

HΦ講習会－CCMSハンズオン講習会

応用計算に向けて

2020/05/21 Thur.
Kazuyoshi Yoshimi (ISSP)



- 01 Parallelization by vector division
- 02 Parallelization for full diagonalization
- 03 Project for advancement of software usability in materials science

Parallelization (1)

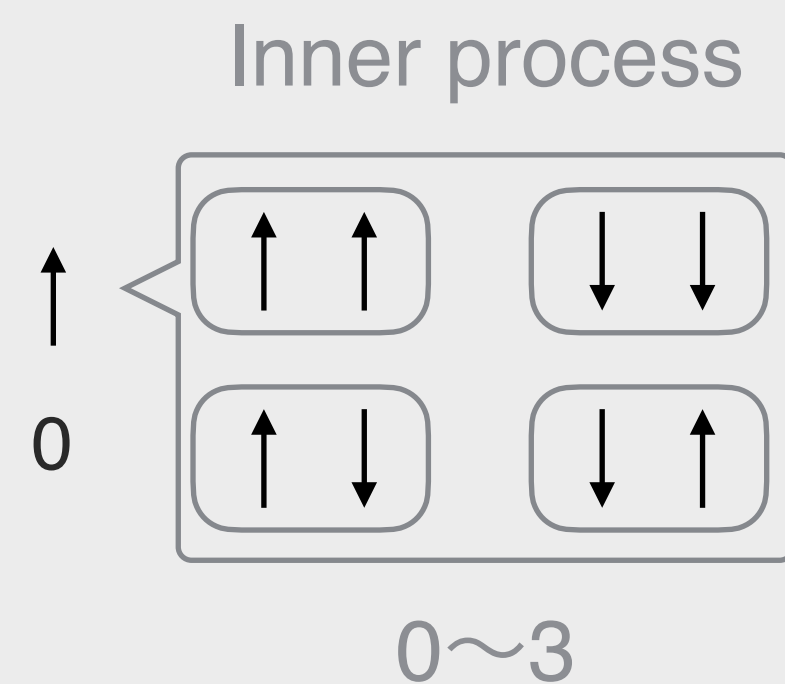
Parallelization by vector division of Hilbert space (MPI)



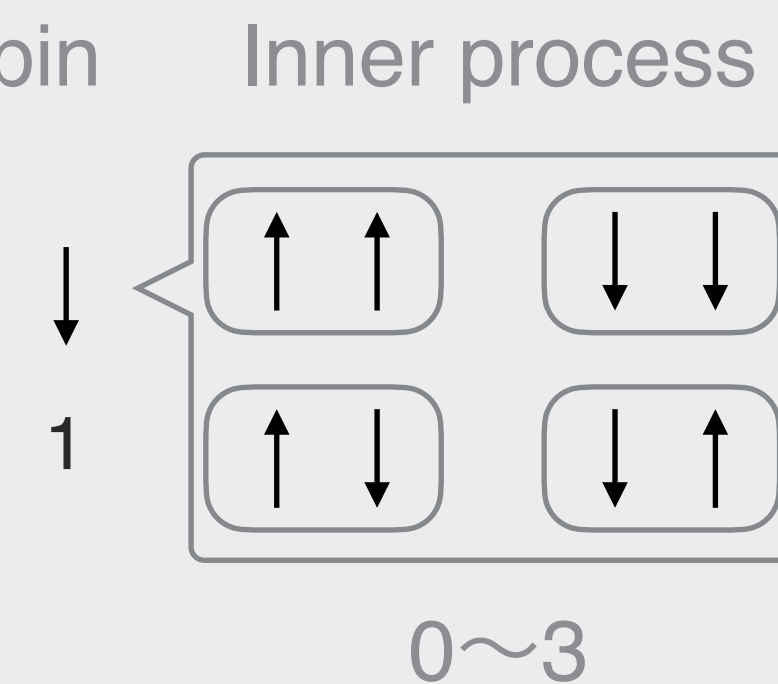
MPI parallelization: The number of processes applied to the subspace of Hilbert space
Thread parallelization: Hamiltonian vector product part using OpenMP

Ex.) MPI parallelization : Spin system (L=3, using 2 processes)

Rank 0: up spin

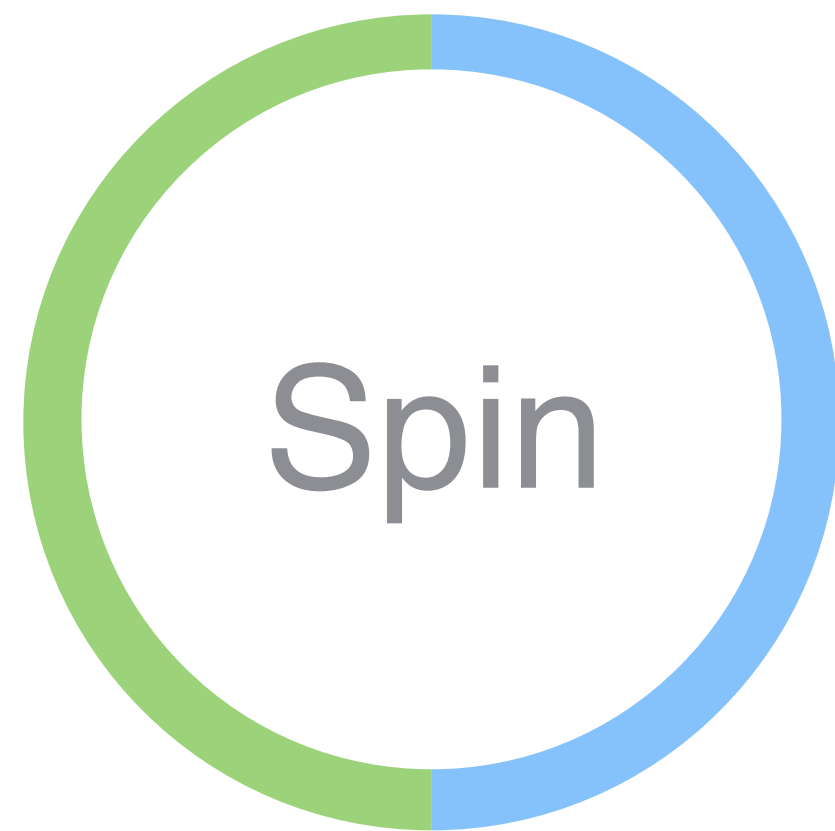


Rank 1: down spin



How to parallelize with HΦ:

Number of processes required for parallelization



↑, ↓



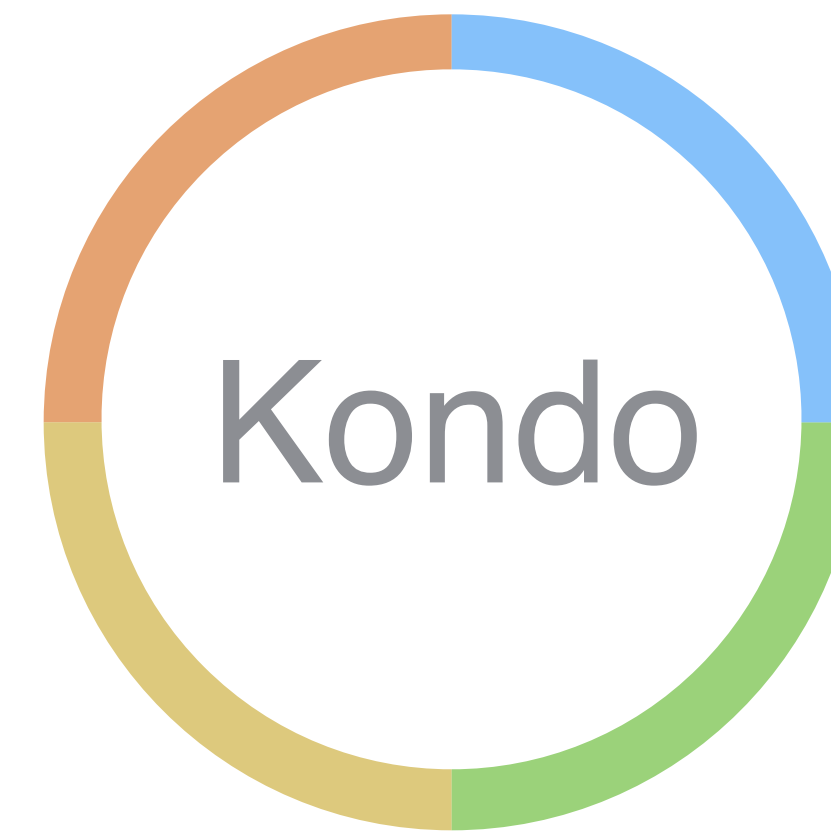
2 states per site
Process number : 2^N



0, ↑, ↓, ↑↓



4 states per site
Process number : 4^N



0, ↑, ↓, ↑↓



4 states per site (For spin,
0, ↑ ↓ states are excluded)
Process number : 4^N

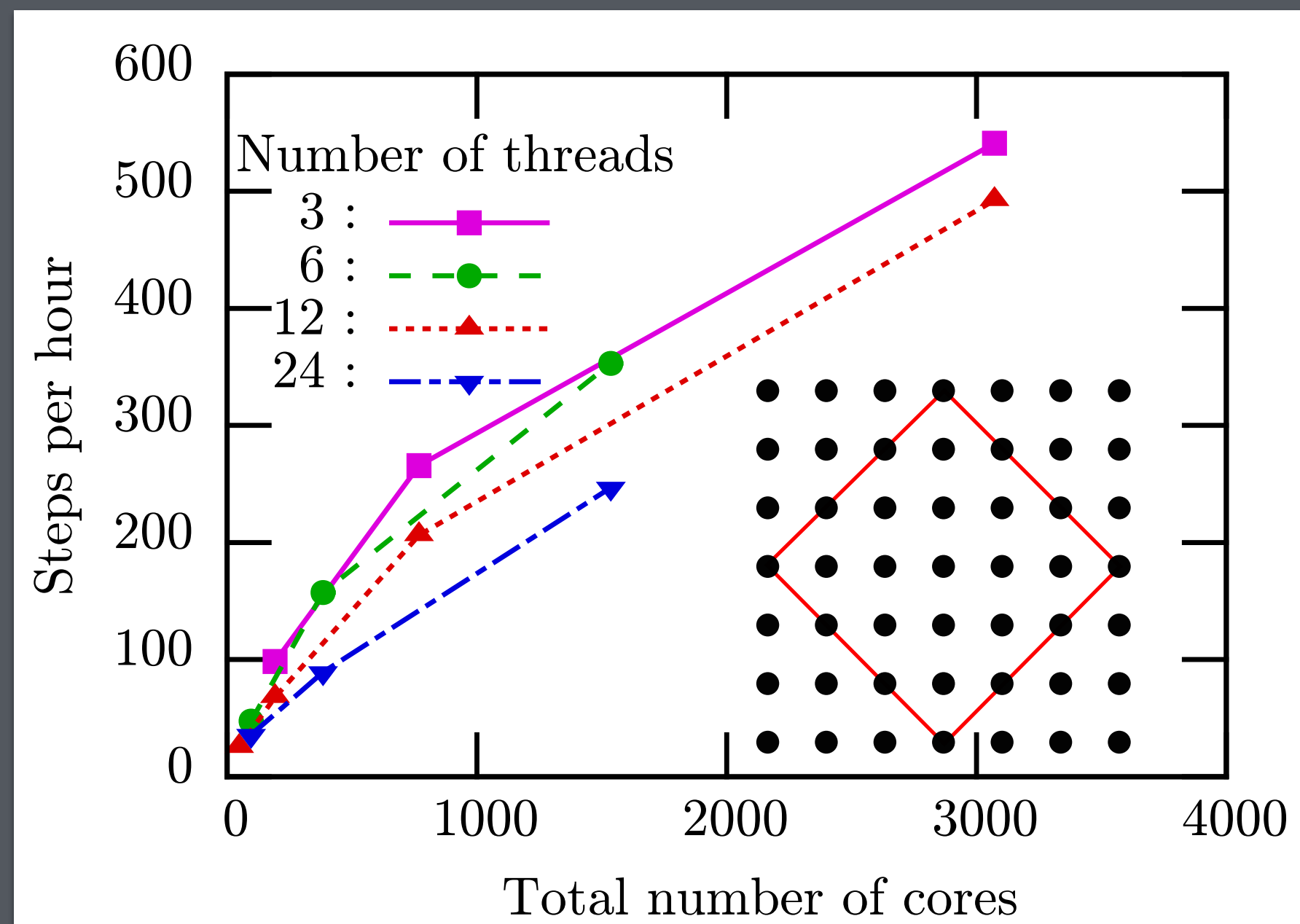
Benchmark result

Parallelization by vector division of Hilbert space



18 site Hubbard model (half-filling, $2S_z=0$, $U/t = 8$)
ISSP super computer system B

- The number of steps increases with increasing the number of cores.
- Basically, flat MPI tends to be faster.



Total number of cores dependence of TPQ steps per hour

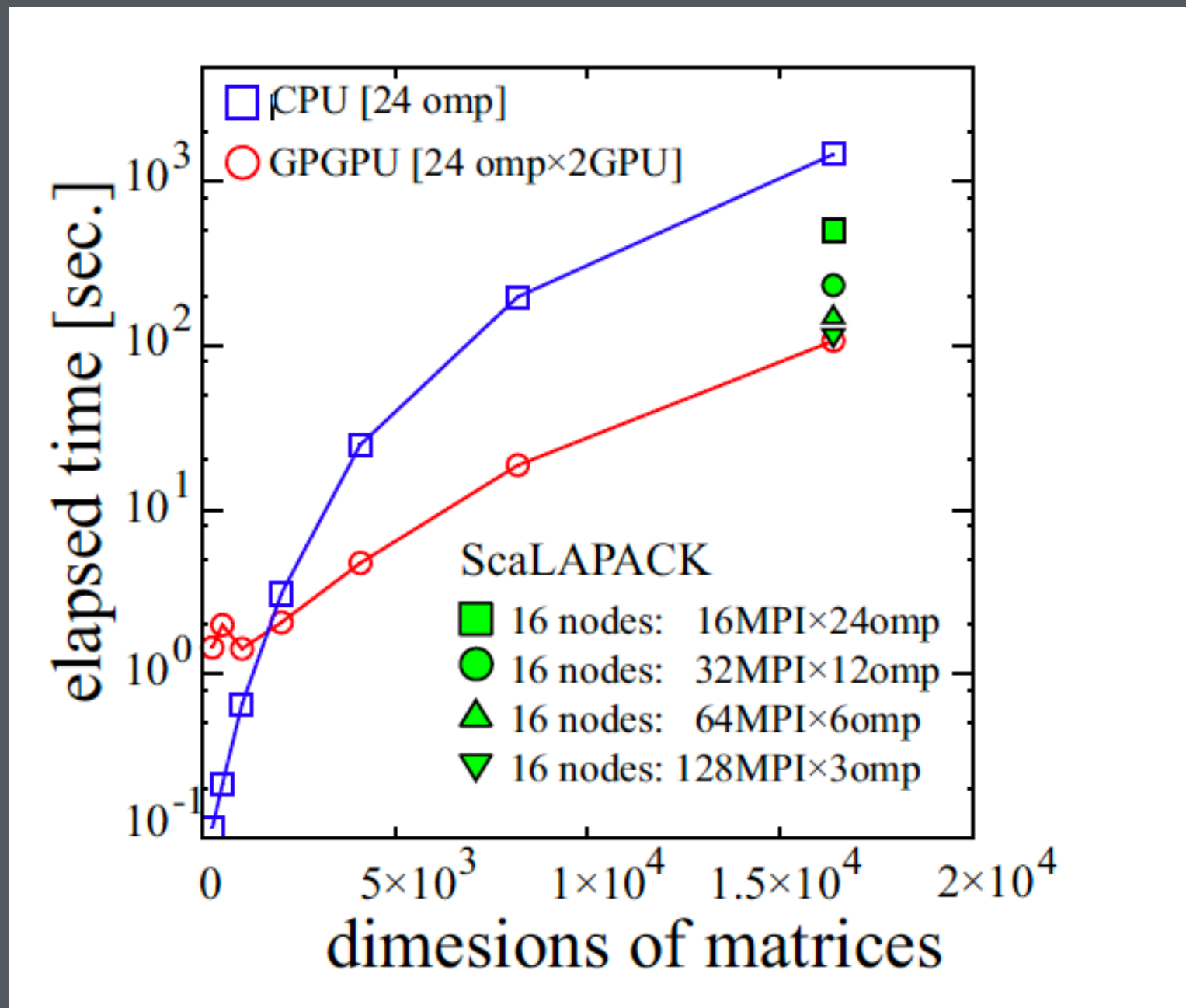
Parallelization (2)

Parallelization of full diagonalization



First, Hamiltonian matrix is calculated by single process.
Then, then matrix is diagonalized by the following library

1. LAPACK (single process)
2. ScaLAPACK (using MPI)
3. MAGMA (using GPU)



The dimensions of matrices and the elapsed time for full diagonalization

Benchmark result

~ Full diagonalization using ScaLAPACK and MAGMA



- System: ISSP Super computer systemB ACC node
 - CPU: Intel Xeon 2.5 GHz (12cores) x2
 - GPU: Nvidia Tesla K40 x 2
- ScaLAPACK: Faster with more processes.
- MAGMA works well if the matrix size is larger than 10³.

ref.) "Implementation of GPGPU computing in full diagonalization for HΦ", T. Misawa and K. Yoshimi, Activity report 2017/Supercomputer Center, Institute for Solid State Physics, The University of Tokyo, 305-307 (2017).

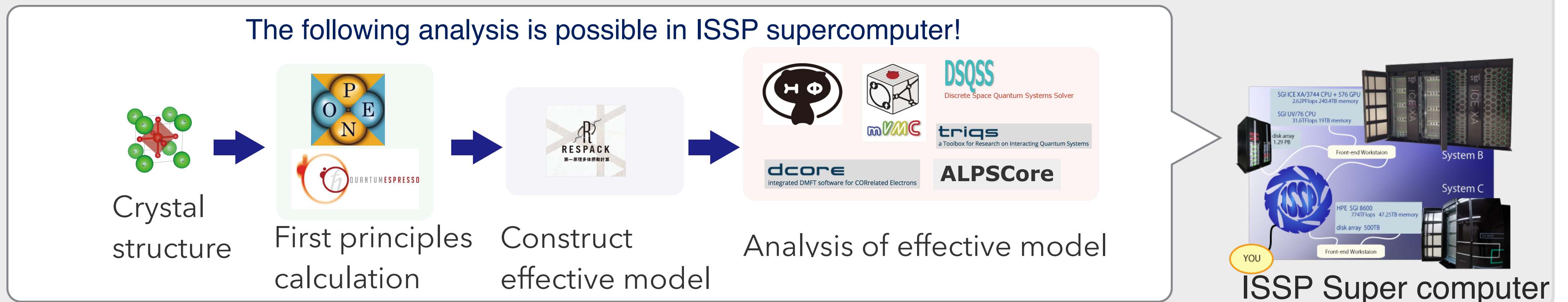
Project for advancement of software usability in materials science

To create an easy-to-use supercomputer environment by improving the usability of key software in condensed matter physics.



Upgrade 2 software per year with the following team (Workload: 5 man months per software)

- ☆ Coordinator ISSP staff (1 staff per project)
- ☆ Project manager (sometimes developer) Kazuyoshi Yoshimi
- ☆ Main developer Yuichi Motoyama



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

物性研スパコンの性能 (システムB)

- 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)

物性研スパコンを使用するには？(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>

物性研スパコンを使用するには？(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 (システムB)

■ 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。

物性研スパコンを使用するには？(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 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>

物性研スパコンで利用可能なソフトウェア(1)

- ・ システムB・C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, abICS

2. 量子格子モデルソルバー関連

ALPS, HΦ, mVMC, DSQSS, DCore, ALPSCore/CT-HYB, TeNeS, TRIQS

3. 分子動力学関連

LAMMPS

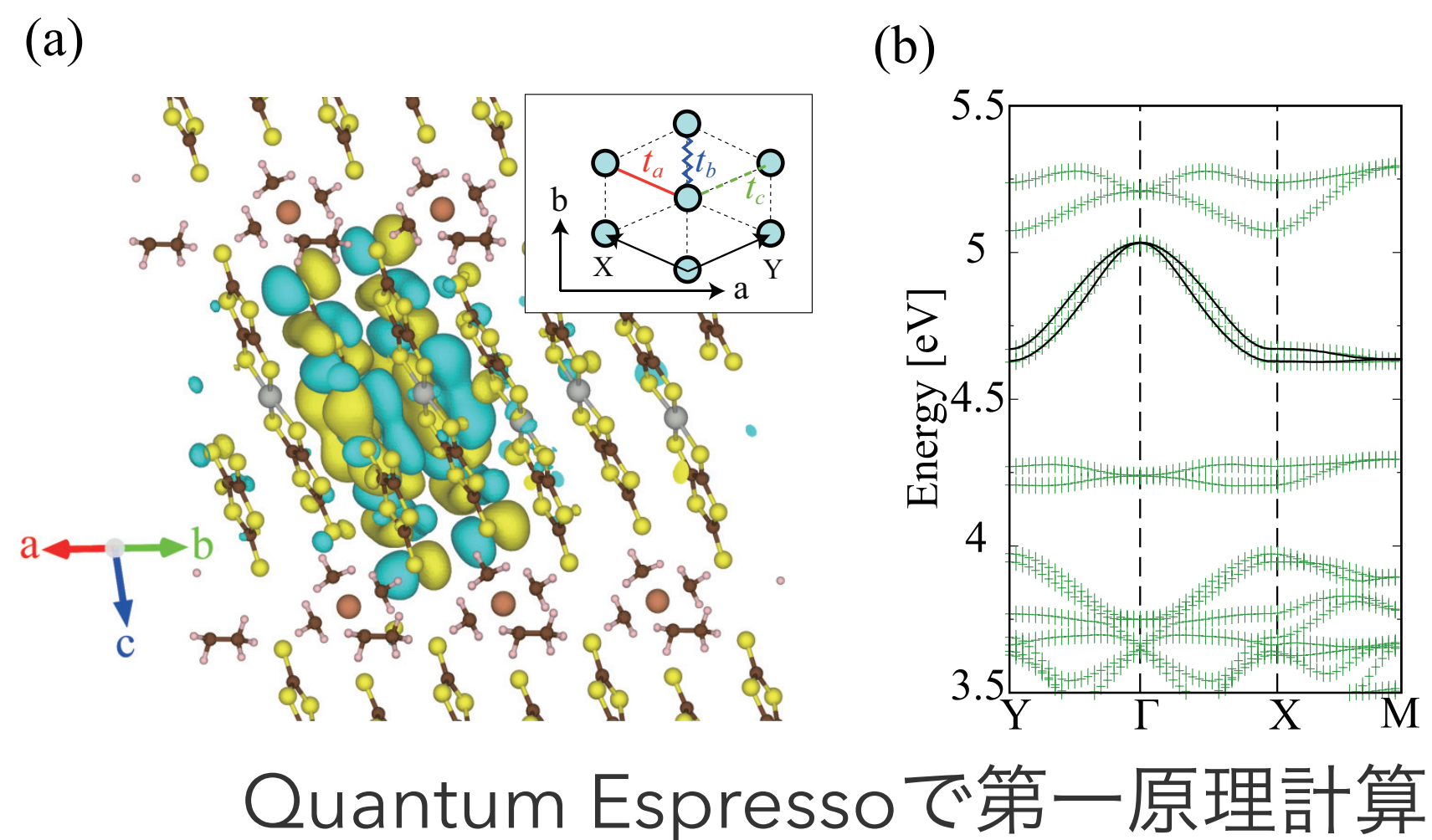
4. その他

Kω(Shifted-Krylov), Julia

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！)

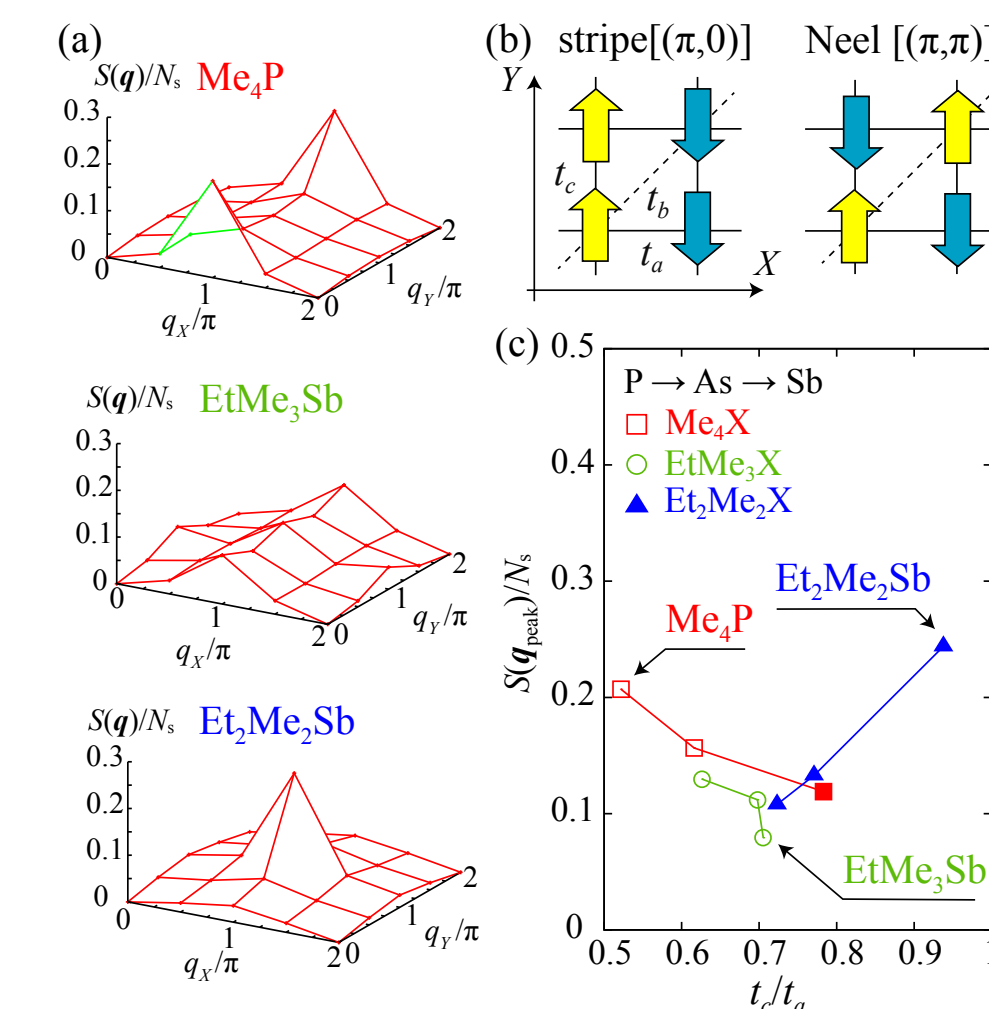
物性研スパコンで利用可能なソフトウェア (2)

結晶構造を出発点とした解析がISSSPスパコン上で可能に！



有効模型作成
by RESPACK

HΦでスピン構造因子を計算



様々な物質
に対して、
網羅的に計算

物性研スパコンで利用可能なソフトウェア (3)

2020年度ソフトウェア開発・高度化プロジェクト「ベイズ最適化パッケージCOMBO」
→ COMBOを用いたベイズ最適化によるモデル推定などが可能に！

MateriAppsレビュー記事

「量子格子模型ソルバーHΦとベイズ最適化ライブラリCOMBOを
組み合わせたモデル推定事例の紹介」

<https://ma.issp.u-tokyo.ac.jp/app-post/1684>

12サイト Heisenberg鎖のモデル推定

$$H = \sum_{i=1}^{12} J_1 S_i \cdot S_{i+1} + J_2 S_i \cdot S_{i+2} + J_3 S_i \cdot S_{i+3}$$

磁化曲線からパラメータ(J1, J2, J3)を推定 → 正しい解が得られたことを紹介。

HΦを用いたデータベースの作成も進行中(スピン系：2020年度、電子系：2021年度公開予定)。