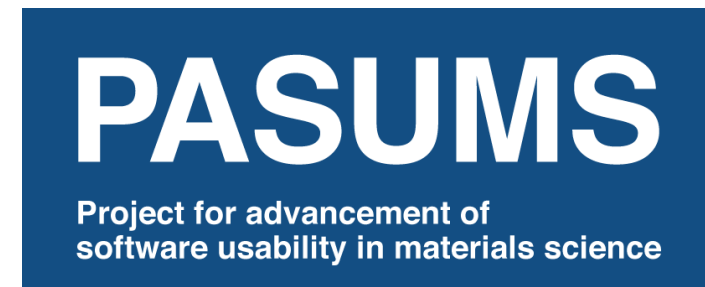


CCMS Webハンズオン：ablCS講習会 ～物性研スパコンを用いた使用方法の説明

吉見 一慶

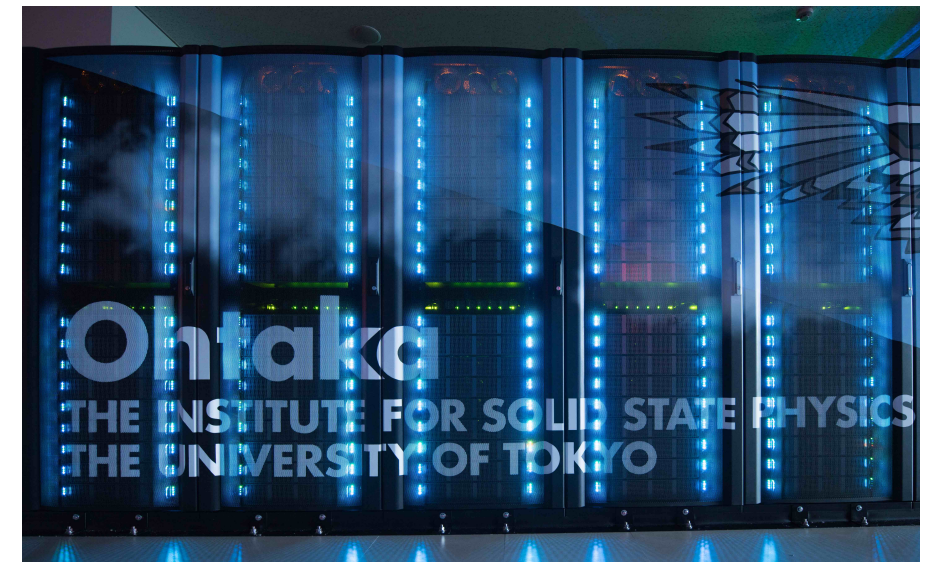
東京大学物性研究所 特任研究員

ソフトウェア高度化推進チーム



1. ohtakaでのablCSの利用方法

2. ohtakaの説明



1-1. 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

Ohtaka
THE INSTITUTE FOR SOLID STATE
THE UNIVERSITY OF TOKYO

1-2. ohtakaでのソフトウェア実行 (2)

- ・ システムB ohtakaに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/abics/sample_jobscript
入力ファイル : /home/issp/materiapps/intel/abics/abics-2.0.0-1

・ 計算の流れ

1. 入力ファイルの準備

```
$ cp -rf /home/issp/materiapps/intel/abics/abics-2.0.0-1 .  
$ cd abics-2.0.0-1/handson/activelearning_qe
```

2. job.shを実行

```
$ sbatch job.sh
```


1-3. ohtakaでのソフトウェア実行 (3)

job.shの中身 (注) ccms8cpuキューはこの講習会中のみ使用可能です。

```
#!/bin/sh
#SBATCH -p ccms8cpu
#SBATCH -J spinel
#SBATCH -N 2
#SBATCH -n 256
#SBATCH -c 1
#SBATCH -t 00:30:00
source /home/issp/materiapps/intel/abics/abicsvars.sh
module list
...
```

- ← キューの指定
- ← 投入ジョブの名前
- ← ノードの個数の指定
- ← プロセス数の指定
- ← スレッド数の指定
- ← 最大計算時間 (時間 : 分 : 秒)

ohtaka: 128 cpu/ノード
 $128 * \text{ノード数}$
= プロセス数 * スレッド数

以降の中身については、後ほど説明

投げたジョブの状況の確認は

`$squeue`

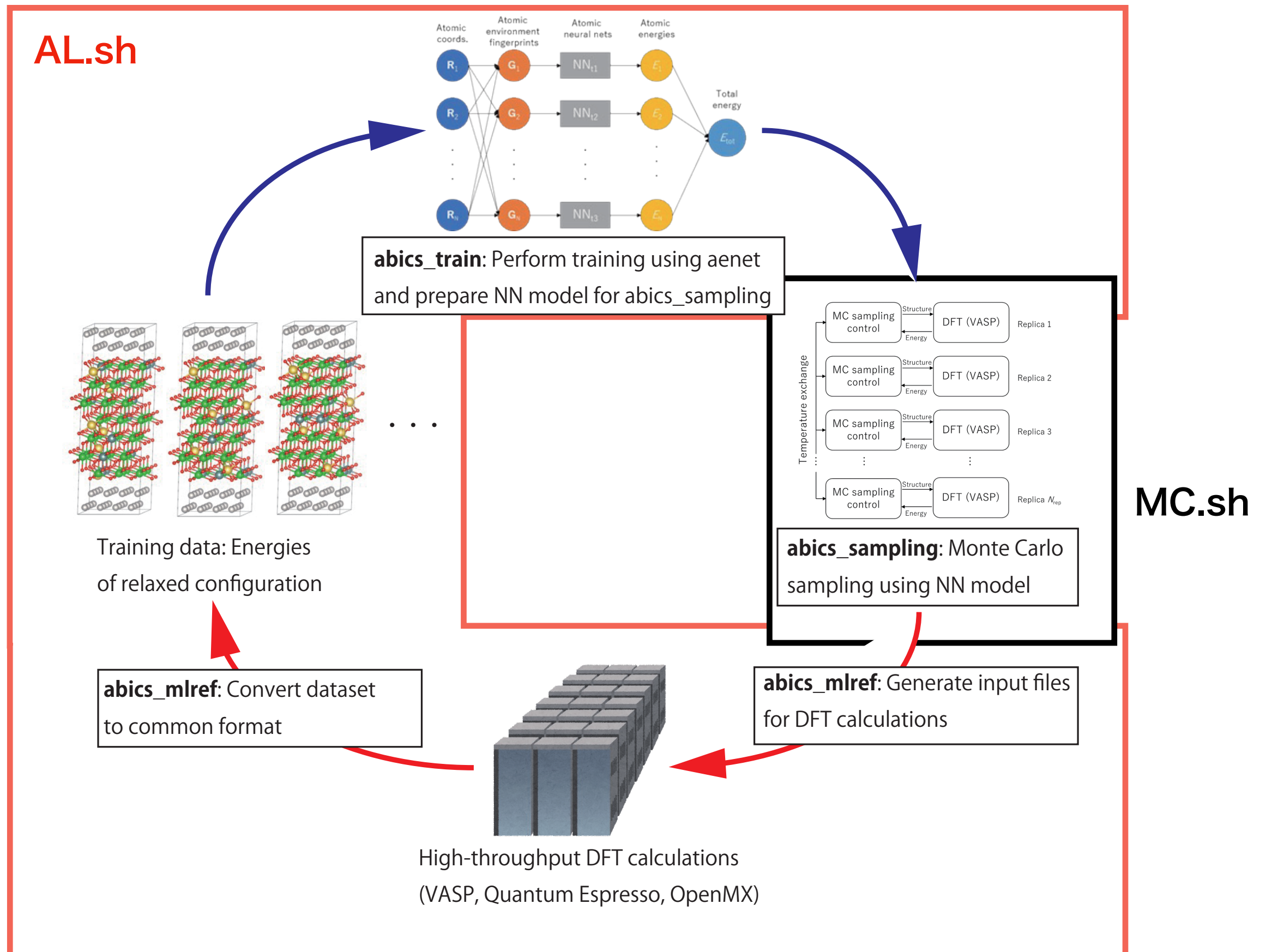
でできます。

→ 実行ジョブが確認できない場合にはSlackで連絡を。

→ ジョブが終わったら、繰り返しjob.shを実行(3回程度)。

`$ sbatch job.sh`

1-3. ohtakaでのソフトウェア実行 (4)



2-1. 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

2-2. 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。

https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/guide/application_proposal/sckyoudou/overview

2-2. 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

https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/guide/application_proposal/sckyoudou/about

をご参照ください。

2-2. 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)

<https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/guide/point>

2-3. 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, H Φ , mVMC, DSQSS, DCore, ALPSCore/CT-HYB, TRIQS, TeNeS

3. 分子動力学関連

LAMMPS

4. その他

K ω (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！)

(補)ソフトウェア開発・高度化プロジェクト

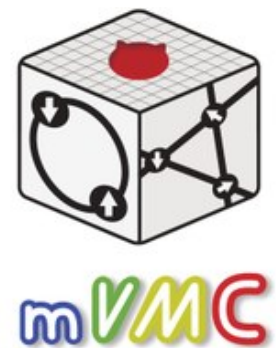
スーパーコンピュータで動く

使い勝手のよいソフトウェアの開発・整備



研究目的で開発されたソフトウェアは最先端の技術・性能を持つが、
使い勝手は重視されない場合が多い

- ・ 12月にソフトウェアを公募で募集
 - ・ 1, 2個のソフトウェアを選定
- ・ 翌年度にソフトウェア開発
 - ・ 完成後は誰にでも使えるような形式で公開
 - ・ 物性研スパコンヘインストール
 - ・ 講習会(コロナ禍ではオンライン開催)支援



URL: <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp>

2-4. (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

- ・XXXXXXXXXX
- ・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