

CCMSハンズオン：HΦ講習会

～物性研スパコンでの使用方法の解説

吉見 一慶

東京大学物性研究所 物質設計評価施設

ソフトウェア高度化推進チーム

1. 物性研スパコンの説明
2. システムB(ohtaka)でのHΦの利用方法

1-1. 物性研スパコンのスペック

物性研スパコンにはシステムBとシステムCの2つがあります。

- システムB (ohtaka) Dell PowerEdge C6525/R940

- CPUノード×1,680ノード (最大144ノードまで同時に使用可能)

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

主記憶容量: DDR4-3200, 16GB×16 = 256GB/node

- Fatノード×8ノード (最大2ノードまで同時に使用可能)

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

主記憶容量: DDR4-2933, 64GB×48 = 3TB/node

- システムC (enaga) HPE SGI 8600 ← 実習ではこちらを利用

- 252ノード (最大36ノードまで同時に使用可能)

CPU: Intel Xeon 6148 2.4 GHz (20 cores) ×2

主記憶容量: DDR4-2666 16GB × 12 = 192 GB / node

1-2. 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>

1-2. 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
(基本的には1ノードを1日使用すると1ポイント消費。

fatノードの場合は4ポイント消費。)

- 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。

1-3. ohtakaで利用可能なソフトウェア

- ・ システム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

abICS, 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

2DMAT, $K\omega$ (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！)

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

事前に送付されたアカウント情報・パスワードをもとに、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)

- HΦはohtakaにプリインストール済。
- 各種ファイルの置き場所 (覚書)
 - HΦのインストール場所
/home/issp/materiapps/intel/hphi/
 - 実行ファイルのインストール場所
/home/issp/materiapps/intel/hphi/hphi-3.5.0-1
 - サンプルファイルの場所
/home/issp/materiapps/intel/hphi/hphi-3.5.0-1/samples/

2-3. ohtakaでのソフトウェア実行 (3)

1. 計算環境の準備

```
$ source /home/issp/materiapps/intel/hphi/hphivars.sh
```

2. 入力ファイルの準備

```
$ cp -rf $HPHI_ROOT/samples ./hphi-sample  
$ cd ./hphi-sample/old/CG/Heisenberg
```

3. ジョブ投入スクリプトのコピー

```
$ cp /home/issp/materiapps/intel/hphi/sample_jobscript/HPhi_* .
```

(*) 今回はお試し用のキュー(ccms8cpu)を使用します。

<<お試しキューの制限>>

1. ノード数は最大8ノードまで同時使用可能
(ただし、ccms8cpuはトータル36ノード)。
2. CPU数は1ノードあたり128
3. 実行時間：最大30分まで(ただし講習会の時間が終わったら終了)

2-4. ohtakaでのソフトウェア実行 (4)

HPhi_standard.shの中身 (お試しキュー用に赤字部分は変更されています)

```
#!/bin/sh
#SBATCH -p i8cpu           ← キューの指定 (ccms8cpuに変更)
#SBATCH -N 1              ← ノードの個数の指定
#SBATCH -n 4              ← プロセス数の指定 (MPI)
#SBATCH -c 32            ← スレッド数の指定 (OpenMP)
#SBATCH -t 00:10:00      ← 最大計算時間 (時間：分：秒)

set -e

source /home/issp/materiapps/intel/hphi/hphivars.sh ← 実行環境呼び出し
module list

srun HPhi -s stan.in
```

ジョブの投入方法

```
$ sbatch ./HPhi_standard.sh
```

ジョブのステータス確認

```
$squeue
```

計算が終了すると、outputディレクトリに計算結果ファイルが出力されています。

2-4. ohtakaでのソフトウェア実行 (5)

ファイルをアップロード/取得する方法

- ・ アカウントにログイン
\$ sftp -Y アカウント名@ohtaka.issp.u-tokyo.ac.jp
→ パスワードを入力
- ・ 取得したいファイルがある場所まで移動
- ・ ファイルのアップロード (xxxxはファイル名)
\$ put xxxx
- ・ ファイルの取得 (xxxxはファイル名)
\$ get xxxx

<< 注意事項>>

スパコンのお試しアカウントは講習会終了後(19時)に削除されます。
必要なファイルがある場合には、
講習会終了までにファイルを取得してください。