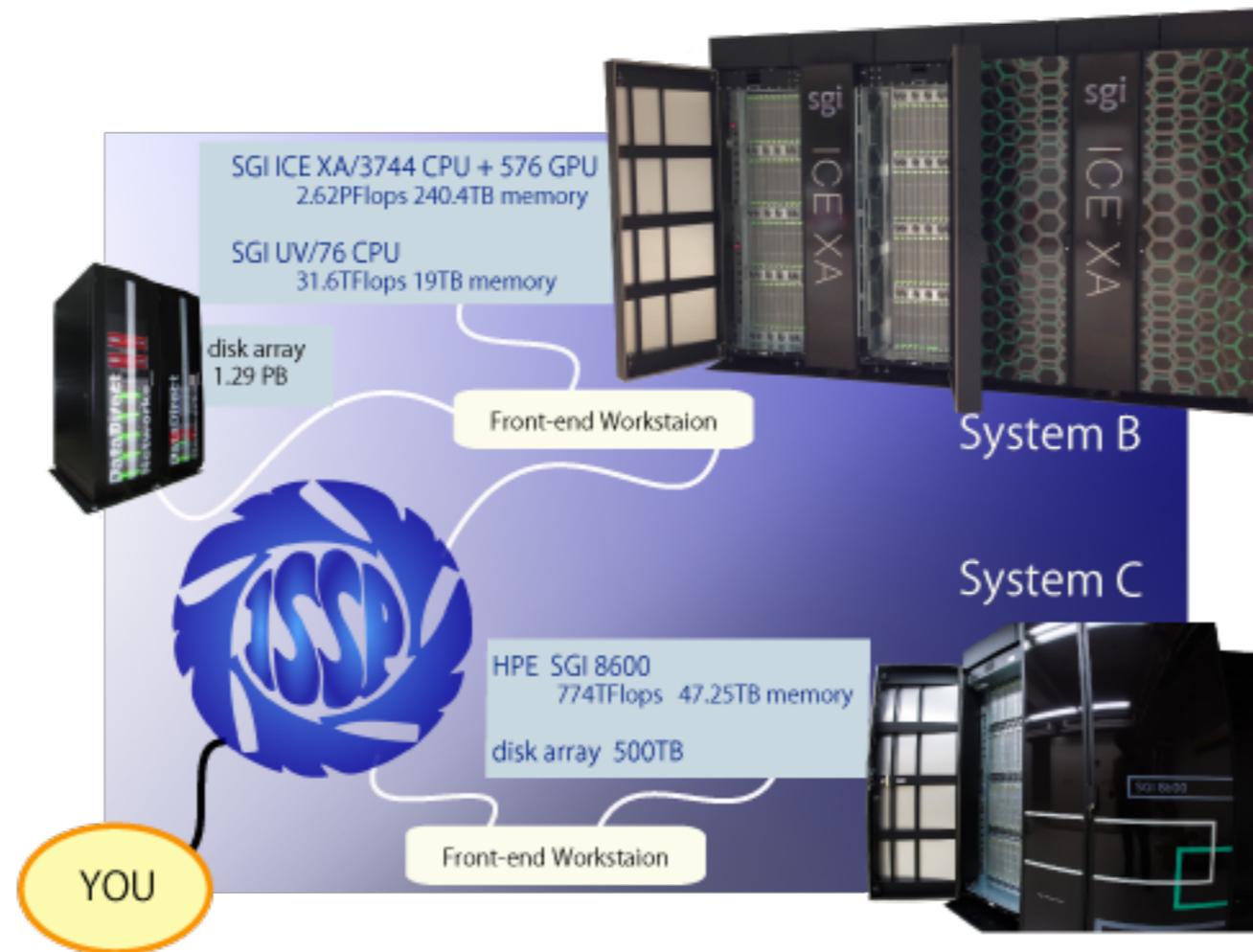


スーパーコンピュータでのDCoreの使用方法



吉見 一慶

東京大学物性研究所 特任研究員 (PCoMS PI)

ソフトウェア高度化推進チーム

1. sekireiの性能

- Fat ノード (2 ノードまで使用可能)

CPU: Intel Xeon 2.6 GHz (10 cores) ×4

主記憶: DDR4-2133 1 TB (2ノード使用で2TB相当)

- CPU ノード(144 ノードまで使用可能)

CPU: Intel Xeon 2.5 GHz (12 cores) ×2

主記憶: DDR4-2133 128 GB (128ノード使用で16TB相当)

- システムBで計算可能なサイズの日安

Spin 1/2 39サイト($S_z=0$)、Hubbard 20サイト(half-filling)

2. sekireiを使用するには？(1)

以下の手順で申請すれば利用可能です。

1. 研究代表者の登録
2. 研究課題を申請 (B, C, Eクラスは6月,12月の2回)
3. 利用審査
4. 報告書の提出

利用の流れの詳細は下記URLに記載してありますので、ご参照ください。

<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/visitor/overview>

2. sekireiを使用するには？(2)

小さい計算向けのクラス：Aクラス

Aクラスの概要

■ 申請ポイント：100 ポイント以下

■ 申請回数：半期ごとに1回申請が可能。

ただし、A以外のクラスですでに利用している
研究代表者(グループ)の申請は不可。

■ 報告書は必要なし。

その他申請クラスの詳細については <http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/visitor/about-class> をご参照ください。

2. sekireiを使用するには？(3)

100ポイントでどの程度計算可能？

- Fat ノードを 1 ノード 1 日利用：4ポイント消費

→ のべ25日間の使用が可能。

(ポイント消費のルールは ISSP スパコンのマニュアルに記載)

ex.) $N=30$, $Sz=0$ のカゴメ格子の Lanczos 法での計算

Fat ノード 1 ノード40cpuを使用：100 分程度で計算完了

消費ポイント = 0.33 ポイント \sim 4 ポイント/日 \times 2/24 日

→ 簡単な試計算は十分可能。

3. sekireiで利用可能なソフトウェア

- ・ システムBにプリインストールされているソフトウェア
 - ISSPスパコンページの「利用案内」 - 「インストール済みアプリケーション」に記載
 - プリインストールソフトウェア一覧 (各ソフトウェアの詳細はMateriApps参照)
ISSPが実行方法などのサポートをするもの(黒)、開発者へ問い合わせるもの (青)
1. 第一原理計算関連
 - OpenMX, VASP, [QUANTUM ESPRESSO](#), [RESPACK](#)
 2. 量子格子模型ソルバー関連
 - ALPS, HΦ, mVMC, DSQSS, DCore, TeNeS, [ALPSCore/CT-HYB](#), [TRIQS](#)
 3. 分子動力学関連
 - LAMMPS, [Gromacs](#), [ERmod](#), [feram](#)
 4. その他
 - K ω (Shifted-Krylov), [Rokko](#), Chainer, cuDNN, Julia

4. sekireiでのソフトウェア実行 (1)

- ・ 事前準備

1. sekireiへのログイン

配布した紙を参考に、端末を開き以下のコマンドを打ってください(MA LIVE!でも可).

```
$ ssh アカウント名@sekirei.issp.u-tokyo.ac.jp
```

→ パスワードを入力

2. 環境構築

DCore関連のソフトウェアを使用できるように環境をコピーします.

```
$ cp /home/t0001/t000100/.bashrc .
```

```
$ source .bashrc
```

4. sekireiでのソフトウェア実行 (2)

- ・ システムB sekireiにDCoreと使用するソフトウェア一式はプリインストール済。
- ・ 各種ファイルの置き場所 (覚書)
 - DCoreのインストール場所
/home/issp/materiapps/dcore
 - 実行ファイルのインストール場所
/home/issp/materiapps/dcore/dcore-2.0.2-1/bin/
 - サンプルスクリプトと入力ファイルの場所
/home/issp/materiapps/dcore/dcore-2.0.2-1/examples/

4. sekireiでのソフトウェア実行 (3)

1. 計算環境の準備 (今回ははじめの作業でここは完了済)

```
$ source /home/issp/materiapps/dcore/dcorevars.sh
```

2. 入力ファイルの準備 (今の場合はtutorial/dcore/squareを使用)

```
$ cp -rf /home/issp/materiapps/dcore/dcore-2.0.2-1/examples/square .
```

3. ジョブの投入 (サンプルスクリプトを既に用意してあるのでそれを使用)

```
$ cd square && cp /home/issp/materiapps/dcore/sample_jobscript/dcore.sh .  
$ qsub dcore.sh
```

ref.) Webページ「ソフトウェア高度化」 - 「システムBでの利用」 - 「DCore」

今回はお試し用のキュー(i18cpu)を使用(普段はデバッグに利用)。

1. ノード数は最大18ノードまで
 2. CPU数は1ノードあたり24
 3. 実行時間は最大30分まで
- 講習会后1週間まで使用できます。

4. sekireiでのソフトウェア実行 (4)

dcore.shの中身

```
#!/bin/sh
#QSUB -queue ccms_i18cpu ← キューの指定 (今回はこのキューのみ使用可能)
#QSUB -node 4 ← ノードの個数の指定
#QSUB -mpi 4 ← プロセス数の指定 (MPI)
#QSUB -omp 24 ← スレッド数の指定 (OpenMP)
#QSUB -place pack ← ジョブプロセス CPUコア配置方針
#QSUB -over false ← 要求したコア数以上の並列数のジョブの実行可否
#PBS -l walltime=00:10:00 ← 最大計算時間 (時間 : 分 : 秒)
#PBS -N dcore ← ジョブ名
```

```
## https://issp-center-dev.github.io/DCore/tutorial/square/square.html
source /home/issp/materiapps/dcore/dcorevars.sh ← 実行環境呼び出し
{PBS_O_WORKDIR} ← 今のディレクトリへ移動
```

```
dcore_pre dmft_square.ini
dcore dmft_square.ini --np 1
dcore_check dmft_square.ini --ext=eps
dcore_post dmft_square.ini --np 1
```

計算実行

実習では**赤い部分**を書き換えて色々とお試しく下さい。

5. (補) sekireiでの利用回数測定

対象ソフトウェア：ソフトウェア高度化対象プログラム

プリインストールソフト
(計測用*)

システムB

- XXXXXXXXXXXX
- 並列数
- 高度化ソフトA



ユーザー

- ユーザーID
- 並列数
- 高度化ソフトA

ユーザーIDを暗号化

個人情報は見えない
状態に

(*) 利用率を計測しないソフトの選択も可能