

---

# 「京」データポスト処理システム

## 利用の手引

0.3 版

---

改版履歴

| 版   | 更新日付      | 内容   |
|-----|-----------|--|
| 0.1 | 2012/4/11 | 新規作成                                       |
| 0.2 | 2012/9/6  | ログインサーバ名の変更に伴う修正                           |
|     |           | パスワード認証を禁止し、公開鍵認証のみ可能にしたことによる変更            |
|     |           | 本手引きの題目の変更<br>2章の名称を変更                     |
|     |           | 「京」経由の利用方法、多段接続に関する記述を追加                   |
|     |           | 計算ノードでの公開鍵の登録を Fowardagent を行うことで代えられる旨を追加 |
| 0.3 | 2013/6/26 | システム増強(計算ノード追加・InfiniBand ネットワーク追加)に伴い改版   |

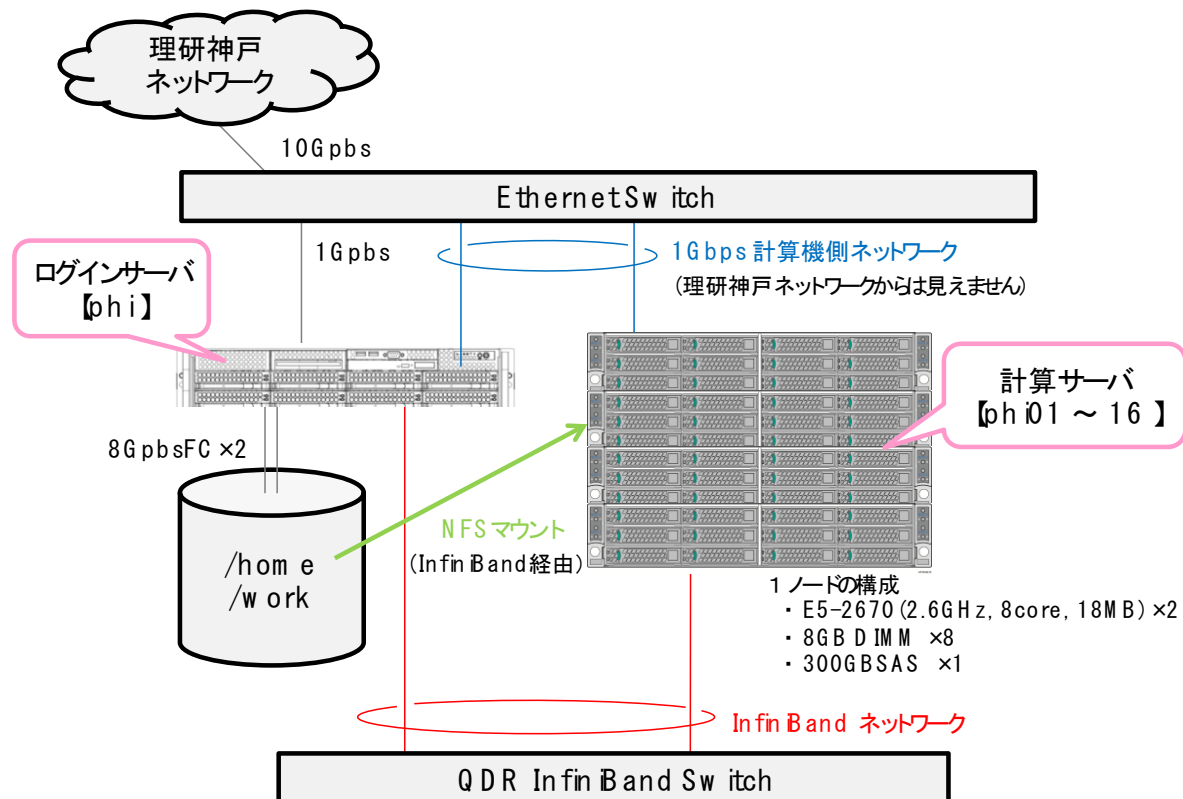
---

## 目 次

|                           |          |
|---------------------------|----------|
| <b>1 システム構成</b> .....     | <b>4</b> |
| 1.1 システム全体概要図 .....       | 4        |
| 1.2 ホスト名 .....            | 4        |
| 1.3 ファイルシステム .....        | 5        |
| <b>2 ログイン方法について</b> ..... | <b>6</b> |
| 2.1 ログイン方法 .....          | 6        |
| 2.1.1 ログインシェル変更 .....     | 6        |
| <b>3 サーバの利用方法</b> .....   | <b>7</b> |
| 3.1 開発・計算の方法 .....        | 7        |
| 3.1.1 コンパイラ .....         | 7        |
| 3.2 MPI .....             | 7        |
| 3.2.1 MPI 実行環境 .....      | 7        |
| 3.2.2 MPI コードのコンパイル ..... | 8        |
| 3.2.3 MPI プログラムの実行 .....  | 8        |
| 3.3 バッチジョブ .....          | 9        |

# 1 システム構成

## 1.1 システム全体概要図



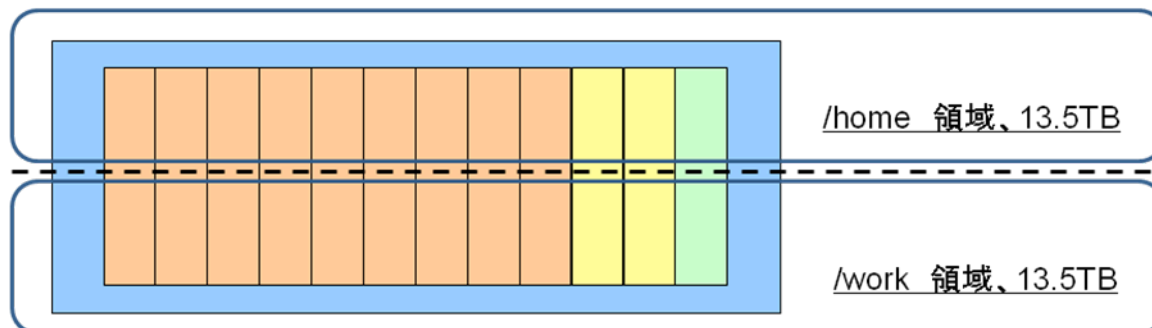
## 1.2 ホスト名

各マシンとホスト名の関係は以下の通りです。

|         | ホスト名                | ホスト名(略称) | InfiniBand を利用する場合のホスト名 |
|---------|---------------------|----------|-------------------------|
| ログインサーバ | phi.aics.riken.jp   | phi      | phi00-ib                |
| 計算サーバ   | phi01.aics.riken.jp | phi01    | phi01-ib                |
|         | phi02.aics.riken.jp | phi02    | phi02-ib                |
|         | phi03.aics.riken.jp | phi03    | phi03-ib                |
|         | phi04.aics.riken.jp | phi04    | phi04-ib                |
|         | phi05.aics.riken.jp | phi05    | phi05-ib                |
|         | phi06.aics.riken.jp | phi06    | phi06-ib                |
|         | phi07.aics.riken.jp | phi07    | phi07-ib                |
|         | phi08.aics.riken.jp | phi08    | phi08-ib                |
|         | phi09.aics.riken.jp | phi09    | phi09-ib                |
|         | phi10.aics.riken.jp | phi10    | phi10-ib                |
|         | phi11.aics.riken.jp | phi11    | phi11-ib                |
|         | phi12.aics.riken.jp | phi12    | phi12-ib                |
|         | phi13.aics.riken.jp | phi13    | phi13-ib                |
|         | phi14.aics.riken.jp | phi14    | phi14-ib                |
|         | phi15.aics.riken.jp | phi15    | phi15-ib                |
|         | phi16.aics.riken.jp | phi16    | phi16-ib                |

### 1.3 ファイルシステム

外部ディスク装置 IS5000 は、36TB の物理容量 (3TB x 12drive) を持ち、データディスク 9、パリティディスク 2、ホットスペア 1 の RAID6 構成を取ります。データ領域は下図のように分割され、ログインサーバ (phi) にマウントされた上で計算サーバ (phi01-16) に InfiniBand 経由で NFS 共有されます。



※ 容量はすべて10のべき乗表記の物理容量

|    |          |
|----|----------|
| 凡例 | データドライブ  |
|    | パリティドライブ |
|    | ホットスペア   |

## 2 ログイン方法について

### 2.1 ログイン方法

現在、phi は公開鍵認証でのみログインが行えます。(パスワード認証によるログインはできません。)アカウント希望者は、管理者の坂下<t-sakashita@issp.u-tokyo.ac.jp>までお知らせください。

phi へのログインは以下の方法で行います。

- (1) 神戸の計算科学研究機構の R501 号室からは、ログイン端末から直接 phi にログイン可能。
- (2) それ以外の場所からは、「京」にログインした後に、「京」のログインノードから phi にログインする。

いずれの場合も、phi へのログインコマンドは以下のとおりです。

```
phi $ ssh ユーザ名@phi.aics.riken.jp
```

上記の(2)の場合では、2回 ssh コマンドを打つ必要があり面倒です。そこで、nc コマンドを用いた多段接続が便利です。この手順をご紹介します。以下を\${HOME}/.ssh/config というファイル名で保存します。

```
Host kphi                ← 短縮名
  HostName phi.aics.riken.jp
  User   phi のユーザ名
  ProxyCommand ssh 京のユーザ名@k.aics.riken.jp nc %h %p 2> /dev/null
```

すると、以下のように、一度の ssh コマンドで(しかも短縮名で)phi にログインできるようになります。

```
phi $ ssh kphi
```

scp も同様に短縮名で行えます。

```
phi $ scp コピーするファイルの名前 kphi:
```

上記の方法を使えば、ログイン端末と phi の間でファイルのやりとりをする際に、経由する「京」に一時ファイルを作らなくて済みます。

#### 2.1.1 ログインシェル変更

ログインシェルを変更したい場合は、希望するシェル名を管理者の坂下までお知らせください。

(chsh コマンドやパスワード認証を用いる ypchsh コマンドを使用して、ご自分でシェルを変更することはできません。)

## 3 サーバの利用方法

### 3.1 開発・計算の方法

#### 3.1.1 コンパイラ

コンパイラとして Gnu Compiler Collection(gcc,g77,g++)、Intel Compiler が利用可能です。Gnu コンパイラのコマンドは下記の通りです。

| コマンド | 内容            |
|------|---------------|
| g77  | Fortran をサポート |
| gcc  | C をサポート       |
| g++  | C++をサポート      |

※ 詳細は man gcc、man g77 または gcc --help、g++ --help、g77 --help をご参照ください。

Intel Fortran Compiler は Fortran 77 90 95 をサポートしますので、どの規格に沿って書かれたソースプログラムでもコンパイル可能です。Fortran95 は Fortran90 に対して、Fortran90 は Fortran77 に対して上位互換であるため、それぞれの規格が混在しているようなソースプログラムもコンパイルできます。

| コマンド  | 内容                     |
|-------|------------------------|
| ifort | Fortran 77 90 95 をサポート |
| icc   | C をサポート                |
| icpc  | C++をサポート               |

※ --help オプションを指定して頂くとコンパイラオプションの一覧が表示されます。

PATH や LD\_LIBRARY\_PATH 等 Intel Compiler の環境設定は、ログインサーバ、計算サーバ共に /etc/profile.d/intel.sh (.csh) にて自動的に行われます。Intel Compiler は 2013 年 6 月現在、v13.1.2 (2013.4.183) が利用可能なように設定されています。

### 3.2 MPI

#### 3.2.1 MPI 実行環境

ログインサーバと計算サーバは MPI 実行環境として icc でビルドされた MVAPICH2-1.8 を搭載しています。

計算サーバ phi01-16 で MPI プログラムを実行するには、各計算サーバにパスワード無しでログインする必要があります。たとえば、以下のコマンドの結果が正常に返る必要があります。

```
phi $ ssh phi01 hostname
```

2013 年 6 月より、MPI 通信に InfiniBand が使えるようになりました。InfiniBand 経由のアクセスにおいても、各計算サーバ(従来のホスト名に -ib を付与します)にパスワード無しでログインする必要があります。つまり、以下のコマンドの結果が正常に返る必要があります。

```
phi $ ssh phi01-ib hostname
```

各計算サーバにパスワード無しでログインできるように、アカウント作成後に一度、下記の作業をしておきます。

```
phi $ ssh-keygen -t rsa
Generating public/private rsa key pair.
Enter file in which to save the key (/home/test/.ssh/id_rsa): ENTER 入力
Created directory '/home/test/.ssh'.
Enter passphrase (empty for no passphrase): ENTER 入力
Enter same passphrase again: ENTER 入力
Your identification has been saved in /home/test/.ssh/id_rsa.
Your public key has been saved in /home/test/.ssh/id_rsa.pub.
The key fingerprint is:
0d:a8:52:3e:0a:be:ad:f4:df:2d:d8:71:e6:41:33:94 test@phi.aics22.riken.jp
The key's randomart image is:
+--[ RSA 2048]-----+
|           .          |
|        . E          |
|       .. O          |
|      O . *          |
| .. +   S +          |
|.. O . . +          |
| O.   O = .          |
|. +   ..O..          |
| O.O.. ...           |
+-----+
phi $ cd ~/.ssh
phi $ cp id_rsa.pub authorized_keys
phi $ chmod 600 authorized_keys
```

なお、上記の作業は、ログイン端末で、/etc/ssh\_config ファイルにおいて Forwardagent yes とすることで代えられます。

その他、PATH, LD\_LIBRARY\_PATH 等の mvapich2 の環境設定は、ログインサーバ、計算サーバ共に /etc/profile.d/usr.sh (.csh) にて自動的に行われます。

### 3.2.2 MPI コードのコンパイル

mpicc コマンドでソースコードをコンパイルしてください。

```
phi $ mpicc hello.c
```

### 3.2.3 MPI プログラムの実行

計算サーバ phi01-16 で MPI プログラムを実行させるには、mpirun コマンド実行時に -f オプションで計算サーバ名を列挙したテキストファイル(下の例では hostfile.txt)を指定して下さい。

```
phi $ mpirun -np 16 -f hostlist.txt -env OMP_NUM_THREADS 8 loop_mpi -l 8192 -t 0.01 -n 1024 -m 1024
```



---

計算サーバ名を列挙したテキストファイルは、MPI 通信を Ethernet 経由で行うか、InfiniBand 経由で行うかによって、内容が異なります。**MPI 通信を Ethernet 経由で行う場合は**、以下の例のような hostfile.txt を作成します。

```
phi $ cat hostlist.txt
phi01
phi02
...(省略)...
phi16
```

一方、**MPI 通信を InfiniBand で行う場合は**、以下の例のような hostfile.txt を作成します。

```
phi $ cat hostlist.txt
phi01-ib
phi02-ib
...(省略)...
phi16-ib
```

### 3.3 バッチジョブ

2013 年 6 月現在、それまで利用可能であった LSF は利用できません。