとの組み合わせが必要

ベクトルプロセッサ



ベクトルプロセッサは
メモリ転送性能が高い

スカラプロセッサ

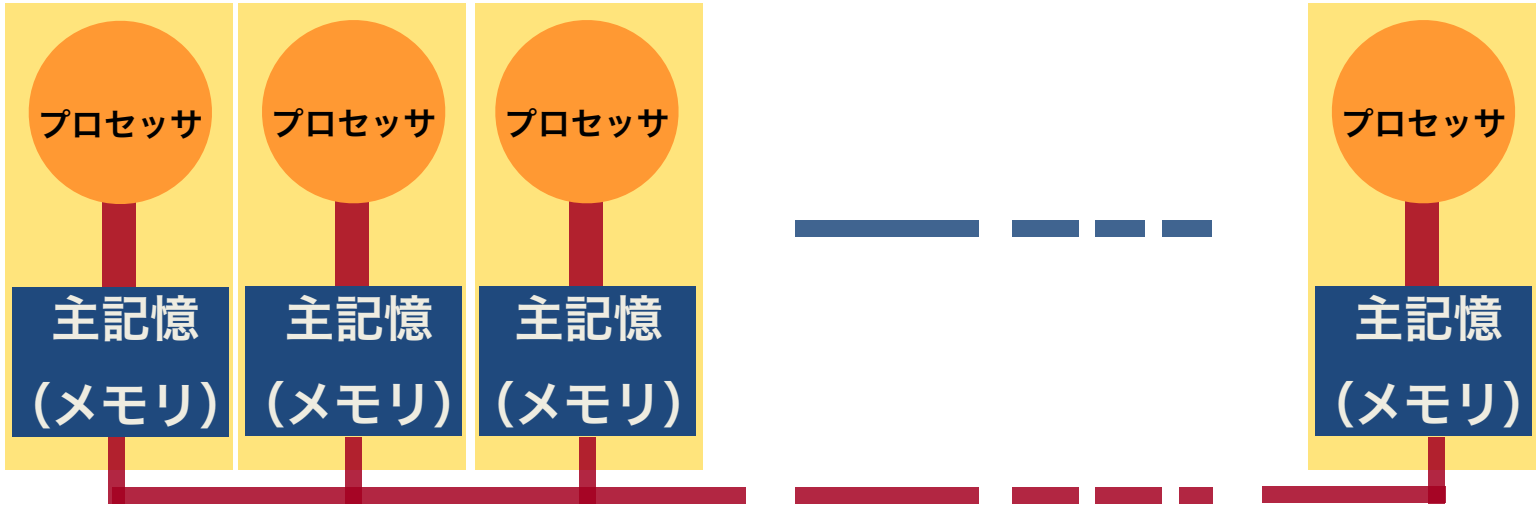


②-a. 共有メモリ型

- 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

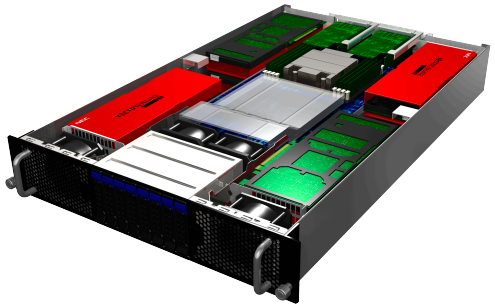
基本システム単位は 1**VH** ＋ 8**VE**

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（利用者ジョブは16コア、136GBまで）

【**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

・一部の量子化学分野のアプリもインストール済
  Quantum Espressoの一部アプリを**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）

・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

　RISTが整備する国プロアプリ

　他OSSなどもユーザ領域にインストール可能

LX 406Rz-2 4ノード

AOBA-A,CとAOBA-Bのどれを使うか？（1/2）

ハードウェア性能での比較

	AOBA-A,C (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-C (SX)	AOBA-B (LX)
利用**最大**単位	256VE	512VE	16ノード
コア数	2,048	**4,096**	2,048
理論演算性能 [TFLOPS]	627.2	**1,254.4**	65.5
メモリ容量 [TB]	12	**24**	4

AOBA-A,C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）のみ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

→ 1VE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

・それぞれのコンパイラでコンパイルし、実行時間を比較

・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）

AOBA-Cを選択

・実行までの待ち時間を短くしたい

※ 2023年7月末までの運用，以降はストレージへのアクセスも不可

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

実行キュー（1/2）

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

実行キュー（2/2）

クラウドサービスAOBA-C（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
sxc	1	72時間／720時間	1VEジョブ (VH を共用する)
	2～512		8VE 単位で確保 (VH を共用しない)
個別設定	契約VE数	720時間	占有利用

・AOBA-Aのジョブは、AOBA-A,B用のフロントエンドサーバから投入
・AOBA-Cのジョブは、AOBA-C用のフロントエンドサーバから投入

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　※AOBA-Bは売り切れ

・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，課題審査あり、負担金助成あり，応募期間あり（締切9月，3月頃）

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

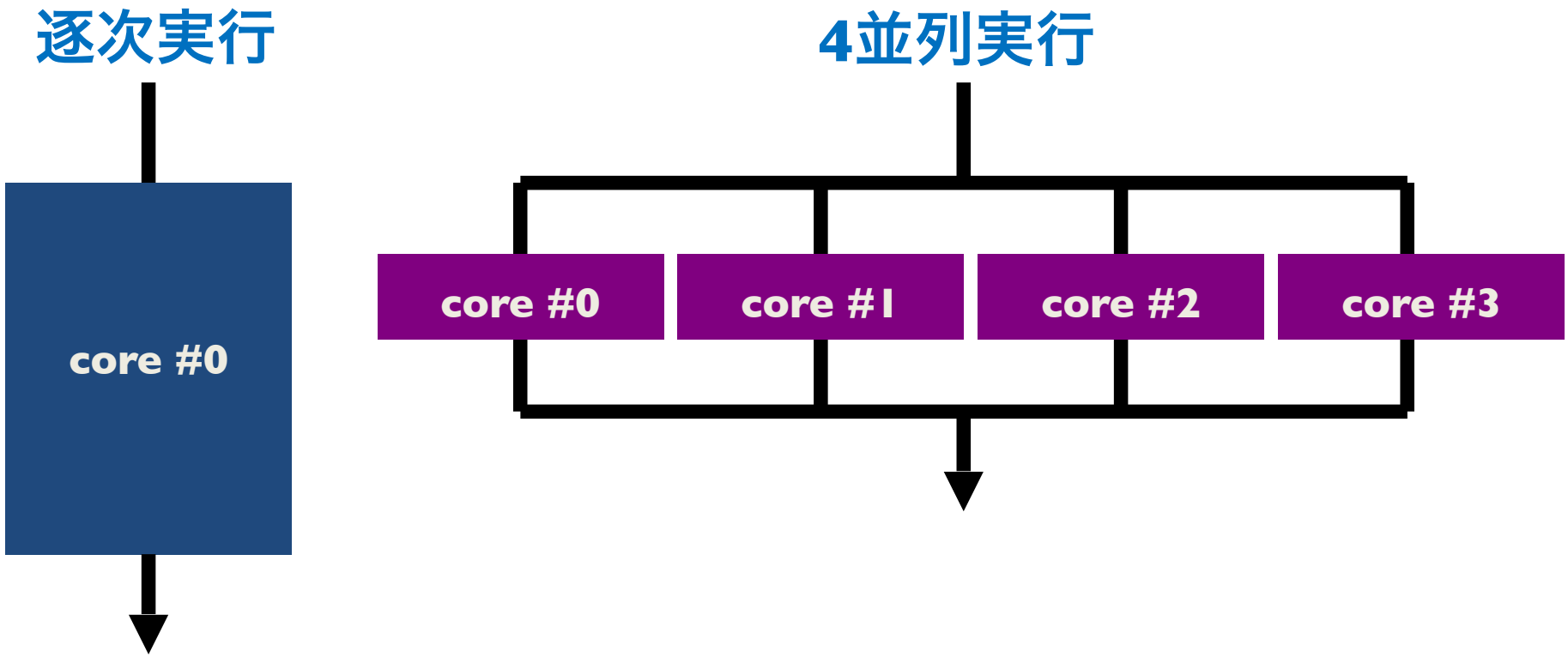
利用者支援　https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/support/ をご参照ください。

・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Zoom配信で実施

・利用相談
- □ 利用申請の方法，ログイン方法，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150〜200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-Aurora TSUBASAシステム（2020年度〜2022年度）ではベクトル高速化，MPI並列化を16件実施
  （平均約3.2倍）　（平均約21.5倍）

- 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



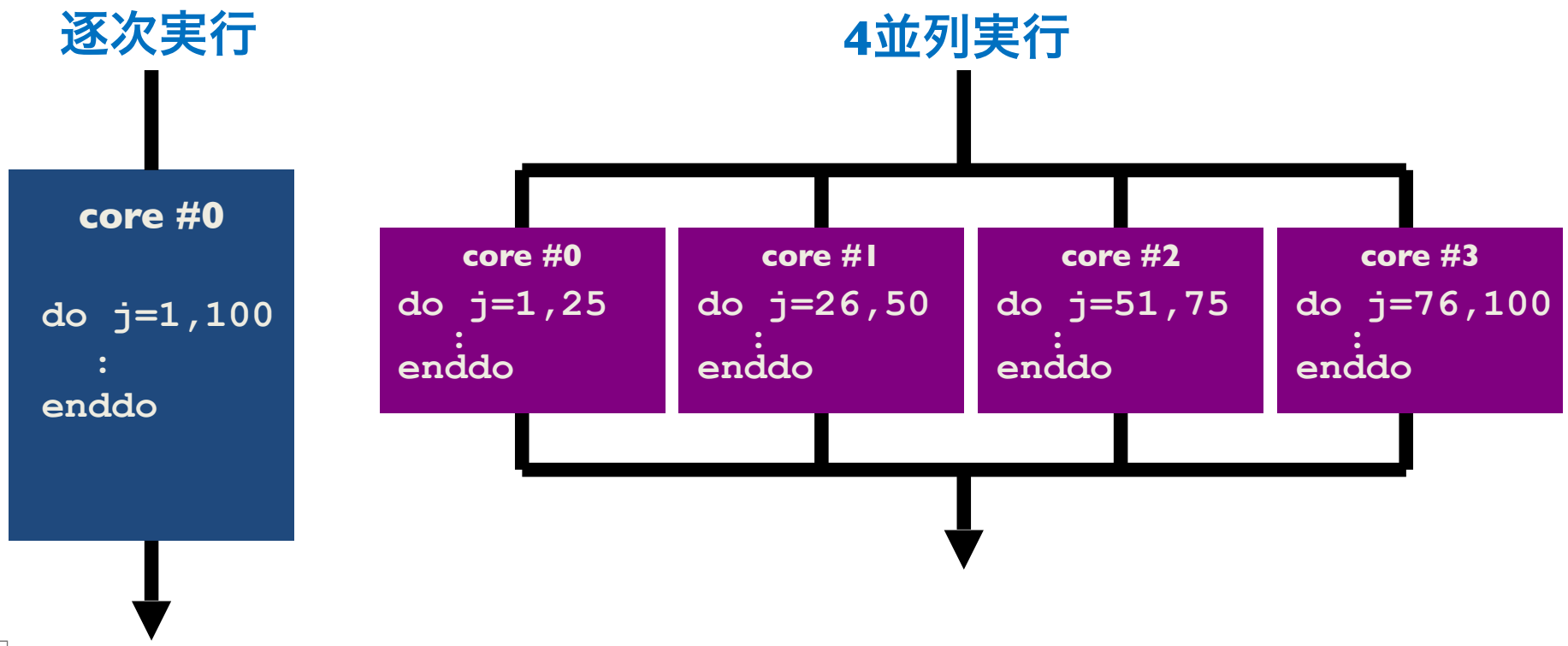
• 自動並列化の例

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

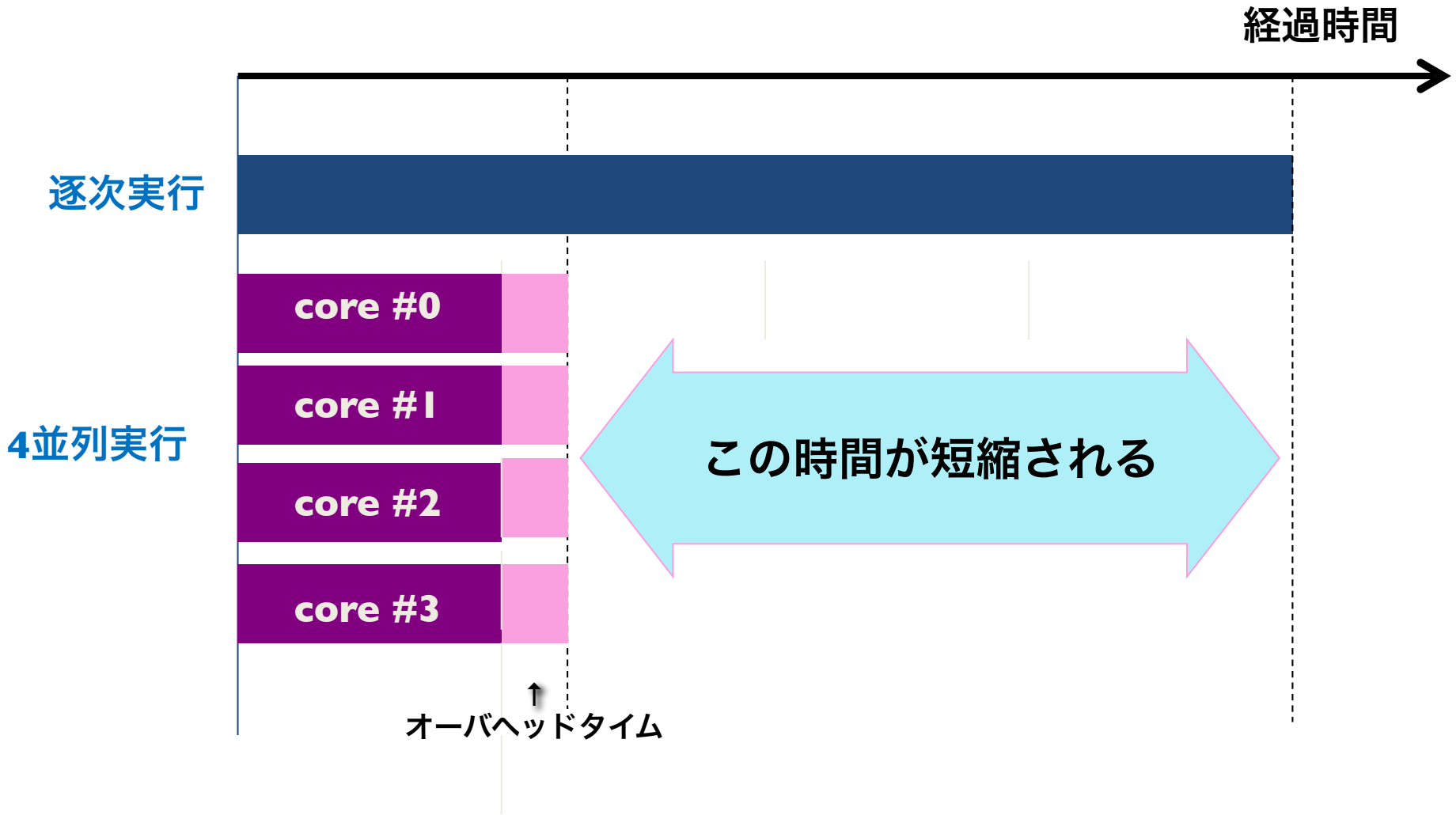
基本方針

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。

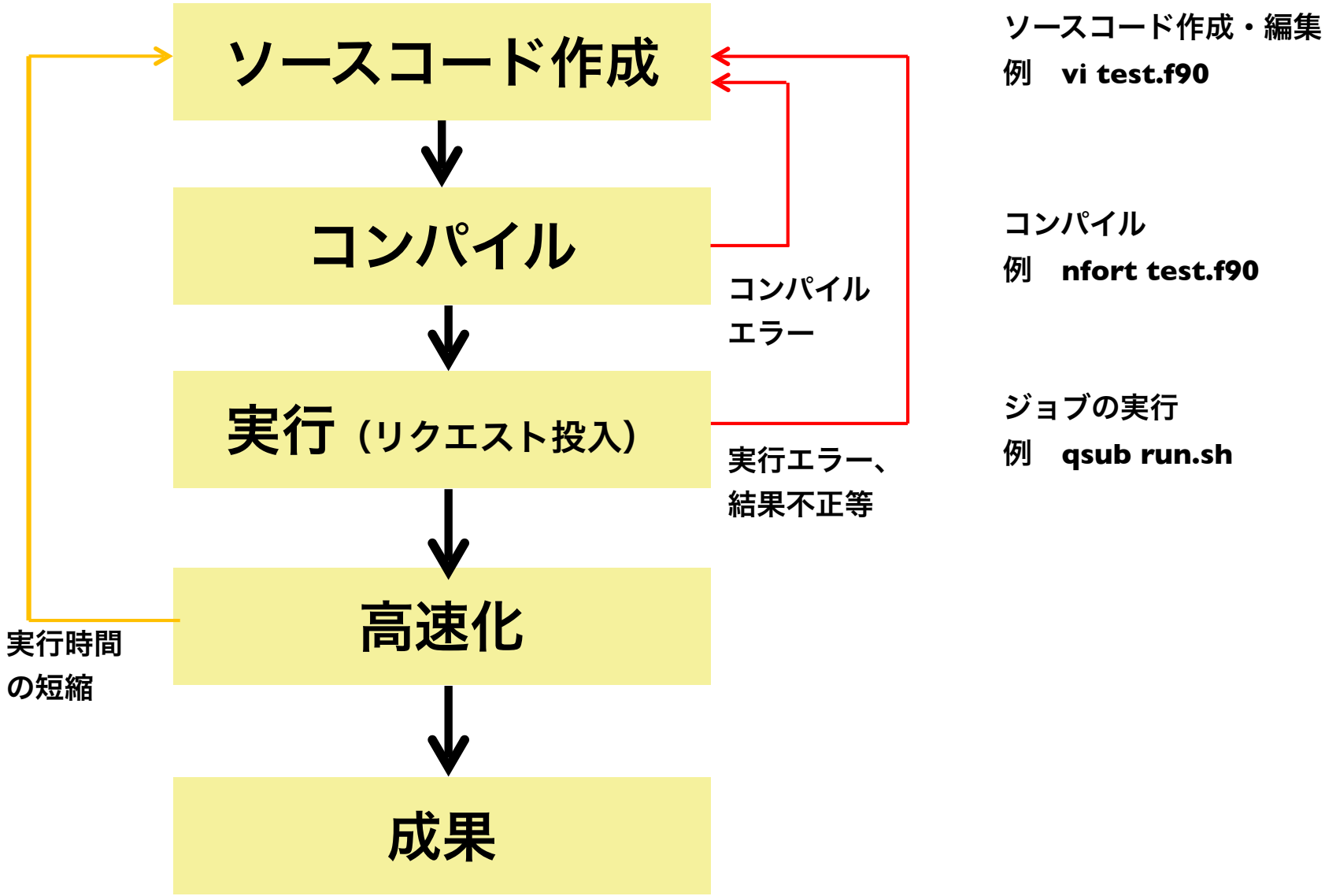
- 並列処理の特徴

	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**

プログラム開発の流れ



ジョブの実行方法

・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

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)=   5.1393758152283769E+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)                          :            0.571793
 User Time (sec)                          :            0.564301
 Vector Time (sec)                        :            0.563507
 Inst. Count                              :           698325691
 V. Inst. Count                           :           318832677
 V. Element Count                         :         81621164350
 V. Load Element Count                    :          5368709152
 FLOP Count                               :         65498251483
 MOPS                                     :       187271.718039
 MOPS (Real)                              :       184722.874918
 MFLOPS                                   :       116129.751073
 MFLOPS (Real)                            :       114549.178629
 A. V. Length                             :          255.999997
 V. Op. Ratio (%)                         :           99.640710
 L1 Cache Miss (sec)                      :            0.000299
 CPU Port Conf. (sec)                     :            0.000000
 V. Arith. Exec. (sec)                    :            0.495812
 V. Load Exec. (sec)                      :            0.067678
 VLD LLC Hit Element Ratio (%)            :            0.009778
 FMA Element Count                        :         23622320128
 Power Throttling (sec)                   :            0.000000
 Thermal Throttling (sec)                 :            0.000000
 Memory Size Used (MB)                    :        33342.000000
 Non Swappable Memory Size Used (MB)      :           96.000000

 Start Time (date)        :       Wed May 25 08:54:57 2022 JST
 End   Time (date)        :       Wed May 25 08:54:57 2022 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 が新しく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	0.304	—
OpenMP並列実行(8core)	nfort -fopenmp omp.f90	0.165	—
MPI並列実行 (1VE, 8core)	mpinfort mpi.f90	0.554	0.136
MPI並列実行 (8VE, 64core)	mpinfort mpi.f90	0.796	0.015

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, 128c)	mpiifort mpi.f90 -march=core-avx2	13.303	1.232
MPI並列実行(2node, 256c)	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 /opt/oneapi/setvars.sh intel64 コマンドの実行が必要

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$ **ifx** コンパイルオプション Fortranソースファイル名

front$ **icx** コンパイルオプション Cソースファイル名

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

・OpenMP並列化

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

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

front$ **icpx -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

【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 -venode -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 -venode -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
```

【逐次実行】

```
#!/bin/sh                          #シェルを指定
#PBS -q sxc --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 sxc --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 sxc --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 -venode -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 sxc --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 -venode -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
```