MPI 備忘録（環境構築編）

・実行環境
フロントマシン
CPU：Ryzen 7 3700X
GPU：Geforce RTX 3070
メモリ：DDR4-3200 64GB
ドライブ：USB3.2 64GB
バックマシン
CPU：Core i5 3320M
GPU：Intel 内蔵グラフィックス
メモリ：8GB
ドライブ：SSD 128GB

OS：Ubuntu 22.04

基本的には「高校生のためのクラスター入門」に書いてある通りです。そこに書いていないけど必要だったことや、出てきたエラーについてをここに書いておきます。

ちなみに、「MPICH」は「エムピッチ」と読むらしいです。

① ダウンロードとインストール
・OS のインストールは、「高校生…」にならいます。
・MPI を入れる前に
MPI のインストールには、「gcc（C コンパイラ）」、「gfortran（Fortran コンパイラ）」、「make（ビルドツール）」が必要になります。コマンドで

＜フロント＞

```
sudo apt install build-essential //gcc と make を一緒にインストール
sudo apt install gfortran
```

を打ちます。ここで、「高校生…」ではインストールコマンドが「yum」ですが、ここでは「apt」となっています。これは、Linux のなかで、Ubuntu などの Debian 系 OS は「apt」、CentOS などの RedHat 系は「yum」となっています。
「高校生…」にある通り、ダウンロードして、展開して、ビルドして…とやってもいいですが、コマンドから直接インストールすることもできます。というかこっちのほうが簡単です。

＜フロント＞

```
sudo apt install mpich
sudo apt install mpich-devel
```

② MPI がインストールされているか確認

まず、フロント 1 台だけで MPI を動かしてみます。いきなり並列環境を作ると、エラーが出たときにネットワークによるものなのか MPI によるものなのかわからないからです。

<プログラム①：sample1.c>

```
#include <stdio.h>
#include <mpi.h>

int main(int argc, char *argv[]){
    int rank; //ランク（自分が何プロセス目か）
    int proc; //全プロセス数
    int namelen = 10;
    char *name[namelen]; //プロセスを行うマシンの名前

    MPI_Init(&argc, &argv); //MPI の初期化
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &rank); //ランクの取得
    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &proc); //全プロセス数の取得
    MPI_Get_processor_name(name, &namelen); //名前の取得

    printf("Hello, World! From process %d of %d, %s¥n", rank, proc, name);
    MPI_Finalize(); //MPI を終了

    return 0;
}
```

以下のコマンドでコンパイルします。パスやファイル名は適宜変更してください。

＜フロント＞

cd ＜ファイルパス＞ //sample1.c を保存した場所 ~/program/MPI など

mpicc -o sample1 sample1.c

すると、なんか色々出てくるかもしれませんが、「error」と書いていなければ（「warning」だけなら）たぶん大丈夫です。コンパイルに成功すると、該当フォルダに sample1 という実行ファイルができます。

＜フロント＞

ls

sample1.c sample1 //表示結果

つづいて、以下のコマンドで実行します。

＜フロント＞

mpirun -np 4 ./sample1

-np の後に続く 4 という数字は、sample1 を並列実行するプロセスの数です。上の例では、sample1 を

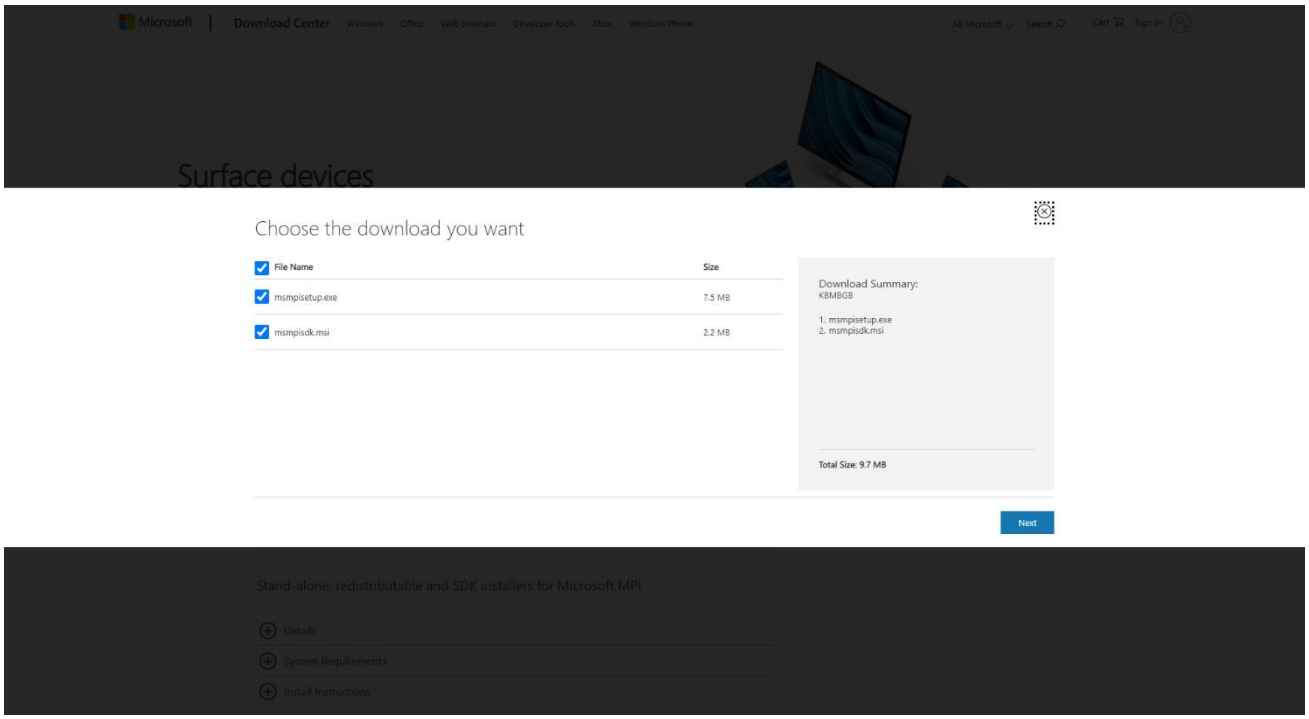
４並列で実行することを表します。
そうすると、たぶんこんな感じに出力されると思います。

```
Hello, World! From process 0 of 4, node01
Hello, World! From process 2 of 4, node01
Hello, World! From process 1 of 4, node01
Hello, World! From process 3 of 4, node01
```

※１個目の数字（１から４）は順番が変わることがあります。
こう表示されれば、**MPI** のインストールは成功しています。

◎Windows で MPI を使う

MPI のプログラムを書く時などは Windows のほうが都合がいいこともあるので、MPI の Windows へのダウンロード方法も書いておきます。
下のサイトの「MS-MPI のダウンロード」というところから、MS-MPI をダウンロードします。
https://learn.microsoft.com/ja-jp/message-passing-interface/microsoft-mpi
ダウンロードに移って、赤の「Download」をクリックすると、下のような画面になります。



２つにチェックを入れて、Next を押すと、ダウンロードが始まります。
ダウンロードした２つのインストーラーを実行して、インストールします。
デフォルトのインストール場所は、

```
mpiexec.exe（実行ファイル）: C:¥Program Files¥Microsoft MPI¥Bin
mpi.h（ヘッダーファイル）: C:¥Program Files(x86)¥Microsoft SDKs¥MPI¥Include
msmpi.lib（ライブラリ）: C:¥Program Files(x86)¥Microsoft SDKs¥MPI¥Lib¥x64
```

です。

それでは、プログラムを実行します。
まず、gcc などの C コンパイラをダウンロードしておき、 2 ページの sample1.c を、以下のコマンドでコンパイルします。Windows では、コマンドを打つときはコマンドプロンプトか Windows PowerShell を使います。

```
gcc sample1.c -o sample1.exe -I” C:¥Program Files(x86)¥Microsoft SDKs¥MPI¥Include” -L” C:¥Program Files(x86)¥Microsoft SDKs¥MPI¥Lib¥x64”
```

-o は出力先を指定するオプション、-I がインクルードするヘッダーファイル（sample1.c の 3 行目で mpi.h をインクルードしている）のパスを指定するオプション、-L がライブラリファイルを指定するオプションです。
コンパイルに成功したら、sample1.exe という実行ファイルができるはずです。そうしたら、以下のコマンドで実行します。

```
mpiexec -np 4 sample1.exe
```

Linux でやったときと同じく、-np オプションの数値は並列実行するプロセス数です。成功したら、 3 ページにあったものと同じような結果が出力されると思います。
＜エラー対策＞
Q 用語“mpiexec”は、コマンドパレット……として認識されませんでした。名前が正しく…
といわれたら
A mpiexec.exe のパスが環境変数に通っていないと思われます。「コントロールパネル」を開き、「環境変数」で検索して「システム環境変数の編集」を開いてください。出てきたウィンドウの下のほうの表にある「Path」をクリックし、C:¥Program Files¥Microsoft MPI¥Bin のパスを追加します。そして、コマンドプロンプトを再起動すれば行けると思います。環境変数の追加方法はいろんなサイトに記載されているのでそれを参考にしてください。

③ ネットワークの構築

並列処理を複数のマシンで行うため、ネットワーク環境を作ります。
まず、フロントマシンとバックマシンを、LAN ケーブルでスイッチングハブにつなぎます。ここでのハブは 1 番安いやつでいいです。

3-1 IP アドレスの設定

まず IP アドレスを設定します。以下の設定はフロント・バック共通です。
ターミナルを開き、以下のコマンドを打ちます。

```
ip -a
```

すると、こんなかんじに表示されると思います。

```
1: lo: <LOOPBACK>…
    link/loopback …
    inet …
    …
2: ens4s0: …
    Link/ether …
    inet …
```

ここで、下線を引いた「ens4s0」という文字列を覚えておきます。（マシンによって異なります）
Ubuntu で固定 IP アドレスを設定するには、/etc/netplan/**-cloud-init.yaml（**は数字 2 桁）を編集します。ここで、netplan が読み込むこの yaml ファイルには、アルファベット順で参照し、最後に参照したものが優先されるという特徴があります。そのため、たとえば 10-cloud-init.yaml と 20-cloud-init.yaml というファイルがあったとすると、後者の設定のほうが優先されます。
今回は、デフォルトの設定も残すため、**-cloud-init.yaml をコピーして編集します。ここでは、**が 01 という数値であったとします。

```
cd /etc/netplan
cp 01-cloud-init.yaml 10-cloud-init.yaml  //ファイルのコピー
vi 12-cloud-init.yaml または sudoedit 12-cloud-init.yaml
```

個人的に sudoedit のほうが使いやすくおすすめです。
そうしたら、以下のように書き込みます。

```
network:
    ethernets:
        ens4s0  //上で覚えた文字列
            dhcp4: false
            dhcp6: false
            addresses: [192.168.1.30/24]  //末尾の 30 は 2~254 までの任意の数
            gateway4: 192.168.1.1
            nameservers:
                addresses: [8.8.8.8]
    version: 2  //これはたぶん最初から書いてある
```

ちなみに、4 行目と 5 行目の「DHCP」は、IP アドレスを自動で割り振る仕組みです。ここでは自分で IP アドレスを設定するのでオフにしておきます。
終わったら、以下のコマンドで設定を更新します。

```
sudo netplan apply
```

これで、IP アドレスが変わっているはずです。ip a コマンドで調べてみてください。

ここで、フロントとバックがちゃんとつながっているか確認します。以下のコマンドを打ってみてください。

```
ping 192.168.1.32  //さっき設定した、自分のではない IP アドレス
```

１秒に１行出力されるので、適当なところで **Ctrl + C** を押します。そうすると、以下のように表示されます。

```
PING 192.168.1.32 …… 56 data bytes
64 bytes from 192.168.1.32 …… : …… time=0.501 ms
64 bytes from 192.168.1.32 …… : …… time=0.499 ms
64 bytes from 192.168.1.32 …… : …… time=0.481 ms
64 bytes from 192.168.1.32 …… : …… time=0.519 ms
64 bytes from 192.168.1.32 …… : …… time=0.522 ms
64 bytes from 192.168.1.32 …… : …… time=0.514 ms

--192.168.1.32 ping statistics—
6 packets transmitted, 6 received 0% packet loss, time 3.036ms
……
```

ここで注目するのは、下線を引いた〇％ packet loss というところです。これが 0%ならば、通信は成功しています。一方、通信に失敗している場合は、100% loss と表示されます。

＜通信に失敗する場合＞

上から順に試してみてください。

・ping で指定した IP アドレスは正しいですか？

・sudo netplan apply をしましたか？

・LAN ケーブルはちゃんと刺さっていますか？ハブの電源は入っていますか？

・ここまででできなかったら、3-1 の最初に戻って、もう 1 回 IP アドレスを設定しなおしましょう。

・それでもできなければ、設定する IP アドレスを変えてみてください。

3-2 SSH の設定

次に、SSH 通信の設定をします。

ちなみに、SSH というのはコンピューターどうしをリモートアクセス（有線・無線にかかわらず）する際に通信を暗号化してやり取りするためのプロトコルです。Secure Shell の略です。昔は、リモートアクセスには TELNET というプロトコルを使っていたようなのですが、TELNET は通信がすべて平文で行われており、セキュリティ上問題があることから、現在では SSH 通信が主流となっています。

次に、ssh 関連のパッケージをインストールします。

＜フロント＞

```
sudo apt install openssh-server
sudo apt install openssh-clients
```

＜バック＞

```
sudo apt install openssh-server
```

そうしたら、SSH 関連の設定を変えます。/etc/ssh/sshd_config を開きます。

＜フロント・バック＞

```
cd /etc/ssh
sudoedit sshd_config
```

以下の部分を変えます。

```
#PubkeyAuthentication yes
→PubkeyAuthentication yes （#を削除）
```

編集が終わったら、sshd を再起動し、設定を反映させます。

＜フロント・バック＞

```
sudo systemctl restart sshd
```

これで SSH の初期設定が完了しました。

3-3 SSH 通信

では、SSH を使って通信してみます。

SSH の暗号化には、パスワード認証方式と公開鍵認証方式の 2 つがありますが、MPI で通信する際にいちいちパスワードを入力していられないので、公開鍵方式を使います。公開鍵暗号に関しては、結構複雑なので、いろいろ読んで頑張って理解してください。

まず、公開鍵を作ります。SSH 通信では、~/.ssh ディレクトリ（~は Desktop とか Documents などがある、いわゆるホームディレクトリ）を使うので、それを作っておきます。

＜フロント＞

```
cd ~
mkdir .ssh
ssh-keygen -t rsa -N “” -f ~/.ssh/key1_rsa
```

ssh-keygen が鍵を生成するコマンドです。**-t** オプションは暗号の方式を決めるものです。ここでは **RSA** 暗号を採用しています。**-N** はパスフレーズを指定するものです。パスフレーズとは、パスワードの強い版みたいなやつです（「ワード」じゃなく「フレーズ」なので長い)。上述のとおりパスワードなんていらないのでパスフレーズなしを指定しています。**-f** オプションは鍵を生成する場所を指定するものです。「高校生…」にある方式と違って、ここではオプションで一括指定しています。どっちでもいいです。

終わったら、**ls** コマンドで鍵が生成されているか見てみましょう。**key1_rsa** と **key1_rsa.pub** というのがあるはずです。

次に、作った公開鍵をバックマシンに渡します。

＜バック＞

```
cd ~
mkdir .ssh
```

＜フロント＞

```
ssh-copy-id -i ~/.ssh/key1_rsa user@192.168.1.32
```

ここで、user は 6 ページの下のところで宛先のマシンにあるユーザー名（管理者アカウントで OK）を、192.168.1.32 は送信先のバックマシンの IP アドレスを入力してください。IP アドレスのところはホスト名（PC 名、たとえば学校から貸与されたものなら SF11223344 とか　コマンド hostname で調べられる）
これが終わったら、鍵交換に成功しているはずです。コマンドラインにも「”ssh” ”192.168.1.32”を試してみて！」みたいな内容が表示されていると思います。ということで、つないでみます。

＜フロント＞

```
ssh user@192.168.1.32
```

これで、パスワード入力が求められずにつなげられたら成功です。「Last login: なんとかかんとか」みたいに表示されると思います。

ちなみに、生成する鍵の名前を id_rsa にすると-i オプションをつけずに済みます。

＜パスワードが必要になる場合＞
・バックマシンを見て、鍵が渡されているか確認（~/.ssh に authorized_key があればよい）
・そもそもフロントマシンにリモートアクセスしていないか（リモートアクセスした状態でのパスワードなしリモートアクセスはできないっぽい）
・鍵を作り直してみる

3-4 NFS の設定

NFS は、Network File System の略で、あるマシンにあるファイルを、同じネットワーク上にあるほかのマシンからもアクセスできるようにするシステム（プロトコル）です。Google ドライブをパソコンと同期させると Windows のエクスプローラーからも Google ドライブのフォルダが見えるようになる、みたいな感じだと思います。
まずインストールします。ここらへんは OS によって異なります。

＜フロント＞

```
sudo apt install nfs-kernel-server
```

＜バック＞

```
sudo apt install nfs-common
```

次に、NFS として公開するディレクトリを/mpi とします。
NFS として外部のマシンからのアクセスを許可する設定をします。

＜フロント＞

```
cd /etc
sudoedit exports
```

これに、以下を書き込みます。

```
/mpi 192.168.1.32(rw,no_root_squash)
```

構文は、指定されている IP アドレスですが、192.168.1.0/24 のように CIDR 表記で書くこともできます。この場合、192.168.1.1 ~ 192.168.1.254 までを許可するということと同義です。

引数の rw は、読み書き(Read, Write)可能であることを示します。
できたら、NFS サーバを再起動します。

＜フロント＞

```
sudo systemctl enable nfs-blkmap.service --now
```

そのあとは、「高校生…」にあるようにバックの/etc/fstab を編集すれば、NFS が有効化されるはずです。フロントの共有ディレクトリにファイルを追加したり編集したりして、ちゃんと同期できているか確認してください。

今後、プログラムファイルはそのディレクトリに入れることになります。

――私はこのやり方でできませんでした――
マウントしたら、……not parmitted みたいな表示が出ました。

3-4 番外編　公式ドキュメントを読もう

上に書いてある方法で 2 回やって 2 回ともダメだったのでおとなしく公式ドキュメントを見ることにします。
URL はこれ→ https://ubuntu.com/server/docs/service-nfs
（つながらないときは wayback machine をつかうとできます）
以下、””内はすべて上サイトからの引用です。
・introduction
“NFS allows a system to share directries and files with other over a network”
そのままです。その下には NFS を使えばディスク容量を節約できるよーみたいなことが書いてあります。
・インストール
サーバー向け（フロントマシン）のインストールコマンドは、

```
sudo apt install nfs-kernel-server
```

のようです。
また、NFS を開始するには

```
sudo systemctl start nfs-kernel-server.sevice
```

だそうです。上にある sudo systemctl enable nfs-blkmap.service は、このコマンドに書き換えたほうがよさそうです。

・設定
先ほどと同じように、/etc/exports を編集します。

```
/mpi 192.168.1.32(rw,no_root_squash,no_subtree_rock)
```

ここで、no_subtrr_rock はセキュリティ認証をするかしないかの設定だそうです。そんなものあったら MPI が通らないので no を設定します。
適用するには次のコマンドを打ちます。

```
sudo exportfs -a
```

次はクライアント（バック）の設定です。
先ほどと同じように、nfs-common をインストールしたら、コマンドからマウントします。

```
sudo mount 192.168.1.30:/mpi /mpi
```

このとき、何も表示が出ずにコマンドが終わったら、次のコマンドで NFS の疎通確認をします。

```
df -h
```

これで、最下行に 192.168.1.30:/mpi と表示されていたら成功です。あとは、fstab の設定もすれば終了です。

④ MPI を動かす

いよいよ動かす、その前に、１つインストールするものがあります。

＜バック＞

```
sudo apt install mpich
```

MPICH のディレクトリも NFS でアクセスしてしまえばバックにインストールする必要はありません。「高校生…」でやっていることはこれです。ただ、私の環境では NFS がうまくいっているか微妙な感じだったので、個別インストールすることにしました。
1 台でやった時と同じように mpicc でコンパイルします。

```
mpicc sample1.c -o a.out
```

次に、ホストファイルを書きます。これは、どのマシンで何プロセス動かすかを決めたファイルのことです。共有ディレクトリ内で作成し、編集します。

＜フロント＞

```
cd /mpi
sudo touch hosts
sudoedit hosts
```

＜ホストファイル書式＞

```
IP アドレス:プロセス数 user=ユーザー名
IP アドレス:プロセス数 user=ユーザー名
IP アドレス:プロセス数 user=ユーザー名
IP アドレス:プロセス数 user=ユーザー名
…
```

＜ホストファイル例＞

```
192.168.1.30:2 user=front
192.168.1.32:3 user=backnode01
192.168.1.33:3 user=backnode11
```

ここで、ユーザー名は、各マシンに渡した鍵を持っているユーザーの名前を入れてください。フロントマシンも含め同一のユーザー名の場合は、ここを省略することが可能です。プロセス数は、そのマシンで実行したいプロセスの数です。この指定では、上から順にプロセス 0、プロセス 1、プロセス 2、となるようです。実際に実行されるプロセス数は mpirun のオプションとして指定されます。そのオプションの値が hosts に書かれたプロセス数より少なければ該当プロセスまでが割り当て（例えば、上に書い

た hosts で 4 プロセスを実行すると、プロセス 0,1 が user=front で、プロセス 2,3 が user=backnode01、user=backnode11 はおそらく仕事をしない）られます。また、オプション地のほうが多ければ、hosts に書かれた数を超過したプロセスは各マシンに均等に割り振られるようです。
長々と書きましたが、ようやく実行です。

＜フロント＞

```
mpirun -f hosts -np 8 ./a.out
```

これで、以下のように表示されると思います。

```
Hello, World! From process 2 of 8, back01
Hello, World! From process 4 of 8, back01
Hello, World! From process 5 of 8, back02
Hello, World! From process 7 of 8, back02
Hello, World! From process 6 of 8, back02
Hello, World! From process 3 of 8, back01
Hello, World! From process 0 of 8, frontmachine
Hello, World! From process 1 of 8, frontmachine
```

表示されたら成功です。
◎ssh_askpass と表示される場合
意味：ssh 通信でパスワード要求が発生しています。
原因 1：hosts に鍵を渡したユーザー名が記載されていない（ユーザー名を書かないと、おそらくシステムはフロントマシン内のユーザー名で探しに行く。例えば、上の hosts ではフロントのユーザー名が front、バックが backnode01、backnode11 となっているが、ユーザー名を書かないとシステムはバックマシン内の front という名前のユーザーにアクセスを求める。当然そんなユーザーはいないので接続は成立しない。）
私はこれで詰まってました。
原因 2：鍵が正しく渡されていない
ssh IP アドレス コマンドで、パスワード入力なしで接続できるかどうか確かめてください。

・参考サイト
公式ドキュメントを見るのが一番ですが、それだけを見てもわからないところは多いので、ある程度説明しているサイトを載せておきます。
追記　でもやっぱり最後は公式ドキュメントに助けられました。

MPI の環境構築や基本コマンドまとめ
https://qiita.com/kkk627/items/49c9c35301465f6780fa
ssh-copy-id で公開鍵を渡す
https://qiita.com/kentarosasaki/items/aa319e735a0b9660f1f0
CentOS 7 で NFS サーバを構築してみた
https://qiita.com/tanuki_mujina/items/5c706b2eab6e7eed71fd

MPICH2 のインストール
https://www.nslabs.jp/mpi-setup.rhtml
MPI 超入門（C 言語編）
https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/13/MPIprog.pdf
NFS サーバの構築手順（Ubuntu 20.4 編）
https://changineer.info/vmware/hypervisor/vmware_ubuntu_nfs.html
【Ubuntu】固定 IP アドレスの設定（無線 LAN、Wi-Fi 対応）：netplan
https://office54.net/iot/linux/ubuntu-ipaddress-netplan

MPICH 公式ドキュメント
インストールガイド
https://www.mpich.org/static/downloads/4.0.3/mpich-4.0.3-installguide.pdf
ユーザーガイド
https://www.mpich.org/static/downloads/4.0.3/mpich-4.0.3-userguide.pdf
公式 Wiki
https://github.com/pmodels/mpich/blob/main/doc/wiki/Index.md
Wiki 内の実行コマンドに関するヘルプ
https://github.com/pmodels/mpich/blob/main/doc/wiki/how_to/Using_the_Hydra_Process_Manager.md

補足
・間違ってるところや質問等あったら言ってください
・数日で作ったものなのでもっといいやり方があると思います