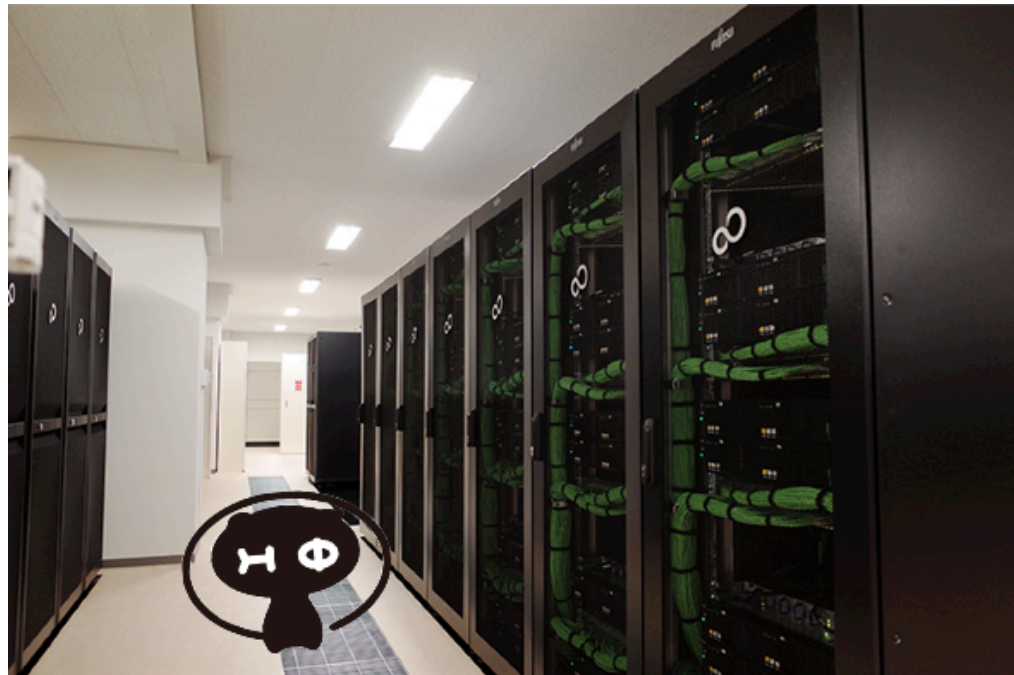


ITOへのログイン、演習環境設定

井戸 康太(東京大学 物性研究所)



ITOとは？

AI・機械学習・ビッグデータ解析などのデータサイエンスと最先端科学技術シミュレーションに対応する研究基盤への提供を目指したスパコン



- ▷ パブリッククラウドとの連携
 - オープンデータ活用
- ▷ 対話的な利用環境の拡充
 - 大規模データのプリポスト処理
- ▷ GPGPU搭載

システム構成



ユーザ



パブリッククラウド
(Amazon web serviceなど)



ストレージ

スパコンITO



フロントエンド
(ログインノード、
基本・大容量メモリノード)

基本・大容量メモリノード



バックエンド
(システムA, B)

ITOの性能 (バックエンドのみ)

▷ Subsystem A(CPU)

- CPU: Intel Xeon Gold 6154 (3.0 GHz, 18 core)× 2 / node
- メモリ:DDR4 192 GB / node
- Top 500で37位, 国内7位(2018年11月)

▷ Subsystem B(CPU, GPU)

- CPU: Intel Xeon Gold 6140 (2.3 GHz, 18 core)× 2 / node
- GPU: NVIDIA Tesla P100 (3584 core) × 4 / node
- メモリ:DDR4 192 GB / node, HBM2 : 16 GB / 1GPU

※使用できる最大使用ノード数・実行時間はリソースグループによって異なります。

https://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/system/ITO/subsystem/06_limit.html

ITOを使用するためには？

▷ 利用者資格を有するもの(詳細は[こちら](#))

- 大学・高専の教員、学生
- 研究機関の研究職員
- 民間企業
- 外国人/国外居住者の場合、外為法厳守

▷ 基本的には有料(詳細は[こちら](#))

- 例：サブシステムA
 - 共有タイプ:月額 740円/node
 - ノード固定タイプ:月額 5900円/node
- [共同研究制度](#)を利用すると無料

ITOを使用するためには？

- ▷ 利用申請書を記入する(詳細は[こちら](#))
 - 課題名、担当経理者、申請者情報などを記入

- ▷ 提出し、審査結果を待つ
 - だいたい1月程度

- ▷ 利用開始！

- ▷ [トライアルユース](#)
 - 最大1ヶ月間無料！
 - 申請手続き/利用報告の手続きが必要
 - アカウントは通常利用へと引き継げる

ITOで使えるソフトウェア

- ▶ 計算科学:16種
 - Gaussian, VASP, LAMMPS, HΦ など

- ▶ データ解析:3種
 - Rなど

- ▶ 機械学習:4種
 - TensorFlow, Chainerなど

- ▶ 流体・構造解析:4種
 - OpenFOAMなど

- ▶ 科学技術計算:2種
 - Mathematica, Matlab

- ▶ 画像処理:2種

より詳細な情報は
[こちら](#)

ソフトウェアの情報はMateriAppsへ！

- ・ **200**を超える物質科学アプリケーションやツールを紹介
- ・ 月間 10000+ ページビュー、2000+ ユニークユーザ(H30年度)
- ・ 「やりたいこと」からアプリケーションを検索
- ・ 検索タグ：「特徴」「対象」「手法・アルゴリズム」
- ・ **アプリの使い方紹介(レビュー)**
- ・ 開発者情報、アプリの魅力・将来性
- ・ 講習会情報・事例紹介
- ・ キーワード解説

The screenshot displays the MateriApps website interface. At the top, it shows the current number of applications (253) and navigation options for Japanese (JP) and English (EN). The main navigation bar includes links for News, Seminars, Events, Applications, Application Search, Keyword Explanations, Examples, and Application Consultation. A prominent banner encourages users to try applications without installation. Below this, a 'Category Search' section offers various scientific fields as filters, such as Electronic Structure Calculation (Solid State Physics), Molecular Dynamics, and Machine Learning. A sidebar on the right features a social media profile for 'MateriApps' with a 5-star rating and a brief description of the platform's purpose. The bottom section is titled 'News / Event' and highlights an upcoming event: 'CCMS Hands-on: ALAMODE Seminar' on March 1, 2019, accompanied by a molecular simulation image.

ITOへの接続 ～Tera Term編～

- ▷ デスクトップのTera Termを開いて、ホスト名が `ito.cc.Kyushu-u.ac.jp` であることを確認したのちにOKをクリックしてください
- ▷ 配られた紙をもとに、ユーザ名とパスワードを入力してください
- ▷ RSA鍵を使うというラジオボタンを押して、デスクトップにある `id_rsa` を秘密鍵として選択してください

ITOへの接続 ～Tera Term(2)編～

- ▷ グラフ描画ソフトgnuplotを使える設定をします
- ▷ まず、設定→端末で、“自動切換え(VT<->TEK)”のチェックを入れてください。(右真ん中あたりです)
- ▷ 次にターミナル上で“gnuplot”と打ち、gnuplotを立ち上げてください
- ▷ “set terminal vttek”と打てば使えるようになります

ITOへの接続 ～MA LIVE!編～

- ▷ デスクトップのid_rsaをテキストエディタで開いて、中身をコピーしてください
- ▷ Ma LIVE!でid_rsaというファイルを新規作成しコピーした中身を貼り付けてください
- ▷ MA LIVE!で端末を開き以下のコマンドを打ってください

```
$ chmod 0600 id_rsa  
$ ssh -Y -i id_rsa アカウント名@ito.cc.kyushu-u.ac.jp  
→パスワード入力
```

ITOでのHΦ実行(1)

- ▷ HΦ ver. 3.1.2実行のための関連ディレクトリ
 - 実行ファイルの置き場: /home/rist/HPhi-3.1.2/bin
 - サンプル: /home/tmp/HPhi3.1.2_sample

▷ 入力ファイルの準備

```
$ cp -r /home/tmp/HPhi3.1.2_sample sample  
$ cd sample/CG/Heisenberg
```

▷ ジョブスクリプトのコピー&実行

```
$ cp /home/tmp/HPhi3.1.2_sample/HPhi_standard.sh ./  
$ pjsub HPhi_standard.sh
```

ITOでのHPhi実行(2)

▷ ジョブスクリプトの中身

- | | | |
|----|--|-----------------|
| 1 | <code>#!/bin/bash</code> | ←bashを使うことを明示 |
| 2 | <code>#PJM -L "rscunit=ito-a"</code> | ←ITOのどのシステムを使うか |
| 3 | <code>#PJM -L "rscgrp=ito-a-lecture"</code> | ←どのリソースグループを使うか |
| 4 | <code>#PJM -L "vnode=1"</code> | ←ノード数 |
| 5 | <code>#PJM -L "vnode-core=36"</code> | ←ノードあたりのコア数 |
| 6 | <code>#PJM -L "elapse=00:30:00"</code> | ←実行時間 |
| 7 | | |
| 8 | <code>module load intel/2018.3</code> | ←intelのmpiをロード |
| 9 | <code>HPhi=/home/rist/HPhi-3.1.2/bin/HPhi</code> | ←HPhiの実行体への環境変数 |
| 10 | <code>export OMP_NUM_THREADS=8</code> | ←OMPスレッド数の設定 |
| 11 | | |
| 12 | <code>cd \$PJM_O_WORKDIR</code> | ←ジョブ投入ディレクトリへ移動 |
| 13 | | |
| 14 | <code>mpirun -np 4 \$HPhi -s stan.in</code> | ←4プロセスでHPhiを実行 |

Tips

- ▷ 流したジョブ状況はpjstatで確認できる
- ▷ 間違えた場合は、`pjdel JOB_ID` で削除可能
`pjdel -u username` で一括削除も可能
- ▷ `rscgrp=ito-a-lecture`は講習会用グループ
`vnode`は4まで指定可能
- ▷ 困ったら[公式ページ](#)を見るか、“man コマンド名”をログインノードで叩く