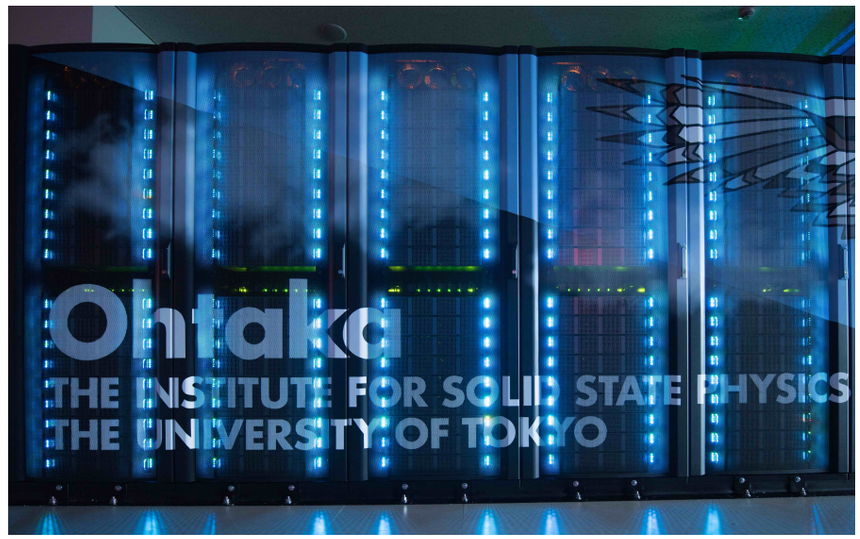
CCMS Webハンズオン：PHYSBO講習会
～物性研スパコンを用いた使用方法の説明

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

PASUMS
Project for advancement of
software usability in materials science

1. ohtakaの説明
2. ohtakaでのPHYSBOの利用方法
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

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-1.1.0-1
- 計算の流れ

1. 入力ファイルの準備

```
$ cp -rf /home/issp/materiapps/intel/physbo/physbo-1.1.0-1 .
$ cd physbo-1.1.0-1/examples
```

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

```
#!/bin/sh
#SBATCH -p i8cpu                ← キューの指定
#SBATCH -N 1                    ← ノードの個数の指定
#SBATCH -n 4                    ← プロセス数の指定
#SBATCH -c 32                   ← スレッド数の指定
#SBATCH -t 00:10:00             ← 最大計算時間 (時間：分：秒)
set -e
source /home/issp/materiapps/intel/physbo/physbovars.sh
module list
/home/issp/materiapps/tool/bin/issp-ucount physbo   ← 実行したのをカウント
python3 simple.py                    ← mpiで実行する場合には前にsrunをつける。
```

ohtaka: 128 cpu/ノード

128 * ノード数
= プロセス数 * スレッド数

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？

1. **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 → 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。
   → 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

プリインストールソフト

(計測用*)

システムB

・xxxxxxxxx

・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

(*) 利用率を計測しないソフトの選択