CCMSハンズオン：mVMC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mVMC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 ← 実習ではこちらを利用
  - 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 (kugui) HPE Apollo 2000 Gen10 Plus/HPE Apollo 6500 Gen10 Plus
  - CPU: 128ノード (最大16ノードまで同時に使用可能)

    CPU: AMD EPYC 7763, 2.45GHz, (64core)×2

    主記憶容量: DDR4-3200, 16GB×16 = 256GB/node
  - ACC: 8ノード

    CPU: AMD EPYC 7763, 2.45GHz, (64core)×1
    GPU: NVIDIA A100 40GB for HGX ×4
    主記憶容量: DDR4-3200, 32GB×8 = 256GB/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 https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/guide/application_proposal/sckyoudou/about をご参照ください。

1-3. 利用可能なソフトウェア

・物性研スパコン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
「物性研スパコン」-「システムB」 or 「システムC」-「ソフトウェア」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

   PHYSBO, 2DMAT, Julia, Kω(Shifted-Krylov)

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

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)

- mVMC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)

- mVMCのインストール場所
  /home/issp/materiapps/intel/mvmc/

- 実行ファイルのインストール場所
  /home/issp/materiapps/intel/mvmc/mvmc-1.2.0-1

- サンプルファイルの場所
  /home/issp/materiapps/intel/mvmc/mvmc-1.2.0-1/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/mvmc/mvmcvars.sh
```

2. 入力ファイルの準備 (今回はStandard/Hubbard/squareを実行)

```
$ cp -rf $MVMC_ROOT/samples ./mvmc-sample
$ cd ./mvmc-sample/Standard/Hubbard/square
```

3. ジョブ投入スクリプトのコピー

```
$ cp /home/issp/materiapps/intel/mvmc/sample_jobscript/mvmc.sh .
```

(＊) 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
2. CPU数は1ノードあたり128
3. 実行時間：最大一時間まで → 本日の19時まで使用可能です。

2-4. ohtakaでのソフトウェア実行 (4)

mvmc.shの中身

(お試しキュー用に赤字部分を変更編集エディタ emacs, vimがはいっています)

```
#!/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/mvmc/mvmcvars.sh

module list               ← 実行環境呼び出し

srun vmc.out -s StdFace.def
```

ジョブの投入方法

$ sbatch mvmc.sh

無事にoutputフォルダが出来ればOK

ジョブのステータス確認

$squeue

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。