

CCMSハンズオン：TeNeS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C(enaga)でのTeNeSの利用方法
3. TeNeSの実習の前に

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. enaga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

Kw(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. enagaでのソフトウェア実行 (1)

- ・ 事前準備

- ・ enaga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@enaga.issp.u-tokyo.ac.jp
```

→ パスワードを入力

- ・ 環境設定

以下のコマンドを打ち、環境設定用のファイルを一式コピーしてください。

```
$ cp /home/t0034/tmp/* .
```

```
$ sh prepare.sh
```

以下、どのような設定が行われたかを解説します。

2-2. enagaでのソフトウェア実行 (2)

- TeNeSはenagaにプリインストール済。
- 各種ファイルの置き場所 (覚書)
 - TeNeSのインストール場所
/home/issp/materiapps/tenes/
 - 実行ファイルのインストール場所
/home/issp/materiapps/tenes/tenes-1.1.1-0
 - サンプルファイルの場所
/home/issp/materiapps/tenes/tenes-1.1.1-0/sample

2-3. enagaでのソフトウェア実行 (3)

prepare.shの中身

1. 計算環境の準備

```
$ source /home/issp/materiapps/tenes/tenesvars.sh
```

2. 入力ファイルの準備 (今回は02_AFH_squareを実行)

```
$ cp -rf $TENES_ROOT/sample/ ./tenes-sample
```

```
$ cd ./tenes-sample/02_AFH_square
```

3. ジョブ投入スクリプトのコピー

```
$ cp /home/issp/materiapps/tenes/sample_jobscript/tenes.sh .
```

(*) 今回はお試し用のキュー(ccms_i4cpu or ccms_F4cpu)を使用するため、
/home/t0034/tmp/tenes.shをコピーしています。

<<お試しキューの制限>>

1. ノード数は最大4ノードまで同時使用可能
(ただし、ccms_i4cpuはトータル12ノード、ccms_F4cpuはトータル18ノード)。
 2. CPU数は1ノードあたり40
 3. 実行時間：ccms_i4cpu：最大30分まで、
ccms_F4cpu: 24時間 (ただし講習会の時間が終わったら終了)
- 講習会の時間帯のみ使用可能です。

2-4. enagaでのソフトウェア実行 (4)

tenes.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
#QSUB -queue i4cpu           ← キューの指定 (ccms_i4cpu/ccms_f4cpuに変更)
#QSUB -node 4                ← ノードの個数の指定
#QSUB -mpi 4                 ← プロセス数の指定 (MPI)
#QSUB -omp 40                  ← スレッド数の指定 (OpenMP)
#QSUB -place pack             ← ジョブプロセス CPUコア配置方針
#QSUB -over false            ← 要求したコア数以上の並列数のジョブの実行可否
#PBS -l walltime=00:10:00    ← 最大計算時間 (時間:分:秒)
#PBS -N TeNeS                ← ジョブ名

source /home/issp/materiapps/tenes/tenesvars.sh ← 実行環境呼び出し
cd ${PBS_O_WORKDIR}          ← 今のディレクトリへ移動

tenes_simple simple.toml
tenes_std std.toml
mpijob tenes input.toml
```

ジョブの投入方法

```
$ cd ./tenes-sample/02_AFH_square
$ qsub tenes.sh
```

ジョブのステータス確認
\$qstat -u アカウント名

2-4. enaga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@enaga.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。

2-4. enagaでのソフトウェア実行 (6)

おまけ) sampleにあるpythonスクリプトの実行方法

- 02_AFH_square/run.py,
- 05_magnetization/tutorial_magnetization.py
- 05_magnetization/tutorial_magnetization_square.py

1. run.pyを開き、以下のように変更する。

`MPI_cmd = ""` → `MPI_cmd = "mpijob"`

2. tenes.shを開き、以下のように変更する。

`tenes_simple simple.toml`

`tenes_std std.toml`

`mpijob tenes input.toml`

→ `python3 xxxx.py`

(xxxxは該当するpythonスクリプト名)

3. `qsub tenes.sh`を実行

(注) enagaではデフォルトのgnuplotのversionが4.6のため、enaga上ではデフォルト設定ではplot.gpは利用できません。グラフ表示する場合には、ファイルをlocal環境で取得して、**ver. 5.0以上**のgnuplotでplot.gpを実行してください。

3. TeNeSの実習の前に

- ・ おすすめの実習の進め方
 - ・ マニュアルにあるチュートリアルの実施 (実習のはじめに説明)
 - ・ マニュアルのダウンロード
 - ・ TeNeSのホームページからダウンロード可能
 - ・ <https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/tenes/doc/manual>
- ・ simpleモードで遊んでみる。
 - ・ マニュアルの「5.2 tenes_simpleの入力ファイル」を参照
 - ・ modelの変更 (Hamiltonianを変更して試してみる)
 - ・ latticeの変更 (square, triangular, honeycomb, kagomeが選択可能)
 - ・ parameterの変更 (虚時間刻みの幅など計算条件を色々と変えてみる)
- ・ standardモードのファイル内容を確認してみる。
 - ・ simpleモードでファイルを一式作成。
 - ・ できたファイルを理解して、自分でモデルを作れるようにする。
- ・ スパコンの速度を体感する。
 - ・ サンプルの計算パラメータ(例えば、Dなど)を大きくしてみる。
- ・ やりたいことがあってTeNeSで出来るかを聞きたい場合
 - ・ slackで相談。