

HΦの計算環境構築方法マニュアル

2016年7月25日

東大物性研 ソフトウェア高度化推進チーム

目次

VirtualBox を利用した HΦ の導入.....	2
VirtualBox を利用した MateriAppsLive! の導入.....	3
MateriAppsLive! への HΦ のインストール	6
ISSP スパコンシステム B での HΦ の利用方法	8
各種ファイルの置き場所	8
実行方法	8
利用回数の測定	9
システム B sekirei の性能 (Fat ノードおよび CPU ノードの紹介).....	9
システム B の利用方法.....	10
システム B を試すには?	10
その他計算環境への HΦ のインストール方法.....	10

概要

HΦ のコンパイル・ 使用には次のものがが必要です。

- C コンパイラ(インテル、富士通、GNU など)
- LAPACK ライブラリ(インテルMKL, 富士通, ATLAS など)
- MPI ライブラリ(MPI 並列を行わない場合は必要ありません)

本マニュアルでは、上記要件が満たされた環境でのHΦのインストール・利用方法を中心に説明します。具体的には、

1. MateriAppsLive!を利用したインストール・利用方法

自分のPCにMateriAppsLive!をインストールし、HΦを利用します。計算環境がMateriAppsLive!内で整備されているため、自分のPCで簡単に試す場合におすすめです。

2. ISSPスパコンを活用した利用方法

物性研スパコンでは既にHΦがインストールされています。潤沢なメモリ・CPUが利用可能なため、ある程度大きな系での計算や高速に計算を進めたい場合におすすめです。

3. その他の計算環境でのインストール・利用方法

VirtualBoxインストール後の1.と、ほぼ同様の手順でHΦのインストールが出来ます。

について説明します。

VirtualBox を利用した HΦ の導入

HΦ をお気軽に試す場合には、計算環境一式が整備されている MateriAppsLive!¹ を利用したインストールがおすすめです。以下、順に MateriAppsLive! の導入、HΦ のインストールについて説明します。

VirtualBox を利用した MateriAppsLive! の導入

1. VirtualBox のインストール

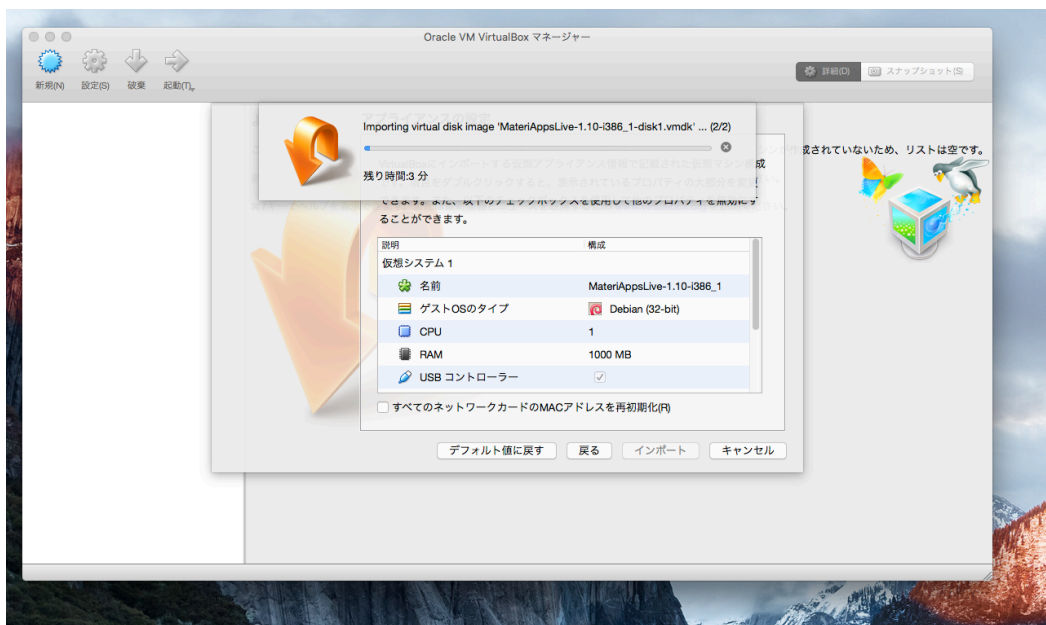
<https://www.virtualbox.org/wiki/Downloads> から最新の「VirtualBox」をダウンロード・インストールしてください。

2. MateriAppsLive! のインストール

<https://sourceforge.net/projects/materiapps-live/files/Release-1.10/> から最新版の MateriAppsLive! (**.ova 形式のファイル) をインストールしてください。

3. VirtualBox へのインストール

- ① ダウンロードした ova イメージをダブルクリックしてください。
- ② 「インポート」を選択すると、インポートが開始されます。



¹ <http://cmsi.github.io/MateriAppsLive/>

4. VirtualBox 共有フォルダの設定

- ① インポート終了後、Oracle VM VirtualBox マネージャーで MateriAppsLive を選択し、「設定」を選択します。
- ② 「共有フォルダー」タブを開き、右側の「+」(新規共有フォルダーを追加します)をクリックします。
- ③ 「フォルダーのパス」の右側の「v」をクリックし、「その他」を選択。共有したいフォルダを選択します。
- ④ 「自動マウント」をチェックし、「OK」を選択します。
- ⑤ 仮想マシンを起動すると、③で選択したフォルダが、/mnt/sf_... の下に見えます。

5. 起動確認

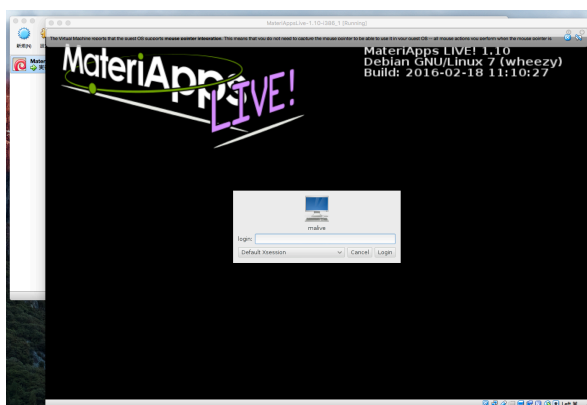
- ① MateriAppsLive-1.10-i386_1 をダブルクリックしてください。



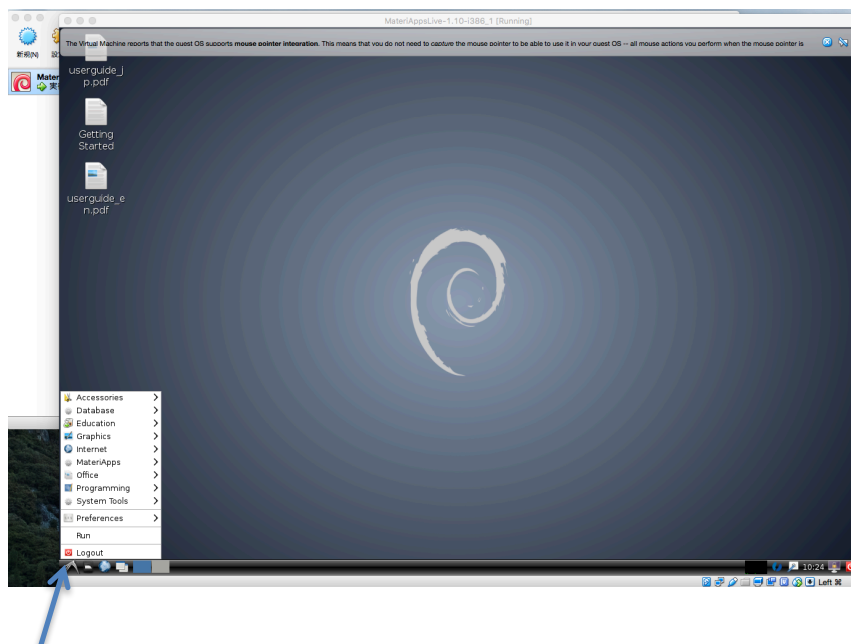
- ② MateriAppsLive-1.10-i386_1 をダブルクリックしてください。しばらくすると下記の画面が表示されます。

login: user、 Password: live

としてログインしてください。



- ③ 「Accessories」 - 「LXTerminal」 を選択してください。



左下のマークをクリックすると「Accessories」、Internetが表示されます。

- ④ 日本語のキーボードの使用

`setxkbmap -layout jp`

とタイプし「enter」キーを押してください。

MateriAppsLive! へのHPhiのインストール

- ① 「Internet」 - 「Iceweasel」を選択しブラウザを開いてください。
- ② 「MateriApps HPhi」と検索してください。
- ③ ダウンロードの「ソフトウェア・ソースコード」をクリックしてください。
- ④ 「HPhi-release-1.1.1.tar.gz」をクリックしてダウンロードしてください。
「~/Downloads」フォルダに

HPhi-release-1.1.1.tar.gz がダウンロードされます。

- ⑤ LXTerminal で

```
cd ~/Downloads
mkdir ~/program
mv ./HPhi* ~/program
cd ~/program
tar xvzf ./HPhi-release-1.1.1.tar.gz
ln -s ./HPhi-release-1.1.1 HPhi
```

とタイプしてください。HPhi用のディレクトリが作成されます。

なお、マニュアルは doc フォルダの下にあります。

```
pcmanfm ./HPhi/doc
```

とタイプするとマニュアルのあるフォルダが開きます。

- ⑥ 実行ファイルの作成

```
cd ./HPhi
mkdir ./build
cd ./build
cmake -DCONFIG=gcc ../
make
```

とタイプしてください。ビルドが開始され、src フォルダの下に「HPhi」が作成されます。

- ⑦ 動作確認

HPhi-release-1.1.1 フォルダの下にある samples フォルダにある

「Standard」 - 「Spin」 - 「HeisenbergChain」へ移動します。

```
ln -s ~/program/HPhi/build/src/HPhi ./
```

で HPhi の実行ファイルのシンボリックリンクを作成し、

```
./HPhi -s ./StdFace.def
```

とタイプし「enter」キーを押してください。計算が開始されれば成功です。

ISSP スパコンシステム B での HPhi の利用方法

ISSP スパコンには HPhi がプリインストールされています。

<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/visitor/x92nxz/hphi>

に使用方法が記載されています。以下、上記 URL より抜粋した内容を記載します。

各種ファイルの置き場所

HPhi のインストール場所

```
/home/issp/materiapps/HPhi/
```

実行ファイルのインストール場所²

```
/home/issp/materiapps/HPhi/HPhi-1.1.1-0/bin/
```

サンプルスクリプトと入力ファイルの場所

```
/home/issp/materiapps/HPhi/HPhi-1.1.1-0/samples/
```

実行方法

ここでは、Lanczos 法でハイゼンベルグ鎖の基底エネルギーを例として計算します。

1 計算環境の準備

```
$ source /home/issp/materiapps/HPhi/HPhivars.sh
```

これにより、HPhi のバイナリファイルへの PATH が通ります。また、環境変数 HPhi_ROOT に HPhi のインストールディレクトリのパスが保存されます。

2 入力ファイルの準備

```
$ cp -rf $HPhi_ROOT/samples/Standard/Spin/HeisenbergChain .
```

² このバイナリは MPT を用いてビルドされています。デフォルト (MPT) 設定ではなく intelMPI を使っている方は module コマンドで MPT に切り替える必要があります。なお、ビルド時のオプション等は

```
$ less /home/issp/materiapps/HPhi/HPhi-1.1.1-0.log .
```

で確認できます。

3 ジョブのサブミット

```
/home/issp/materiapps/HPhi/sample_jobscript/
```

にスクリプトのサンプルが用意されているので、カレントフォルダにコピーした上でジョブを投入します。スクリプトのサンプルはexpertモード用にHPhi_expert.sh、standardモード用にHPhi_standard.shが用意されています。

```
$ cp /home/issp/materiapps/HPhi/sample_jobscript/HPhi_standard.sh .  
$ qsub HPhi_standard.sh
```

4 結果の確認

```
output_Lanczos/zvo_energy.dat
```

とエネルギーの値を比較し、一致しているか確認します。

利用回数の測定

ソフトウェア高度化・開発プロジェクトに採択されたソフトウェアでは、物性研スパコン システムB上での利用数を測定しています。なお、オリジナルコードを改造した場合には、ジョブ投入スクリプト内で

```
/home/issp/materiapps/tool/bin/issp-ucount HPhi
```

を実行命令の直前に入れることで利用率の測定が可能となります。測定にあたっては、ユーザーが特定されないように暗号化した状態でのデータ収集を行っています。プロジェクトの意義を評価するための重要な指標となりますので、ご協力のほどよろしく願いいたします。³

システム B sekirei の性能 (Fat ノードおよび CPU ノードの紹介)

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

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

³ 利用率の測定を希望されない場合には、HPhi_nocount を実行ファイルとして選択してください。なお、利用率の測定に関しては、<http://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/visitor/x92nxz/7gyygi> に詳細に関する記載があります。

システムBで計算可能なサイズの目安

Spin 1/2 39サイト($S_z=0$)、Hubbard 20サイト(half-filling)

システム B の利用方法

システム B は

1. 研究代表者の登録
2. 研究課題を申請
3. 利用審査
4. 報告書の提出

の手順で利用することが可能です。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>

システム B を試すには？

A クラスの利用がお勧めです。A クラスの概要は以下の通りです。

- 申請ポイント…100 ポイント以下⁴
- 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。

申請にあたり不明な点がありましたら、お気軽にご相談ください。

(center@issp.u-tokyo.ac.jp もしくは software-dev@issp.u-tokyo.ac.jp)

その他計算環境への HΦ のインストール方法

HΦ マニュアルの 2.2 「インストール方法」に詳細が記載されていますので、そちらをご覧ください。基本的には、MateriAppsLive!での HΦ のインストールと同じ手順で行うことが可能です。

⁴ Fat ノードを 1 ノード 1 日使用した計算が 25 回可能です。ポイントの詳細は ISSP スパコンのマニュアルに記載がありますので、そちらをご覧ください。
ref.) Fat ノード 1 ノードを使用した場合、 $N=30$, $S_z=0$ のカゴメ格子の Lanczos 法での計算は 100 分程度で計算が完了します(消費ポイント=0.33 ポイント~4 ポイント/日×2/24 日)。