

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 特任研究員 (PCoMS PI)

ソフトウェア高度化推進チーム

1. sekireiの説明
2. sekireiでのHΦの利用方法
3. 実習

1-1. sekireiの性能

- 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)

1-2. sekirei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. sekirei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

■ 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。

1-2. sekirei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>

1-3. sekireiで利用可能なソフトウェア(1)

- ・ システムB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

2. 量子格子模型ソルバー関連

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

3. 分子動力学関連

LAMMPS、Gromacs、ERmod、feram

4. その他

Kw(Shifted-Krylov), Rokko, Chainer, cuDNN, 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！)

1-3. sekirei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ISSPスパコン上で可能に！



結晶構造

第一原理計算

有効模型作成

有効模型解析

2018年度ソフトウェア開発高度化プロジェクトで、RESPACKの有効模型をHΦ、mVMCにつなげられるように対応中。

2-1. sekireiでのソフトウェア実行 (1)

- ・ 事前準備

- ・ sekireiへのログイン

配布した紙を参考に、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@sekirei.issp.u-tokyo.ac.jp
```

→ パスワードを入力

2-2. sekireiでのソフトウェア実行 (2)

- ・ システムB sekireiにHΦは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/hphi/
 - 実行ファイルのインストール場所
/home/issp/materiapps/hphi/hphi-3.1.2-1
 - サンプルスクリプトと入力ファイルの場所
/home/issp/materiapps/hphi/hphi-3.1.2-1/doc

2-3. sekireiでのソフトウェア実行 (3)

1. 計算環境の準備 (今回ははじめの作業でここは完了済)

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

2. 入力ファイルの準備 (今の場合はCG/Hubbardを使用)

```
$ cp -r $HPHI_ROOT/samples ./HPhi-samples  
$ cd ./HPhi-samples/CG/Hubbard
```

3. ジョブのコピー (サンプルスクリプトを既に用意してあるのでそれを使用)

```
$ cp /home/issp/materiapps/hphi/sample_jobscript/HPhi_standard.sh .
```

ref.) Webページ「ソフトウェア高度化」 - 「システムBでの利用」 - 「HPhi」

今回はお試し用のキュー(ccms_i18cpu)を使用(普段はデバッグに利用)。

1. ノード数は最大18ノードまで
 2. CPU数は1ノードあたり24
 3. 実行時間は最大30分まで
- 講習会后1週間まで使用できます。

2-4. sekireiでのソフトウェア実行 (4)

ジョブの確認

\$qstat -u アカウント名

HPhi_standard.shを編集

```
#!/bin/sh
#QSUB -queue ccms_i18cpu ← キューの指定 (今回はこのキューのみ使用可能)
#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 24 ← 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 HPhi ← ジョブ名

↓ 実行環境呼び出し
## https://issp-center-dev.github.io/DCore/tutorial/square/square.html

source /home/issp/materiapps/hphi/HPhivars.sh ← 今のディレクトリへ移動
cd ${PBS_O_WORKDIR}

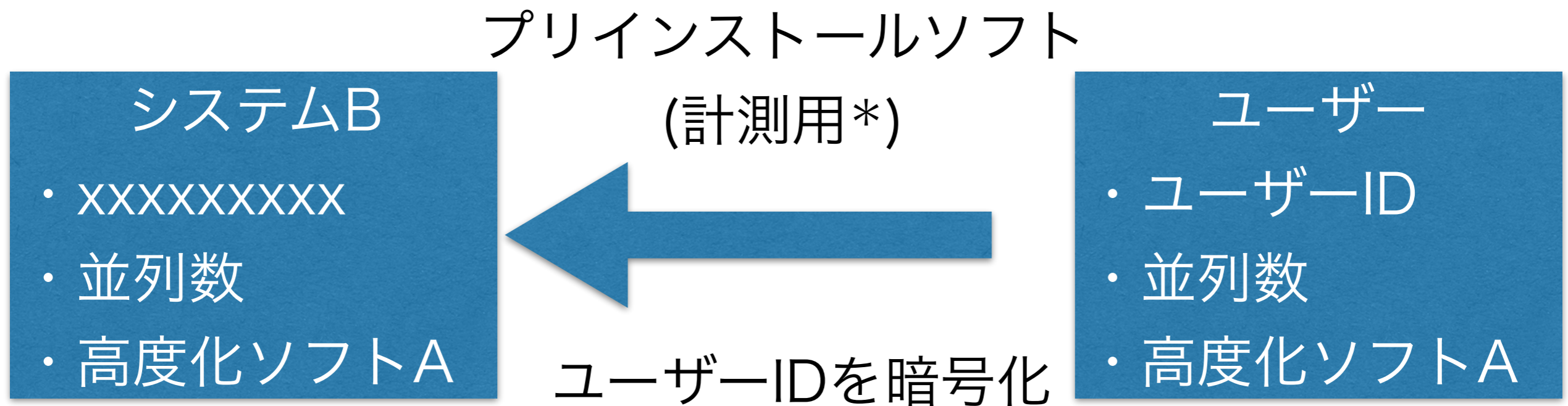
mpijob HPhi -s stan.in 計算実行
```

実習では**赤い部分**を書き換えて色々とお試しくください。

(注) ccms_i18cpuキューはこの講習会中のみ使用可能です。

2-5. (補) sekireiでの利用回数測定

対象ソフトウェア：ソフトウェア高度化対象プログラム



個人情報は見えない

(*) 利用率を計測しないソフトの選択