大規模可視化システム UV2000 利用マニュアル 2016.3.7 版

(ni

名古屋大学 情報基盤センター

はじめに

本書『大規模可視化システム UV2000 利用者マニュアル』は、名古屋大学情報基盤セン ターの利用マニュアルです。

ご不明な点やご質問がございましたら、次の連絡先にお問い合わせください。

【問い合わせ先】 名古屋大学 情報連携統括本部 情報推進部 情報基盤共同利用担当 (情報基盤センター)

メール: kyodo@itc.nagoya-u.ac.jp

目次

はじめに		2
日次		2
日八		
1. 大規	Ⅰ模可視化システム UV2000 構成概要	5
1.1.	システム構成	5
1.2.	高精細可視化システム	6
1.2.1	1. ハードウェア構成	6
1.2.2	2. ソフトウェア構成	9
2. シス	、テム利用環境	
2.1.	ログイン環境	10
2.1.1	L. UV システムへのログイン/ログアウト方法	
2.2.	TSS 環境	12
2.3.	ファイルシステムの利用	14
2.4.	ファイル転送の利用	15
2.4.1	L. PC/ワークステーションから UV へのファイル転送方法	15
2.4.2	2. uv から PC/ワークステーションへのファイル転送方法	15
2.4.3	3. openssh の多段 SSH を使用したファイル転送方法	16
3. 開発	8環境	
3.1.	Intel コンパイラの利用	18
3.1.1	コンパイル/リンクの概要	
3.1.2	2. サンプルプログラム	
3.1.3	3. 環境設定	
3.2.	Fortran コンパイル / リンク / 実行方法	19
3.2.1	L. 逐次 Fortran プログラム (シリアル)	
3.2.2	2. スレッド並列プログラム (OpenMP)	
3.2.3	3. MPI 並列プログラム	
3.2.4	4. MPI +OpenMP ハイブリッド並列プログラム	
3.3.	Cコンパイル / リンク / 実行方法	20
3.3.1	L. 逐次 C プログラム (シリアル)	
3.3.2	2. スレッド並列プロクラム (OpenMP)	21
3.3.3	3. MPI 亚列フロクラム	
3.3.4	4. MPI+OpenMP ハイフリッド亚列フロクラム	
3.4.	C++コノハ1 ル / リノソ / 美仃万法	
3.4.1	L. 珍八 L++ノロソフム (ンリアル)	
3.4.2	2. ヘレット並迎ノロンノム (Upenivi?)	
3.4.3). IVIFI 亚ッテノロノノム	

	3.4.4	4.	MPI +OpenMP ハイブリッド並列プログラム	22
3.	5.	dpla	ce/omplace コマンドの利用	23
	3.5.2	1.	逐次プログラム(シリアル)	23
	3.5.2	2.	スレッド並列プログラム(OpenMP)	23
	3.5.3	3.	MPI 並列プログラム	23
	3.5.4	4.	MPI + OpenMP ハイブリッド並列プログラム	23
	3.5.	5.	dplace や omplace コマンドで配置するコアの指定方法	23
3	6.	数値	計算ライブラリの利用	25
	3.6.2	1.	Intel Math Kernel Library (MKL) 概要	25
	3.6.2	2.	逐次 C++プログラム (シリアル)	26
	3.6.3	3.	スレッド並列プログラム (OpenMP)	26
3	7.	Intel	コンパイラのオプション	28
	3.7.2	1.	最適化レベルオプション	29
	3.7.2	2.	最適化に関するオプション	30
	3.7.3	3.	特定のプロセッサ向けの最適化オプション	31
	3.7.4	4.	プロシージャ間解析の最適化	32
	3.7.	5.	浮動小数点演算に関するオプション	32
	3.7.0	6.	スレッド並列化オプション【OpenMP】	32
	3.7.	7.	スレッド並列化オプション【自動並列化】	33
	3.7.8	8.	MPI 並列化オプション	33
	3.7.9	9.	その他のオプション	33
4.	ジョ	ョブヨ	≩行	34
	1.	ジョ	ブシステム概要	34
4	2.	+1	一構成	34
4	3.	・ージョ	ブ投入方法	35
-	4.3.1	1.	· ·······························	35
	4.3.2	2.	スレッド並列プログラム (OpenMP)	35
	4.3.3	3.	MPI 並列プログラム	36
	4.3.4	4.		37
	4.3.	5.	大規模メモリプログラム (シリアル)	37
	4.3.0	6.	。 会話型ジョブ	38
	4.3.7	7.	ジョブ投入が受け付けられない場合	39
4	4.	ジョ	ブ状態表示	40
		1	actat コフンドに F ろジョブのP 能主テ	10
	4.4.1	L .	qstat コペントによるノコノの状態表示	40
	4.4.: 4.4.:	1. 2.	qstat コマンドによるションの状態表示ndstat コマンドによるジョブの状態表示	40 41
4.	4.4.: 4.4.: 5.	^{1.} 2. ジョ	qstat コマンドによるショブの状態表示 ndstat コマンドによるジョブの状態表示 ブキャンセル方法	40 41 42
4. 5.	4.4.: 4.4.: . 5. 可視	1. 2. ジョ 見化環	gstat コマンドによるジョブの状態表示 ndstat コマンドによるジョブの状態表示 ブキャンセル方法	40 41 42 43
4 5. 6.	4.4.: 4.4.: 5. 可視 可裙	1. 2. ジョ 見化環	gstat コマンドによるジョブの状態表示 ndstat コマンドによるジョブの状態表示 プキャンセル方法 境	40 41 42 43 43

1. 大規模可視化システム UV2000 構成概要

1.1. システム構成

本システムは、スーパーコンピュータから得られる大規模シミュレーションデータの後 処理・可視化・コンテンツ生成を行うためのシステムで、大規模メモリを使った短時間の 計算にも利用できます。

FX システム、CX システムとのシステムの関係を下記に示します。



本システムは、高精細可視化システム、ストレージシステムおよびバーチャルリアリテ ィシステムから構成されます。また、スパコンシステムで導入した円偏光立体視システム (150 インチスクリーン,プロジェクター)を使ったと組み合わせて利用することもできま す。

E mil NICE (学内LAN) 1000base-10Gスイッチ -10Gbase-SR x4 10Gbase-SR 10Gbase-SP 10Gbase-S 10Ghase-5 高精細可視化システム 高性能可視化システム オンサイト利用装置 高精細ディスプレイシステム 居置型HMDシステム 携帯 MDシステム Samsung UD46C 16面タイルドディスプレイ (4x4) 46型LCD HMD機器 ファイル制御装置 SGI Asterism IDX416 CANON MREAL SGI UV 2000 2nodes Intel Xeon 2.6GHz 8Cores 32GB Mem NVIDIA Quadro K600 MD機器 NVIS nVisor ST50 ム型 Z = / CANON HM-A1 Sony HMZ-T2 3式 24 TFLOPS / 20 TB MEM 3 racks / 1 nodes Intel Xean 2.4 GHz 1280 Cores 2018 MEM Enhanced Hypercube Topology ディスプレイ HMD機器 IB 4xFDR x4 **制御装置NotePC** Intel Core i7 2.9 GHz 4 Cores 32GB MEM NVIDIA Quadro K3000M 制御装置PC NVIS nVisor ST50 Sony HMZ-T2 3式 Intel Xeon 2.9 GHz 8 Cores 64GB MEM NVIDIA Quadro 6000 制御装置PC Intel Xeon 2.9 GHz 8 Cores 64GB MEM NVIDIA Quadro 6000 物理容量:3.36 PB 実効容量:2.39 PB InfiniteStorage 17000 84bay 磁気ディスクアレイ装置 バーチャルリアリティシステム ストレージシステム

各システム構成の概要を下記に示します。

UV システム 利用マニュアル 5

1.2. 高精細可視化システム

1.2.1. ハードウェア構成

① ハードウェア仕様

TSS 環境、バッチ環境および可視化環境を提供する SGI UV 2000 システムの大きな特徴は、

② 1システムで1,280 コア、20TBメモリを有する共有メモリ機

③ 高精細グラフィックス NVIDIA K5000 を 8 基搭載

であることです。

主なハードウェア仕様は、下記の通りです。

システム名		SGI UV 2000	備考
/-	·ド数	1	
	TFLOPS	24 TFLOPS	
CDU	CPU タイプ	Intel Xeon E5 4650 2.4GHz 8Cores	
CPU	コア数	1, 280	8 コア * 160 ソケット
	L3 キャッシュ	20MB	8コアで共有
	MEM タイプ	DDR3-1600 16GiB * 1,280	8 Banks * 160 ソケット
MEM	主記憶容量	20T i B	
	転送速度	51.2 GB/s	1 ソケットあたり
ノンカーコナクト	ネットワーク	NUMALink 6 ネットワーク	1リンクあたり双方向 6.7 GB/s
インダーコネクト	トポロジー	Enhanced Hypercube topology	
	名称	NVIDIA Quadro K5000 * 8基	8K スクリーン用途に 4GPU 遠隔可想化田途に 4GPU
グラフィックス		1 536	Sen ちんしい Sen Circle
	VRAM 容量	GDDR 4GB	1GPU あたり
	装置名	SGI InfiniteStorage 17000	
7.1	RAID レベル	RAID6	
	ディスク総容量	2. 4PB	
	インターフェース	InfiniBand 4xFDR	IB による DAS 接続
ネットワーク		10GbE NIC dual port * 2	10GbE * 4 による bonding 接続

④ システムコンポーネント

システムを構成するコンポーネントは下記の通りです。



UV 2000 は 42 U のトールラック 3 ラックより構成されます。このシステムには 10 基の IRU というユニットを搭載しています。

1IRU は 8 計算ブレードが入り、1 計算ブレードには 1CPU が搭載された計算ノードが上 下で 2 枚搭載されています。したがって、1IRU には合計 16 計算ノード、16CPU を搭載さ れ、これが 10IRU では 160CPU になります。

⑤ NUMALink 6 インターコネクト

計算ノード間をつなぐインターコネクトは NUMALink 6 という独自のケーブルで接続し、 全てのプロセッサが全てのメモリに直接アクセスが可能です。1 リンクあたりの双方向通 信性能は 6.7GB/s です。 インターコネクトのトポロジーは Enhanced Hypercube です。 10IRU における Enhanced Hypercube のトポロジーを下記に示します。



⑥ ストレージ装置

外部ストレージ装置として、総容量 2.4PB を有します。この装置は InfiniBand 4xFDR で DAS 接続し、高速な IO 性能を有します。

UV 2000 と外部ストレージ装置のストレージ接続構成を下記に示します。

UV システム 利用マニュアル 7



⑦ 16 面タイルドディスプレイ

UV 2000 のディスプレイとして、縦4面、横4面の合計 16 台のタイルドディスプレイ を有します。16 台の合計解像度は 7680 x 4320 画素 の 8K 解像度になります。

UV 2000 は NVIDIA K5000 を 8 枚有し、そのうち GPU 4 枚を使って 8K 解像度の映像を生成することができます。残りの GPU 4 枚は、遠隔可視化システムで利用します。

UV 2000 は、新館 3F に設置され、16 面タイルドディスプレイは新館 1F に設置されてい ます。映像信号及びキーボード、マウスは光ケーブルを敷設し延長しています。 映像信号の概要図を下記に示します。



1.2.2. ソフトウェア構成

UV システムのソフトウェア構成を下記に示します。

	• • • • •
システム名	SGI UV 2000
OS	SuSE Linux Enterprise Server 11
開発環境	Intel Composer XE 14.0.1
数値計算ライブラリ	Intel MKL 11.1
MPI 通信ライブラリ	SGI MPT 2.08
バッチシステム	PBS Professional 12.2
汎用可視化ソフトウェア	AVS Express Developer AVS Express PCE Enshight DR Paraview IDL ENVI ffmpeg ffplay osgviewer vmd <u>(Visual Molecular Dynamics)</u>
遠隔可視化ソフトウェア	SGI NICE DCV 2013.0
レイトレーシングソフトウェア	POV-Ray (SMP 対応版) 3.7.0
フーリエ変換ライブラリ	FFTW 3.3
入出カライブラリ	HDF5 1.8.2 netcdf 4.2.1

2. システム利用環境

2.1. ログイン環境

2.1.1. UV システムへのログイン/ログアウト方法

UV システムは NICE(学内ネットワーク)には直接接続していないため、いったんログ インのゲートウェイになっている フロントエンドサーバ (uvf)へ SSH でログイン後、uv へ ssh で接続します。

uvf へのログインは、スパコンの公開鍵認証でスパコンのログインノートと同様に PuTTY や Tera Term などのターミナルソフトを使ってログインします。

ホスト名(FQDN)	サービス	ssh 認証方式	アクセス用途
uvf.cc.nagoya-u.ac.jp	ssh	公開鍵認証	NICE から UV へのログインゲートウェイ
uv	ssh	パスワード認証	uvf から uv への ssh ログイン

uvf から uv への ssh ログインはパスワード認証で、HPC ポータルにログインする際に使用するパスワードを入力します。

[wsuser@workstation ~]\$ ssh uvf.cc.nagoya-u.ac.jp	uvf に	ssh でログイン
Enter passphrase for key '/home/wsuser/.ssh/id_rsa';	←	公開鍵パスフレーズを入力
[scuser@uvf ~]\$ ssh uv	\leftarrow	uv に ssh でログイン
Password:	\leftarrow	パスワード認証(passphrase でない)
Last login: Thu May 8 17:55:09 2014 from uvf.cc.nagoya-u.	ac.jp	

Nagoya University Mixed Reality Large-scale Visualization System

υv

SGI UV 2000 160CPU/1280core 20TB Memory

[scuser@uv ~]\$

ログアウトをする場合は、"exit" もしくは "logout"コマンドを実行します。

[scuser@uv ~]\$ logout
[scuser@uvf ~]\$ logout
[wsuser@workstation ~]\$

openssh の ssh クライアントを利用している場合、下記のようにワークステーションや PC 端末のホームディレクトリ配下に"~/.ssh/config"設定ファイルを作成すると、uv へのロ グインを直接行うことができます。

UV システム 利用マニュアル 10

【ワークステーション、PC 端末における"~/.ssh/config"ファイルの内容】 Host uv HostName uv HostKeyAlias nagoya-uv Port 22 User scuser ProxyCommand ssh uvf nc %h %p Host uvf HostName uvf.cc.nagoya-u.ac.jp Port 22 User scuser IdentityFile ~/.ssh/id_rsa

上記設定ファイルを作成しておくと、ワークステーションや PC 端末より"ssh uv" でロ グインすることが可能です。

[wsuser@workstation ~]\$ **ssh uv** Enter passphrase for key '/home/wsuser/.ssh/id_rsa'; ← 公開鍵パスフレーズを入力 Password: ← パスワード認証 (passphrase でない) Last login: Thu May 8 17:55:09 2014 from uvf.cc.nagoya-u.ac.jp

Nagoya University Mixed Reality Large-scale Visualization System

υv

SGI UV 2000 160CPU/1280core 20TB Memory

[scuser@uv ~]\$

ログアウトは "logout"もしくは"exit"コマンドを実行し、抜けてください。

[scuser@uv ~]\$ **logout** connection to uv closed. Killed by signal 1. [wsuser@workstation ~]\$

2.2. TSS 環境

⑧ シェル環境

デフォルトのシェルは bash です。

[scuser@uv ~]\$ echo \$SHELL /bin/bash

⑨ 言語環境

言語環境はCに設定されています。

[scuser@uv ~]\$ echo \$LANG C

日本語環境に変更するには

[scuser@uv ~]\$ export LANG=ja_JP.UTF-8
[scuser@uv ~]\$ echo \$LANG
ja_JP.UTF-8

10 プロセス制限

UV システムにログインした際のプロセス制限は下記の通りです。 ソフトリミットは ulimit コマンドで確認できます。

[scuser@uv ~]\$ ulimi	t-a	
core file size	(blocks, -c)	1
data seg size	(kbytes, -d)	unlimited
scheduling priority	(-e)	0
file size	(blocks, -f)	unlimited
pending signals	(-i)	160279708
max locked memory	(kbytes, -I)	64
max memory size	(kbytes, -m)	17438498592
open files	(-n)	1024
pipe size	(512 bytes, -p)	8
POSIX message queues	(bytes, -q)	819200
real-time priority	(-r)	0
stack size	(kbytes, -s)	8192
cpu time	(seconds, -t)	43200
max user processes	(–u)	160279708
virtual memory	(kbytes, -v)	16520076240
file locks	(-x)	unlimited

ハードリミットは "ulimit -H"で確認できます。

[scuser@uv ~]\$ ulimi	t -aH	
core file size	(blocks, -c)	unlimited
data seg size	(kbytes, -d)	unlimited
scheduling priority	(-e)	0
file size	(blocks, -f)	unlimited
pending signals	(-i)	160279708
max locked memory	(kbytes, -I)	256
max memory size	(kbytes, -m)	unlimited
open files	(-n)	8192
pipe size	(512 bytes, -p)	8
POSIX message queues	(bytes, -q)	819200
real-time priority	(-r)	0
stack size	(kbytes, -s)	unlimited
cpu time	(seconds, -t)	unlimited
max user processes	(–u)	160279708
virtual memory	(kbytes, -v)	unlimited
file locks	(-x)	unlimited

2.3. ファイルシステムの利用

UV システムで利用可能なファイルシステムとして、FX システムや CX システムと共通 の home 領域、large 領域および UV 専用の領域として data 領域を有します。

ユーザが利用可能と割り当てられたファイルシステムを下記に示します。

ファイルシステム		総容量	備考
home	NFS		スパコンシステム(システム共通)
large	NFS		スパコンシステム
			大容量ファイルシステム
data	vfc	2 400	UV 専用ファイルシステム
data	XTS	XTS 2.4PB	/data/usr/GROUP/USER を用意

UV の専用領域である data 領域で利用可能なディレクトリは下記コマンドを実行することで確認することができます。

[scuser@uv:~]\$ ls -ld /data/usr/`id -gn`/`id -un` drwxr-xr-x 4 scuser 35 May 18 22:01 /data/usr/scgroup/scuser/

data 領域のディスク使用状況を確認する方法は、下記コマンドを実行します。

[scuser@uv:~] \$ /usr/sbin/xfs_quota -c 'quota -u scuser' /data Disk quotas for User scuser (XXXXX)						
Filesystem	Blocks	Quota	Limit	Warn/Time	Mounted on	
/dev/lxvm/data	176	0	0	00 []] /data	

UV システムからスパコンのファイルシステム(/home および/large)はアクセスできま すが、アクセス速度が遅いため高速に利用する場合は、ログインノード(uvf)上で/data ファイルシステムにファイル転送してからご利用ください。

2.4. ファイル転送の利用

2.4.1. PC/ワークステーションから UV へのファイル転送方法

PC やワークステーションから uv へのファイル転送する場合、

- ① PC/WS からuvf へ scp によるファイル転送
- ⑫ uvf からuv へ scp によるファイル転送
- ⑬ uvf に格納した中間ファイルの削除

という手続きを行ってください。

【1. PC/WSからuvfへ ファイル名"testfi [wsuser@workstation ~]\$ scp testfile so Enter passphrase for key '/home/wsuser/ testfile	le"をつ cuser@u .ssh/id 100%	アイル v f.cc _rsa' 14KB	✓転送】 •nagoya-u.; ; ← 14.5KB/s	a c.jp:/tmp 公開鍵パスフレーズを入力 00:00
【2. uvfからuvへ ファイル名" testfile"	をファ-	イル転	送】 ac in	
Enter passphrase for key '/home/wsuser/	. ssh/id	_rsa'	; ←	公開鍵パスフレーズを入力
[scuser@uvf:~]\$ scp /tmp/testfile uv:	/tmp			
Password:			\leftarrow	パスワード認証(passphrase でない)
testfile	100%	14KB	14.5KB/s	00:00
【3. uvfに格納したファイル名"testfile"	を削除]		
[scuser@uvf:~] \$ rm /tmp/testfile				

2.4.2. uv から PC/ワークステーションへのファイル転送方法 uv から PC/WS へのファイル転送する場合、

- ⑭ uv から uvf へ scp によるファイル転送
- ¹⁵ uvf から PC/WS へ scp によるファイル転送
- 16 uvf に格納した中間ファイルの削除

という手続きを行ってください。

【1. uv から uvf へ ファイル名" testfile"をファイル転送しログアウト】 [scuser@uvf:~]\$ scp uv:/tmp/testfile /tmp Password: ← パスワード認証 (passphrase でない) testfile 100% 14KB 14.5KB/s 00:00 [scuser@uvf:~]\$ logout Connection to uvf.cc.nagoya-u.ac.jp closed. 【2. uvf から PC/WS へ ファイル名"testfile"をファイル転送】 [wsuser@workstation ~]\$ scp scuser@uf.cc.nagoya-u.ac.jp:/tmp/testfile /tmp Enter passphrase for key '/home/wsuser/.ssh/id_rsa'; ← 公開鍵パスフレーズを入力 testfile 100% 14KB 14.5KB/s 00:00 【3. uvfに再度ログインし、格納したファイル名"testfile"を削除しログアウト】 [wsuser@workstation ~]\$ ssh scuser@uvf.cc.nagoya-u.ac.jp Enter passphrase for key '/home/wsuser/.ssh/id_rsa'; ―― ← 公開鍵パスフレーズを入力 [scuser@uvf:~]\$ rm /tmp/testfile [scuser@uvf:~]\$ logout [wsuser@workstation ~]\$

2.4.3. openssh の多段 SSH を使用したファイル転送方法

openssh の ssh クライアントを利用している場合、下記のようにワークステーションや PC 端末のホームディレクトリ配下に"~/.ssh/config"設定ファイルを作成すると、uvf を介さ ずファイル転送を直接行うことができます。

【ワークステーション、PC 端末における"~/.ssh/config"ファイルの内容】 Host uv HostName uv HostKeyAlias nagoya-uv Port 22 User scuser ProxyCommand ssh uvf nc %h %p Host uvf HostName uvf.cc.nagoya-u.ac.jp Port 22 User scuser IdentityFile ~/.ssh/id_rsa

上記設定ファイルを作成しておくと、ワークステーションや PC 端末より uvf に中間フ ァイルを作成せずにファイル転送することが可能です。 PC やワークステーションから uv ヘファイル転送を行う場合、下記のような操作になり ます。

[wsuser@workstation ~]\$ scp testfile uv:/tmp Enter passphrase for key '/home/wsuser/.ssh/id_rsa'; ← 公開鍵パスフレーズを入力 Password: ← パスワード認証 (passphrase でない) testfile 100% 14KB 14.5KB/s 00:00 Killed by signal 1.

また、uvから PC やワークステーションへファイル転送を行う場合、下記のような操作 になります。

[wsuser@workstation ~]\$ scp uv:/tmp/tes	tfile ,	/tmp		
Enter passphrase for key '/home/wsuser/.	ssh/id_	_rsa'	; ~	公開鍵パスフレーズを入力
Password:			←	パスワード認証(passphrase でない)
testfile	100%	14KB	14.5KB/s	00:00
Killed by signal 1.				

3. 開発環境

UV システムで利用できる開発環境として、コンパイラは Intel コンパイラ、GNU コンパ イラ、数値計算ライブラリは Intel Math Kernel Library (MKL)、MPI 通信ライブラリは SGI MPI Toolkit (MPT)が利用できます。

開発環境		uvf	uv
	intel コンパイラ	×	
コンパイラ	富士通コンパイラ	×	×
	GNU コンパイラ	0	0
数値計算ライブラリ	Intel MKL	×	0
	富士通 SSL II	×	×
мы 海信ニノブニリ	SGI MPT	×	0
	Intel MPI	×	×

3.1. Intel コンパイラの利用

3.1.1. コンパイル/リンクの概要

コンパイル / リンクの書式とコマンド一覧は、以下の通りです。

[scuser@uv:~]\$ command [options] sourcefile [...]

コンパイルには言語に応じて以下のコマンドを利用します。

	言語処理系	コマンド名	実行例
Fortran	Fortran 77, 90, 95, 2003	ifort	\$ ifort [options] program.f
С	ISO 標準 C	icc	\$ icc [options] program.c
C++	ISO 標準 C++	ісрс	\$ icpc [options] program.cpp

[options] には、最適化オプション、並列化オプション、ライブラリのリンクオプション、 その他のコンパイラオプションが入ります。

主なコンパイラオプションは、『3.6 Intel コンパイラのオプション』を参考ください。

Intel コンパイラおよび数値計算ライブラリ Intel MKL (Math Kernel Library)環境は下記にインストールされています。

⑪ uv:/opt/intel 配下

3.1.2. サンプルプログラム

Intel コンパイラには、サンプルプログラムが付属しています。

- ①8 Fortran/C/C++
- ① /opt/intel/composerxe/Samples
- 20 Intel MKL
- 21 /opt/intel/composerxe/mkl/examples

3.1.3. 環境設定

UV にログインすると、Intel コンパイラの環境が設定されています。 設定されている環境設定は、以下の通りです。

【Intel コンパイラ及び数値計算ライブラリ MKL 環境設定】 [scuser@uv:~]\$ cat /etc/profile.d/intel_compiler.csh source /opt/intel/bin/compilervars.csh intel64 [scuser@uv:~]\$ cat /etc/profile.d/intel_compiler.sh source /opt/intel/bin/compilervars.sh intel64

【MPI通信ライブラリ MPT 環境設定】 [scuser@uv:~]\$ cat /etc/profile.d/mpivars.csh module use /usr/share/modules/modulefiles module load mpt/2.08 [scuser@uv:~]\$ cat /etc/profile.d/mpivars.sh module use /usr/share/modules/modulefiles module load mpt/2.08

3.2. Fortran コンパイル / リンク / 実行方法

3.2.1. 逐次 Fortran プログラム (シリアル)

【コンパイル】 \$ ifort -O3 -xAVX prog.f 【実行】 \$ dplace ./a.out 3.2.2. スレッド並列プログラム (OpenMP)

```
【コンパイル】
$ ifort -03 -xAVX -openmp -openmp-report1 prog_omp.f
【環境設定】
$ export KMP_AFFINITY=disabled (Intel compiler のバインド機能の無効化)
$ export OMP_NUM_THREADS=4 (スレッド数指定)
【実行】
$ dplace -x2 ./a.out
```

```
【コンパイル】
$ ifort -O3 -xAVX prog_mpi.f -lmpi (-lmpi で SGI MPT をリンク)
【実行】
$ mpirun -np 4 dplace -s1 ./a.out
```

3.2.3. MPI 並列プログラム

3.2.4. MPI +OpenMP ハイブリッド並列プログラム

```
【コンパイル】
$ ifort -03 -xAVX -openmp -openmp-report1 prog_hyb.f -lmpi
【環境設定】
$ export KMP_AFFINITY=disabled (Intel compiler のバインド機能の無効化)
$ export OMP_NUM_THREADS=4 (スレッド数指定)
【実行】
$ mpirun -np 4 omplace -nt ${OMP_NUM_THREADS}./a.out
```

3.3. Cコンパイル / リンク / 実行方法

3.3.1. 逐次 C プログラム (シリアル)

```
【コンパイル】
$ icc -O3 -xAVX prog.c
【実行】
$ dplace ./a.out
```

```
【コンパイル】
$ icc -03 -xAVX -openmp -openmp-report1 prog_omp.c
【環境設定】
$ export KMP_AFFINITY=disabled (Intel compiler のバインド機能の無効化)
$ export OMP_NUM_THREADS=4 (スレッド数指定)
【実行】
$ dplace -x2 ./a.out
```

3.3.3. MPI 並列プログラム

【コンパイル】 \$ icc -O3 -xAVX prog_mpi.c -lmpi (-lmpi で SGI MPT をリンク) 【実行】 \$ mpirun -np 4 dplace -s1 ./a.out

3.3.4. MPI + Open MP ハイブリッド並列プログラム

```
【コンパイル】

$ icc -03 -xAVX -openmp -openmp-report1 prog_hyb.c -lmpi

【環境設定】

$ export KMP_AFFINITY=disabled (Intel compiler のバインド機能の無効化)

$ export OMP_NUM_THREADS=4 (スレッド数指定)

【実行】

$ mpirun -np 4 omplace -nt ${OMP_NUM_THREADS}./a.out
```

3.4. C++コンパイル / リンク / 実行方法

3.4.1. 逐次 C++プログラム (シリアル)

```
【コンパイル】
$ icpc -O3 -xAVX prog.cpp
【実行】
$ dplace ./a.out
```

3.4.2. スレッド並列プログラム (OpenMP)

```
【コンパイル】

$ icpc -03 -xAVX -openmp -openmp-report1 prog_omp.cpp

【環境設定】

$ export KMP_AFFINITY=disabled (Intel compiler のバインド機能の無効化)

$ export OMP_NUM_THREADS=4 (スレッド数指定)

【実行】

$ dplace -x2 ./a.out
```

3.4.3. MPI 並列プログラム

```
【コンパイル】
$ icpc -O3 -xAVX prog_mpi.cpp -lmpi (-lmpiで SGI MPT をリンク)
【実行】
$ mpirun -np 4 dplace -s1 ./a.out
```

3.4.4. MPI +OpenMP ハイブリッド並列プログラム

```
【コンパイル】
$ icpc -03 -xAVX -openmp -openmp-report1 prog_hyb.cpp -lmpi
【環境設定】
$ export KMP_AFFINITY=disabled (Intel compiler のバインド機能の無効化)
$ export OMP_NUM_THREADS=4 (スレッド数指定)
【実行】
$ mpirun -np 4 omplace -nt ${OMP_NUM_THREADS}./a.out
```

3.5. dplace/omplace コマンドの利用

OS のプロセススケジュールにより、引き起こされる CPU 間でのプロセスの移動を避け るために dplace や omplace コマンドを指定します。

特に何も指定しない場合、OS はプロセスが実行される CPU を含むノードのローカルメ モリにデータを配置します。もし、プロセスが CPU 間を移動してしまった場合、いった ん配置されたデータは移動しないためデータ参照はリモートメモリへの参照となってしま います。リモートメモリの参照はローカルメモリと比較して時間がかかるため、プログラ ムの性能を低下させる可能性があります。このような現象を防ぐためにプログラム実行時 には dplace や omplace コマンドを指定してください。

dplace や omplace に CPU 番号を指定すると、プロセスは指定された CPU ヘバインドさ れます。該当 CPU で既に他のプロセスがバインドされていた場合には、1 つの CPU を 2 つ以上のプロセスが共有することになってしまうため、dplace や omplace コマンドはプロ セスが割り当てられていない、空いている CPU ヘバインドします。

3.5.1. 逐次プログラム(シリアル)

【CPU 7番のコアにプロセスを配置する場合】 \$ dplace -c7 ./a.out

3.5.2. スレッド並列プログラム(OpenMP)

【CPU 0~7 版のコアにスレッドを配置し、管理スレッドは配置するスレッドから除外】 \$ dplace -x2 -c0-7 ./a.out

3.5.3. MPI 並列プログラム

【CPU 0~7版のコアにプロセスを配置し、管理プロセスは配置するプロセスから除外】 \$ mpirun -np 8 dplace -s1 -c0-7 ./a.out

3.5.4. MPI + OpenMP ハイブリッド並列プログラム

【MPI プロセスが 4、OpenMP のスレッド数が 4 と設定されたハイブリッドジョブ】 \$ export OMP_NUM_THREADS=4 \$ mpirun -np 4 omplace -nt \${OMP_NUM_THREADS} -c0-15 ./a.out

ここでは、0 から 15 番のコアを指定しており、MPI プロセスが 4、OpenMP のスレッド 数が 4 と設定されています。この場合、MPI プロセスは 0, 4, 8, 12 番のコアに配置され、 OpenMP スレッドはそれぞれの MPI プロセスと隣り合うコア(MPI ランク 0 から生成され る OpenMP スレッドは 0〜3 番のコア)に配置されます。

3.5.5. dplace や omplace コマンドで配置するコアの指定方法

- 22 dplace コマンド
- 23 -c <cpulist>

24 CPU コア番号の指定方法

cpulist	配置(コア番号)
0-3	0, 1, 2, 3
0-7:2	0, 2, 4, 6
0-1, 4-5	0, 1, 4, 5
0-3:2, 8-9	0, 2, 8, 9

25 -x2

26 OpenMPの管理スレッドを配置するスレッドから除外する

27 -s1

- 28 MPIの管理プロセスを配置するプロセスから除外する
- 29 omplace コマンド
- 30 -nt \${OMP_NUM_THREADS}
- 31 スレッド数を指定する
- 32 -c <cpulist>
- 33 CPU コア番号の指定方法

cpulist	配置(コア番号)
O-N	0, 1, 2, 3, … N(最後のコア番号)
1:st=2	1, 3, 5, 7, …(全ての奇数番号のコア)
0, 1, 1–4	0, 1, 1, 2, 3, 4 (1 番のコアに 2 つのプロセスを配置)
0-6:st=2, 1-7:st=2	0, 2, 4, 6, 1, 3, 5, 7
16-31:bs=2+st=2	16, 17, 20, 21, 24, 25, 28, 39

3.6. 数値計算ライブラリの利用

3.6.1. Intel Math Kernel Library (MKL) 概要

数値演算ライブラリとして、Intel Math Kernel Library (MKL)を提供します。 富士通 SSL2 は使用できませんので、ご注意ください。

MKL の特徴は、

- 34 科学技術計算向け
- 35 インテルプロセッサにチューニング 36 マルチスレッド対応
- 37 スレッド並列化
- 38 スレッドセーフ
- 39 自動ランタイム・プロセッサ検出機能
- 40 Cおよび Fortran のインターフェース

を有しています。

Intel MKL は数値計算ライブラリとして、下記の主な機能が含まれます。

- 41 BLAS
- 42 BLACS
- 43 LAPACK
- 44 ScaLAPACK
- 45 PBLAS
- 46 Sparse Solver
- 47 Vector Math Library (VML)
- 48 Vector Statistial Library (VSL)
- 49 Conventional DFTs and Cluster DFTs
- 50 FFTW interface

3.6.2. 逐次 C++プログラム (シリアル)

MKLを利用する場合、下記のようにコンパイルします。

```
[MKLをリンク]
$ ifort -lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core test.f
[Intel コンパイラのオプションによる指定]
$ ifort -mkl=sequential test.f
BLACS および ScaLAPACK を利用する場合、下記のようにコンパイルします。
[MKLをリンク]
$ ifort -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_sgimpt_lp64 -lmkl_intel_lp64 \
-lmkl_sequential -lmkl_core test.f -lmpi
```

```
【Intel コンパイラのオプションによる指定】
$ ifort -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_sgimpt_lp64 -mkl=sequential \
test.f -lmpi
```

3.6.3. スレッド並列プログラム (OpenMP) MKL を利用する場合、下記のようにコンパイルします。

```
【MKLをリンク】
$ ifrot -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -liomp5 test.f
【Intel コンパイラのオプションによる指定】
$ intel -mkl=parallel test.f
BLACS および ScaLAPACK を利用する場合、下記のようにコンパイルします。
【MKLをリンク】
$ ifort -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_sgimpt_lp64 -lmkl_intel_lp64 \
-lmkl_intel_thread -lmkl_core -liomp5 test.f -lmpi
【Intel コンパイラのオプションによる指定】
$ ifort -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_sgimpt_lp64 -mkl=parallel \
```

```
$ ifort -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_sgimpt_lp64 -mkl=parallel \
test.f -lmpi
```

実行方法は下記の通り。

```
【環境設定】

$ export KMP_AFFINITY disabled (Intel compiler のバインド機能の無効化)

$ export OMP_NUM_THREADS 4 (スレッド数指定)

【実行】

$ dplace -x2 ./a.out
```

OpenMP で指定するスレッド数と異なるスレッド数で実行したい場合、下記のように MKL_NUM_THREADS 環境変数を別途設定します。

【環境設定】 \$ export KMP_AFFINITY disabled \$ export OMP_NUM_THREADS=8 \$ export MKL_NUM_THREADS=4	(Intel compiler のバインド機能の無効化) (OpenMP スレッド数指定) (MKL スレッド数指定)
【実行】 \$ dplace -x2 ./a.out	

スレッド並列版の MKL を使用する場合、下記の注意が必要です。

	設定方法
逐次(シリアル)で実行	環境変数 0MP_NUM_THREADS を 1 に設定します。
	または、シリアル版 MKL をリンクします。
スレッド並列で実行	環境変数 OMP_NUM_THREADS を並列実行数に設定します。 OpenMP のプログラム中で MKL を使う場合、 OMP_NUM_THREADS で設定されたスレッド数で実行されま す。また、OpenMP のスレッド数とは違うスレッド数で実 行したい場合は OMP_NUM_THREADS 以外に MKL_NUM_THREADS を設定します。 ※OpenMP で並列化されたループ内で MKL のスレッド並列 化された関数を用いる場合、デフォルトでは OpenMP のネ ストが無効になっているため、MKL のスレッド並列は無効 です。環境変数 OMP_NESTED を"yes"とすることにより、
	MPIのみで並列実行する場合、MKL がスレッド並列で動作
MPI 並列で実行	しないように環境変数 0MP_NUM_THREADS を1に設定しま
	す。または、シリアル版 MKL をリンクします。
	MPI とスレッド並列のハイブリッドでの実行をする場合、
ハイブリッド並列で実行	MKL のスレッド数を OMP_NUM_THREADS または
	MKL_NUM_THREADS で設定します。

3.7. Intel コンパイラのオプション

Intel コンパイラのデフォルトで設定されている主なオプションは下記の通りです。

オプションの種類	オプション	オプションのレベル
	0.0	パフォーマンス向上のための最適
取週16レベル	-02	化を行ないます。
	-msse2	インテルプロセッサ向けに SSE2 お
ᄨᇢᅭᆌᇊᆂᇗᅭᇊᇉᇗᇢᅘᄽ		よび SSE 命令を生成し、SSE2 対応
特定のノロセッリ回りの取適10		のインテル Xeon プロセッサ向けの
		最適化をします。

推奨するオプションは下記の通りです。

オプションの種類	オプション	オプションのレベル
	-03	├02 に加えプリフェッチ、スカラ
見済化しが川		ー置換、ループ変換、およびメモ
取過しレベル		リアクセス変換などのより強力な
		最適を有効にします。
		インテル AVX ベクトル化命令およ
	-xAVX	び、SSE4.2、SSSE3, SSE3, SSE2,
特定のプロセッサ向けの最適化		SSE 命令を生成し、インテル Xeon
		E5−2600 番台および 4600 番台のプ
		ロセッサ向けに最適化をします。

3.7.1.	最適化レベルオプション
--------	-------------

オプション	内容
-00	全ての最適化を無効とします。主にデバッグ時に利用。
-01	51 グローバルな最適化を有効化 52 組み込み関数の認識と組込み関数のインライン展開の無 効
	したの最適化レベルでは、力岐が多く、実行時間の多くがルークで
-02	デフォルトの最適化レベル。最適化レベルを指定しない場合、こ の最適化レベルが適用されます。この最適化レベルでは次の最適 化を行います。
	-O2 オプションに加えて、プリフェッチ、スカラー置換、キャッシュ・ブロッキング、ループ変換、メモリアクセス変換などの最適化を行います。
-03	浮動小数点演算の多いループや大きなデータセットを処理するコ ードで性能向上が見込めます。
	-axSSE4.2 および-xSSE4.2 オプションとの組み合わせでより詳細な データ依存性解析をします。
-fast	-xHOST -O3 -ipo -no-prec-div -static を有効にするマクロオプション です。 ※-fast オプションには-static オプションが含まれるため、ダイナ ミック・ライブラリしか提供されていないライブラリを利用する 場合、-Bdynamic オプションでそのライブラリを指定する必要が あります。

3.7.2. 最適化に関するオプション

オプション	内容
-vec	ベクトル化を有効/無効にします。デフォルトは有効です。
-vec-report	ベクタライザーからのメッセージをコントロールします。
	デフォルトではベクタライザーからのメッセージは出力されません。ベ
	クタライザーからのメッセージを出力するためには、このオプションを
	有効にしてください。
-vec-report-file=name	ベクタライザーからのレポートを name というファイルに出力します。
-no-prec-div	IEEE 準拠の除算よりも多少精度が低くなる場合がありますが、最適化を
	試みます。
-no-prec-sqrt	平方根計算については多少精度が低くなる場合がありますが、高速な計
	算を行います。

最適化レポートに関するオプションは下記の通りです。

オプション	内容
	最適化レポートを標準エラー出力に表示します。
	n=0: 最適化レポートを表示しません。
-opt-report [n]	n=1: 簡易なレポートを表示します。
	n=2: 標準的なレポートを表示します。(デフォルト)
	n=3: 詳細なレポートを表示します。
-opt-report-file=name	最適化レポートを name というファイルに出力します。
-opt-report-routine=name	name で指定されたサブルーチンのレポートのみを出力
-opt-report-phase=name	name で指定された最適化フェーズのレポートを出力
-opt-report-help	最適化レポート生成可能な最適化フェーズを表示

最適化のフェーズは下記の通りです。

最適化フェーズ	最適化の内容	関連するオプション
іро	Interprocedural Optimizer	−ipo, −ip
hlo	High-level Language Optimaizer	-O3 (Loop Unrolling)
ilo	Intermediate Language Scalar Optimizer	
hpo	High Performance Optimizer	
pgo	Profile Guided Optimizer	-prof_gen, -prof_use

3.7.3. 特定のプロセッサ向けの最適化オプション

オプション	内容
	<i>プロセッサ</i> で指定した特定のプロセッサ向けのバイナリを生成し
-x / Ц С У У	ます。
	<i>プロセッサ</i> で指定した特定のプロセッサ向けのバイナリと一般的
-ax <i>プロセッサ</i>	な IA32 アーキテクチャ向けのバイナリを一つのバイナリで生成し
	ます。

指定可能なプロセッサ名は下記の通りです。

プロセッサ	プロセッサに対する最適化内容
HOST	コンパイルをしたプロセッサで利用可能な、最も高いレベルの命
	令を生成し、そのプロセッサ向けの最適化を行います。
	SandyBridge(Intel Xeon E5-2600 番台および 4600 番台)向けの最
AV/Y	適化を行い、AVX 命令を生成します。さらに、SSE4.2、SSE4、
	SSSE3、SSE3、SSE2、SSE 命令を生成し、インテル AVX 命令をサポ
	ートするプロセッサ向けの最適化を行います。
	Nehalem-EP(Intel Xeon 5500 番台および 5600 番台)向けの最適
	化を行い、SSE4.2 命令を生成します。さらに、SSE4 のベクトル
SSE4. 2	化コンパイル命令、メディア·アクセラレター、SSSE3, SSE3,
	SSE2, SSE 命令を生成し、インテル Core プロセッサ向け最適化を
	行います。
	SSE4 のベクトル化コンパイル命令、メディア·アクセラレター、
00E/ 1	SSSE3, SSE3, SSE2, SSE 命令を生成し、45nm プロセスルール世
55E4. I	代のインテル Core プロセッサ(Intel Xeon 5200 番台、5400 番
	台)向け最適化を行います。
SSSE3	SSSE3, SSE3, SSE2, SSE命令を生成し、インテル Core2 Duo プロ
	セッサ(Intel Xeon 5100 番台、5300 番台) 向け最適化を行いま
	す。

	オプション	内容
-ip		1つのソースファイルにあるプロシージャ間の解析、最適化を行
		います。
-ipo		複数のソースファイルにあるプロシージャ間の解析、最適化を行
		います。リンク時にもオプションとして指定してください。

3.7.4. プロシージャ間解析の最適化

3.7.5. 浮動小数点演算に関するオプション

オプション	内容
-ftz	アンダーフローが発生したときに値をゼロに置き換えます。
	デフォルトでは、このオプションが有効になっています。
	このオプションが数値動作で好ましくない結果を出力した場合、
	-no-ftz オプションでアンダーフローが発生したときに値をゼロ
	にフラッシュしなくなります。
-fltconsistency	浮動小数点の一貫性を向上させ、IEEE754 規格に則った浮動小数
	点演算コードを生成します。

3.7.6. スレッド並列化オプション【OpenMP】

オプション	内容
-openmp	プログラム中の OpenMP 指示行を有効にします。
	OpenMP 診断メッセージを出力します。
	n=0: メッセージを表示しません。
	n=1: 並列化されたループ、領域を表示します。(デフォルト)
-openmp-report [n]	n=2: 上記に加え、MASTER, SINGLE, CRITICAL 指示句などを表示
	-openmp-report オプションを設定しない場合、-openmp オプショ
	ンをつけてコンパイルしても、OpenMP による並列化についての
	メッセージは出力されません。

オプション	
-parallel	自動並列化を行います。
	自動並列化メッセージを出力します。
-par-report [n]	n=0: メッセージを表示しません。 n=1: 並列化されたループを表示します。(デフォルト) n=2: 並列化されたループとされていないループを表示 n=3: 並列化不可要因(依存関係)も表示します。
	-par-report オプションを設定しない場合、-parallel オプションをつ けてコンパイルしても、自動並列化についてのメッセージは出力 されません。
-par-threshold [n]	自動並列化のしきい値(確信度)を設定します。(n は 0〜100) n=0: ループの計算量に関わらず、常に自動並列化をします。 n=100: 性能向上が見込める場合のみ、自動並列化をします。

3.7.7. スレッド並列化オプション【自動並列化】

3.7.8. MPI 並列化オプション

オプション	内容
	mpi ライブラリにリンクし、コンパイルします。
	全てのオプションの最後に記述して下さい。
Impi	SGI MPT は静的ライブラリがありません。-static オプション
-inipi	(static オプションを含む -fast オプション)をつけてコンパイル
	した場合、-Bdynamic -Impi として SGI MPT の動的ライブラリをリ
	ンクしてください。

3.7.9. その他のオプション

オプション	内容
-V	コンパイラのバージョンを表示します。
-help	オプション一覧を表示します。

4. ジョブ実行

4.1. ジョブシステム概要

UV システムでは、効率的なジョブ運用を実現するため、PBS Professional(以下、PBS Pro という)を導入しています。ユーザは、ジョブ開始時に必要なリソース情報を指定し、 PBS Pro に対してジョブ実行を指示します。

バッチジョブは、CPU やメモリなどの計算に必要なリソースが排他的に割り当てられています。

ユーザがジョブ操作に用いるコマンドは以下の通りです。

機能	コマンド名
ジョブ投入	qsub
会話型ジョブ投入	qsub -I
ジョブ参照	qstat
ジョブ削除	qdel

4.2. キュー構成

PBS Pro のキュー構成は下記の通りです。

+	キューへの割当		1ユーザ		並列数		メモリ		経過時間		供去
	コア数	メモリ	実行数	投入数	標準値	制限值	標準値	制限值	標準値	制限值	1開 75
uv-middle	512	7. 2TB	1	4	64	128	900GB	1.8TB	8h	72h	デフォルト
uv-large	512	7. 2TB	1	4	256	512	3. 6TB	7. 2TB	8h	8h	

4.3. ジョブ投入方法

4.3.1. 逐次プログラム(シリアル)

ジョブ投入スクリプトを作成します。(スクリプト名: run_serial.sh)

```
【run_serial.sh スクリプト】
#!/bin/bash
#PBS -N serial ←ジョブ名
#PBS -q uv-middle ←キュー名
#PBS -o stdout.log ←標準出力ファイル
#PBS -e stderr.log ←標準エラー出力ファイル
#PBS -l select=1:ncpus=8 ←リソース確保 (8 コア)
cd $ {PBS_0_WORKDIR} ←作業ディレクトリへ移動
dplace -c7./a.out ←実行
```

ジョブ投入スクリプトを使用して、ジョブを投入します。

\$ qsub run_serial.sh
331.uv

4.3.2. スレッド並列プログラム (OpenMP)

16 スレッドを使用する OpenMP 並列ジョブ投入スクリプトを作成します。(スクリプト 名: run_omp.sh)

【run_omp.sh スクリプト】 #!/bin/bash	
<pre>#PBS -N openmp #PBS -q uv-middle #PBS -o stdout.log #PBS -e stderr.log #PBS -l select=1:ncpus=16</pre>	←ジョブ名 ←キュー名 ←標準出力ファイル ←標準エラー出力ファイル ←リソース確保(16 コア)
cd \${PBS_0_WORKDIR}	←作業ディレクトリへ移動
export KMP_AFFINITY=disabled export OMP_NUM_THREADS=16	←Intel の Affinity を disabled にする ←スレッド並列数の設定(16 スレッド)
dplace -x2 -c0-15 ./a.out	←16 スレッドで OpenMP 実行

ジョブ投入スクリプトを使用して、ジョブを投入します。

\$ qsub run_omp.sh
332.uv

4.3.3. MPI 並列プログラム

16 プロセスを使用する MPI 並列ジョブ投入スクリプトを作成します。(スクリプト名: run_mpi.sh)

【run_mpi.sh スクリプト】	
#!/bin/bash	
#PBS -N mpi	←ジョブ名
#PBS -q uv-middle	←キュー名
#PBS -o stdout.log	←標準出力ファイル
#PBS -e stderr.log	←標準エラー出力ファイル
#PBS - select=1:ncpus=16	←リソース確保(16 コア)
cd \${PBS_0_WORKDIR}	←作業ディレクトリへ移動
mpirun -np 16 dplace -s1 -c0-15 ./a.out	←16 ブロセスで MPI 並列実行

ジョブ投入スクリプトを使用して、ジョブを投入します。

\$ qsub run_mpi.sh
333.uv

4.3.4. MPI+OpenMP ハイブリッド並列プログラム

MPI が 4 プロセスと各プロセスから 4 スレッドを使用する MPI+OpenMP ハイブリッド 並列ジョブ投入スクリプトを作成します。(スクリプト名: run_hybrid.sh)

```
【run hybrid.sh スクリプト】
#!/bin/bash
#PBS -N hybrid
                            ←ジョブ名
                           ←キュー名
#PBS -q uv-middle
#PBS -o stdout.log
                           ←標準出力ファイル
#PBS -e stderr.log
                           ←標準エラー出力ファイル
#PBS -| select=1:ncpus=16
                            ←リソース確保(16コア)
cd ${PBS_0_WORKDIR}
                      ←作業ディレクトリへ移動
export KMP_AFFINITY=disabled ← IntelのAffinityをdisabledにする
export OMP NUM THREADS=4 ← スレッド並列数の設定(4 スレッド)
export OMP_NUM_THREADS=4
                           ←スレッド並列数の設定(4 スレッド)
mpirun -np 4 omplace -nt ${OMP_NUM_THREADS} -c0-15 ./a.out ←hybrid 実行
ジョブ投入スクリプトを使用して、ジョブを投入します。
```

\$ qsub run_hybrid.sh
334.uv

4.3.5. 大規模メモリプログラム(シリアル)

ジョブ投入スクリプトを作成します。(スクリプト名: run_mem.sh)

【run_mem.sh スクリプト】	
#!/DIN/DASN #PRS -N largemem	←ジョブ名
#PBS -q uv-middle	←キュー名
#PBS -o stdout.log	←標準出力ファイル
#PBS -e stderr.log	←標準エラー出力ファイル
#PBS - select=1:ncpus=8:mem=1800gb	←リソース確保(8コア、1800GB)
cd \${PBS_0_WORKDIR}	←作業ディレクトリへ移動
dplace -c7 ./a.out	←実行

ジョブ投入スクリプトを使用してジョブを投入します。

\$ qsub run_mem.sh
335.uv

4.3.6. 会話型ジョブ

"qsub -l" でインタラクティブにジョブを投入することができます。

[scuser@uv:/data/usr/scgroup/scuser/serial]\$ qsub -q uv-middle -l select=1:ncpus=16 -I
qsub: waiting for job 336.uv to start
qsub: job 336.uv ready

[scuser@uv:~]\$ cd \${PBS_0_WORKDIR}
[scuser@uv:/data/usr/scgroup/scuser/serial]\$ dplace -c7 ./a.out

Number of Interior Points		Computed Integral
4		3. 1415927E+00
8		3. 7922378E+00
8388608		4. 0000000E+00
16777216		4. 0000000E+00
33554432		4. 0000000E+00
67108864		4. 0000000E+00

CPU Time = 0.7640470 seconds [scuser@uv:/data/usr/scgorup/scuser/serial]\$ exit

logout qsub: job 336.uv completed

4.3.7. ジョブ投入が受け付けられない場合

53 キュー設定以上のリソースを確保しようとした場合

uv-middle で 512CPU を確保しようとします。

【runmpi.shの内容】 #!/bin/sh #PBS -N mpi-genlte #PBS -q uv-middle #PBS -o stdout_middle_512p.log #PBS -e stderr_middle_512p.log #PBS -l select=1:ncpus=512 cd \${PBS_0_WORKDIR} mpirun -np 512 dplace -s1./a.out

キューの制限で 128 までとなっているため、上記ジョブスクリプトを投入すると弾かれ

ます。

\$ qsub runmpi.sh qsub: Job exceeds queue and/or server resource limits

54 ジョブの投入本数を超えた場合

同一ユーザで4本ジョブを投入しており、5本目を投入するとはじかれます。

\$ ndstat JOBID	USER	QUEUE	JOBNAME	NODE	CPUS	Memory	REQTIME	STAT	ELAPSE	START_TIME
352	scuser4	uv-middl	mpi-genlte	1	16	900gb	08:00	 R	00:00	Jun 07 23:31
353	scuser4	uv-middl	mpi-genlte	1	16	900gb	08:00	Q		
354	scuser4	uv-middl	mpi-genlte	1	16	900gb	08:00	Q		
355	scuser4	uv-middl	mpi-genlte	1	16	900gb	08:00	Q		

表示されるエラーメッセージは次の通りです。

\$ qsub runmpi.sh qsub: would exceed queue generic's per-user limit

4.4. ジョブ状態表示

¢ ____

\$ qstat -asn

4.4.1. qstat コマンドによるジョブの状態表示

ジョブの状態は qstat コマンドで表示できます。

ψ μσιαι			
Job id	Name	User	Time Use S Queue
404. uv	mpi-genlte	scuser1	28:28:46 R uv-middle
405. uv	mpi-genlte	scuser5	28:24:32 R uv-middle
406. uv	mpi-genlte	scuser3	28:18:08 R uv-middle
407. uv	mpi-genlte	scuser4	28:13:52 R uv-middle
408. uv	mpi-genlte	scuser2	111:23:0 R uv-large
409. uv	mpi-genlte	scuser5	0 Q uv-middle
410. uv	mpi-genlte	scuser1	0 Q uv-middle
411. uv	mpi-genlte	scuser1	0 Q uv-large

全ての情報を表示する場合には、下記のオプションをつけて実行します。

uv: Req'd Req'd Elap Job ID Username Queue Jobname SessID NDS TSK Memory Time S Time 404. uv scuser1 uv-middl mpi-genlte 264367 1 128 900gb 08:00 R 00:00 uv/0*0 Job run at Sun Jun 08 at 07:37 on (uv[32]:ncpus=8+uv[33]:ncpus=8+uv[34]... 405. uv scuser5 uv-middl mpi-genlte 264626 1 128 900gb 08:00 R 00:00 uv/1*0 Job run at Sun Jun 08 at 07:37 on (uv[50]:ncpus=8+uv[51]:ncpus=8+uv[52]... 406. uv scuser3 uv-middl mpi-genlte 264978 1 128 900gb 08:00 R 00:00 uv/2*0 Job run at Sun Jun 08 at 07:37 on (uv[70]:ncpus=8+uv[71]:ncpus=8+uv[64]... 407. uv scuser4 uv-middl mpi-genlte 265255 1 128 900gb 08:00 R 00:00 uv/3*0 Job run at Sun Jun 08 at 07:37 on (uv[80]:ncpus=8+uv[81]:ncpus=8+uv[82]... 408. uv scuser2 uv-large mpi-genite 265711 1 512 3600gb 08:00 R 00:00 uv/4*0 Job run at Sun Jun 08 at 07:37 on (uv[96]:ncpus=8+uv[97]:ncpus=8+uv[98]... 409. uv scuser5 uv-middl mpi-genlte ___ 1 128 900gb 08:00 Q Not Running: User has reached queue uv-middle running job limit. 410. uv scuser1 uv-middl mpi-genlte 1 128 900gb 08:00 Q ___ Not Running: User has reached queue uv-middle running job limit. 411. uv scuser1 uv-large mpi-genlte -- 1 256 3600gb 08:00 Q Not Running: Insufficient amount of resource ncpus (R: 256 A: 255 T: 1279)

4.4.2. ndstat コマンドによるジョブの状態表示

ndstat コマンドを使用して、ジョブが UV システムのどの場所で実行されているかを表示します。

ndstat で表示される上段はジョブの実行状況を、下段は UV のレイアウトを表示しています。

uv-middle は IRU02〜IRU05 を、uv-large は IRU06〜IRU09 を使用して、ジョブが実行され ていることが分かります。「アスタリスク(*)+3 桁の数字」で表示される文字列は、 ジョブ ID の下 3 桁を表示しています。

\$ ndstat JOBID	t USER	QUEUE	JOBNAME	NODE	CPUS	Memory	REQTIME	STAT	ELAPSE	START_TIME	
404	scuser1	uv-mide	dl mpi-genlt	e 1	128	900gb	08:00	 R	00:00	Jun 08 07:37	
405	scuser5	j uv−mido	dl mpi-genlt	e 1	128	900gb	08:00	R	00:00	Jun 08 07:37	
406	scuser3	uv-mid	dl mpi-genlt	e 1	128	900gb	08:00	R	00:00	Jun 08 07:37	
407	scuser4	uv-mide	dl mpi-genlt	e 1	128	900gb	08:00	R	00:00	Jun 08 07:37	
408	scuser2	uv-lar	<u>xe mpi-genlt</u>	e 1	512	3600gb	08:00	R	00:00	Jun 08 07:37	
409	scuser5	i uv-mido	il mpi−genlt	e 1	128	900gb	08:00	Q			
410	scuser1	uv-mide	il mpi−genlt	e 1	128	900gb	08:00	Q			
411	scuser1	uv-lar;	ge mpi-genlt	e 1	256	3600gb	08:00	Q			
IRU	0	1 3	2 3	4	5	6	7				
000 1)			
000 i								755			
001								135			
L001 i								J			
002	*404	*404 *4	104 *404	*404	*404	4 *404	4 *404				
002	*404	*404 *4	104 *404	*404	*404	4 *404	4 *404				
003	*405	*405 *4	405 *405	*405	*405	5 *40	5 *405			Personal Person	(manual)
003	*405	*405 *4	405 *405	*405	*405	5 *40	5 *405			IRU03 IRI	107
004	*406	*406 *4	406 *406	*406	*406	6 *40	6 *406	uv-n	niddle		
004	*406	*406 *4	106 *406	*406	*406	6 *40	6 *406			Dataset I Datas	
005	*407	*407 *4	407 *407	*407	*407	7 *40	7 *407			IRU02 IRU	106
005	*407	*407 *4	407 *407	*407	*407	7 *40	7 *407			listical list	
006	*408	*408 *4	108 *408	*408	*408	3 *40	8 *408	1			
006	*408	*408 *4	108 *408	*408	*408	3 *40	8 *408				
007	*408	*408 *4	108 *408	*408	*408	8 *40	8 *408			IRU01 IRU	JO5 IRU09
007	*408	*408 *4	408 *408	*408	*408	3 *40	8 *408				
008	*408	*408 *4	408 *408	*408	*408	3 *40	8 *408	uv-la	arge		
008	*408	*408 *4	408 *408	*408	*408	3 *40	8 *408			IRU00	J04 IRU08
009	*408	*408 *4	408 *408	*408	*408	3 *40	8 *408				
009	*408	*408 *4	408 *408	*408	*408	3 *40	8 *408				

4.5. ジョブキャンセル方法

ジョブをキャンセルするには qdel コマンドを実行します。

\$ qdel [JOBID [JOBID...]]

【ジョブを投入】 **\$ qsub runmpi.sh** 412.uv 【ジョブが実行中であることを確認】 **\$ qstat** Job id Name User

Job id	Name	User	Time Use	S	Queue
412. uv	mpi-genlte	scuser4	00:19:12	R	uv-middle
【ジョブを削除】					

\$ qdel 412

【実行中のジョブがなくなっていることを確認】 \$ qstat

\$

5. 可視化環境

ここでは、情報基盤センター1F 可視化室に設置されている可視化システムについて紹 介します。各システムの利用方法は、操作マニュアルをご覧ください。 可視化システムは、次のシステムで構成されます。

- ・8Kタイルドディスプレイ・システム(高精細可視化システム)
- ・リモート可視化システム
- ・フル HD 円偏光立体視システム
- ・ドーム型ディスプレイ・システム
- ・据え置き型 HMD ディスプレイ・システム
- ・携帯型 HMD ディスプレイ・システム



5.1. 8кタイルドディスプレイ

8 K タイルドディスプレイは 46 インチ液晶モニター16 面(4×4)で構成され、シミュレ ーションの可視化結果や医療画像および衛星画像等を高精細かつ大画面で可視化することが できます。利用環境は、Linux と Windows が利用できます。Linux 環境は、大規模メモリと 1280CPU コア、NVIDIA K5000 グラフィックスカード 8 枚を搭載した「SGI UV2000 システム」 を使って、大規模データを可視化することができます。操作は、 8 K タイルドディスプレイ 横の 4 K モニターとキーボードとマウスを使用します。

5.2. リモート可視化システム

リモート可視化システムは、「SGI UV2000 システム」の利用環境を、リモートから利用する ためのシステムです。NICE DCV を搭載した SGI VizServer ソフトウエアと NVIDIA K5000 グラ フィックスカード 4 枚を使って動作し、すべての OpenGL アプリケーションは、NVIDIA グラフ ィックスカードを搭載したリモートの SGI VizServer システムでネイティブに実行されます。そ して、作成された画像は圧縮・暗号化され、ネットワーク経由でローカルディスプレイに送信 されます。

5.3. フル HD 円偏光立体視システム

フル HD 円偏光立体視システムは、NVIDIA Quadro FX6000 グラフィックスカードを搭載し た WindowsPC, 150 インチシルバースクリーン,円偏光フィルターを搭載した 2 台のフル HD DLP プロジェクタ,円偏光メガネ,ゲームコントローラから成るシステムです。大スク リーンにプロジェクタを使って立体投影し、円偏光メガネを使って可視化することができま す。

5.4. ドーム型ディスプレイシステム

ドーム型ディスプレイシステムは、NVIDIA Quadro6000 グラフィックスカードを搭載した WindowsPC, 直径 1.2m ドーム型スクリーン(ドーム視野角が 180 度の半球), ドームマスタ ー(円周魚眼撮影)形式の画像および動画を投影する機能を有するフル HD ステレオ対応プ ロジェクタ, ゲームコントローラから成るシステムです。複数人が広視野立体映像を歪みを 感じずに同時に見ることができ、空間共有体験を実現することができます。また、液晶シャ ッターメガネを使った立体視にも対応しています。

5.5. 据え置き型 HMD ディスプレイシステム

据え置き型ヘッドマウント・ディスプレイ MREAL(Mixed Reality)システムは、NVIDIA Quadro FX6000 グラフィックスカードを搭載した WindowsPC, Canon 社製 MR ヘッドマウン ト型ディスプレイシステムとジャイロセンサー、反射マーカー及び光学式の位置姿勢センサ ー(VICON)からなるシステムです。MREAL ヘッドマウント・ディスプレイは、カメラで撮 影した 3 次元映像(現実空間画像)と 3 次元 CG 画像(仮想 CG 映像)を合成して立体視し、 位置センサーを使って可視化空間内を移動して任意の方向から可視化データを閲覧すること ができます。

5.6. 据え置き型 HMD ディスプレイシステム

携帯型ヘッドマウント・ディスプレイシステムは、NVIDIA QuadroK3000M グラフィックス カードを搭載したノート型 WindowsPC, NVIS 社製 ST50 ヘッドマウント・ディスプレイ(ク ローズタイプとシースルータイプ兼用), SONY 製 HMZ-T2 ヘッドマウント・ディスプレイ (クローズタイプ), ゲームコントローラから成るシステムです。

6. 可視化アプリケーション一覧

UV システムで利用可能な可視化アプリケーションは、次のとおりです。 括弧内は、起動コマンドです。

AVS/Express Developer (XP) AVS/Express PCE (スクリプト作成) Enshight (スクリプト作成) ENVI (envi) …… 合成開ロレーダ SARscape 対応 ffmpeg (ffmpeg) ffplay (ffplay) IDL (/opt/ENVI/idl/bin/idl) Mplayer (mplayer) Osgviewer (psgviewer) Paraview (/opt/sw/paraview/bin/paraview) POV-Ray (/opt/POV-Ray/bin/povray) 3D AVS player (avsplayer)