CCMS Webハンズオン: PHYSBO講習会 ~物性研スパコンを用いた使用方法の説明

吉見 一慶 東京大学物性研究所 特任研究員 ソフトウェア高度化推進チーム

- 1. ohtakaの説明
- 2. ohtakaでのPHYSBOの利用方法

PASUMS

Project for advancement of software usability in materials science



3. 実習

1-1. ohtakaの性能

- Fat ノード (2 ノードまで使用可能)

CPU: Intel Xeon Platinum 8280, 2.7GHz (28core) ×4

- 主記憶: DDR4-2933, 64GB×48 = 3TB/node
- CPU ノード(144 ノードまで使用可能)

CPU: AMD EPYC 7702, 2.0GHz (64core) ×2

主記憶: DDR4-3200, 16GB×16 = 256GB/node

1-2. ohtaka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. 利用審查

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

1-2. ohtaka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。

1-2. ohtakaを使用するには?(3)

100ポイントでどの程度計算可能? - CPUノードを1ノード1日利用:1ポイント消費 - Fat ノードを 1ノード 1 日利用:4ポイント消費 (ポイント消費のルールは ISSP スパコン Webペー ジの「利用案内」-「ポイント消費制」に記載) http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/ visitor/point

1-3. ohtaka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)

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, ALPSCore/CT-HYB, TRIQS, TeNeS

3. 分子動力学関連

LAMMPS

4. その他

Kω(Shifted-Krylov), 2DMAT, PHYSBO

赤字は東大物性研ソフトウェア開発・高度化プロジェクトに関連して導入された ソフトウェア (プロジェクトの詳細は 東大物性研スパコンページに記載!)

2-1. ohtakaでのソフトウェア実行 (1)

- ・事前準備
 - ・ohtakaへのログイン

メールで受け取ったアカウント・パスワードを使用します。 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 -Y アカウント名@ohtaka.issp.u-tokyo.ac.jp
- → パスワードを入力

2-2. ohtakaでのソフトウェア実行 (2)

- システムB ohtakaにPHYSBOはプリインストール済。
- ・ 各種ファイルの置き場所 (覚書)
 - サンプルスクリプトと入力ファイルの場所 サンプルスクリプト: /home/issp/materiapps/intel/physbo/sample_jobscript 入力ファイル: /home/issp/materiapps/intel/physbo/physbo-1.0.1
- ・計算の流れ

1. 入力ファイルの準備

\$ cp -rf /home/issp/materiapps/intel/physbo/physbo-1.0.1 .
\$ cd physbo-1.0.1

2. ジョブスクリプトのコピー (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)

\$ cp /home/issp/materiapps/intel/physbo/sample_jobscript/physbo.sh .

3. PHYSBOを実行

\$sbatch physbo.sh

2-4. ohtakaでのソフトウェア実行 (3)

physbo.shの中身



講習会では専用キュー:ccms8cpu のみ使用可能。

投げたジョブの状況の確認は

\$squeue

でできます。

(注) ccms8cpuキューはこの講習会中のみ使用可能です。

どんな場合にスパコンを使うと便利?

候補が非常に多い(探索空間が非常に広い)場合

次の候補の選定 \rightarrow 用意した全ての候補について獲得関数を計算して選定。 PHYSBOでは全ての候補に対する獲得関数の計算部を、MPI並列して候補をグルーピ ングしてプロセスに割り当てて計算するので、高速に計算可能。 \rightarrow チュートリアル「PHYSBOの基本」の「並列化」を参照。

2. Simulatorの計算コストが高い場合

Simulatorの計算コストが高く、大規模並列計算向けに高速化されている場合、 Simulatorをスパコンで計算させて、その結果を外部ファイルに記憶させてPHYSBO が読み込むという形式で計算させることが可能。

→ チュートリアル「既存の計算結果を読み込んで実行する」を参照。

(余談) 2020年度にPASUMSで開発したソフトウェア2DMATでは、探索アルゴリズムとしてNelder-Mead法、自明並列探索、交換モンテカルロ法とベイズ最適化(PHYSBOを利用)を実装しています SimulatorをPHYSBOと同様の形式で定義すれば、これらのアルゴリズムを横断的に使うことも可能で す。こちらも物性研スパコンにはプリインストール済みです。詳細は以下のページをご覧ください。 https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/2dmat/

2-5. (補) ohtaka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



個人情報は見えない (*)利用率を計測しないソフトの選択