

CCMS Webハンズオン：2DMAT講習会 ～物性研スパコンを用いた使用方法の説明

吉見 一慶

東京大学物性研究所 特任研究員

ソフトウェア高度化推進チーム



1. ohtakaの説明

2. ohtakaでの2DMATの利用方法



1-1. ohtakaの性能

- Fat ノード (2 ノードまで使用可能)

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

主記憶: DDR4-2933, 64GB×48 = 3TB/node

- CPU ノード(144 ノードまで使用可能)

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

主記憶: DDR4-3200, 16GB×16 = 256GB/node

1-2. ohtaka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. ohtaka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. ohtakaを使用するには？(3)

100ポイントでどの程度計算可能？

- CPUノードを1ノード1日利用：1ポイント消費

- Fat ノードを1ノード1日利用：4ポイント消費

(ポイント消費のルールは ISSSP スパコン Webページの「利用案内」 - 「ポイント消費制」に記載)

<https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/guide/point>

1-3. ohtakaで利用可能なソフトウェア

- ・ 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, abICS
 2. 量子格子模型ソルバー関連
 - ALPS, HΦ, H-wave, mVMC, DSQSS, DCore, ALPSCore/CT-HYB, TRIQS, TeNeS
 3. 分子動力学関連
 - LAMMPS
 4. その他
 - K ω (Shifted-Krylov), 2DMAT, PHYSBO

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

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)

- システムB ohtakaにodotseおよび順問題ソルバー(sim-trhepd-rheed, sxrdcalc)はプリインストール済。
- 各種ファイルの置き場所 (覚書)
 - odotseの置き場所
/home/issp/materiapps/oneapi_compiler_classic-2023.0.0—openmpi-4.1.5/odotse
 - odotse/binのフォルダの中に、odotse、odotse-STR、odotse-LEED、odotse-SXRDなどの実行ファイルがある。
 - 順問題ソルバーの置き場所
 - sim_trhepd_rheed
/home/issp/materiapps/oneapi_compiler_classic-2023.0.0—openmpi-4.1.5/sim-trhepd-rheed/
 - sxrd_calc
/home/issp/materiapps/oneapi_compiler_classic-2023.0.0--openmpi-4.1.5/sxrdcalc/

2-3. ohtakaでのソフトウェア実行 (3)

1. 入力ファイルの準備

```
$ cp -rf /home/issp/materiapps/oneapi_compiler_classic-2023.0.0--  
  openmpi-4.1.5/odatse/odatse-3.0.0-1/sample .  
$ cd ./sample/STR/single_beam/mapper/
```

2. ジョブスクリプトのコピー (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/oneapi_compiler_classic-2023.0.0-openmpi-4.1.5/  
odatse/sample_jobscript/odatse_STR.sh .
```

3. 2DMATを実行

```
$sbatch odatse_STR.sh
```

4. 結果確認 (output/ColorMapができていることを確認。 ref_ColorMap.txtが参照用の回答)

```
$cat ColorMap.txt  
6.000000 6.000000 0.047852  
6.000000 5.750000 0.055011  
6.000000 5.500000 0.053190  
6.000000 5.250000 0.038905  
6.000000 5.000000 0.047674  
6.000000 4.750000 0.065919  
6.000000 4.500000 0.053675  
...
```

2-4. ohtakaでのソフトウェア実行 (4)

odatse_STR.shの中身

```
#!/bin/sh
#SBATCH -p i8cpu          ← キューの指定
#SBATCH -N 1              ← ノードの個数の指定
#SBATCH -n 128            ← プロセス数の指定
#SBATCH -c 1              ← スレッド数の指定
#SBATCH -t 00:10:00      ← 最大計算時間 (時間 : 分 : 秒)
set -e
source /home/issp/materiapps/oneapi_compiler_classic-2023.0.0—openmpi-4.1.5/
odatse/odatsevars.sh
source /home/issp/materiapps/oneapi_compiler_classic-2023.0.0—openmpi-4.1.5/
sim-trhepd-rheed/sim-trhepd-rheedvars.sh
module list
bulk.exe                  ← バルク計算の実行 (bulk.Pが出力される)
srun py2dmat input.toml
```

ohtaka: 128 cpu/ノード
128 * ノード数
= プロセス数 * スレッド数

2-4. ohtakaでのソフトウェア実行 (4)

odatse_STR.shの中身

```
#!/bin/sh
#SBATCH -p ccms8cpu          ← キューの指定
#SBATCH -N 1                  ← ノードの個数の指定
#SBATCH -n 128               ← プロセス数の指定
#SBATCH -c 1                 ← スレッド数の指定
#SBATCH -t 00:10:00         ← 最大計算時間 (時間 : 分 : 秒)
set -e
source /home/issp/materiapps/oneapi_compiler_classic-2023.0.0—openmpi-4.1.5/
odatse/odatsevars.sh
source /home/issp/materiapps/oneapi_compiler_classic-2023.0.0—openmpi-4.1.5/
sim-trhepd-rheed/sim-trhepd-rheedvars.sh
module list
bulk.exe          ← バルク計算の実行 (bulk.Pが出力される)
srun py2dmat input.toml
```

ohtaka: 128 cpu/ノード
128 * ノード数
= プロセス数 * スレッド数

講習会では専用キュー：ccms8cpu のみ使用可能。

投げたジョブの状況の確認は

`$squeue`

でできます。(注) ccms8cpuキューはこの講習会中のみ使用可能です。

2-5. (補) ファイルの送受信方法

scp, sftpなどが利用可能です。以下、scpを利用する場合の例を記載します。

1. 自分のPCからohtakaにコピー

```
$scp path_to_file user_name@ohtaka.issp.u-tokyo.ac.jp:path_to_copy
```

- `path_to_file`: コピーしたいファイルのパス
- `user_name`: ohtakaのユーザ(アカウント)名
- `path_to_copy`: コピーするファイルの置き場所

パスワードが聞かれるので、スパコンのログイン用パスワードを入れる。

2. ohtakaから自分のPCにコピー (ひっくり返す)

```
$scp user_name@ohtaka.issp.u-tokyo.ac.jp:path_to_file path_to_copy
```

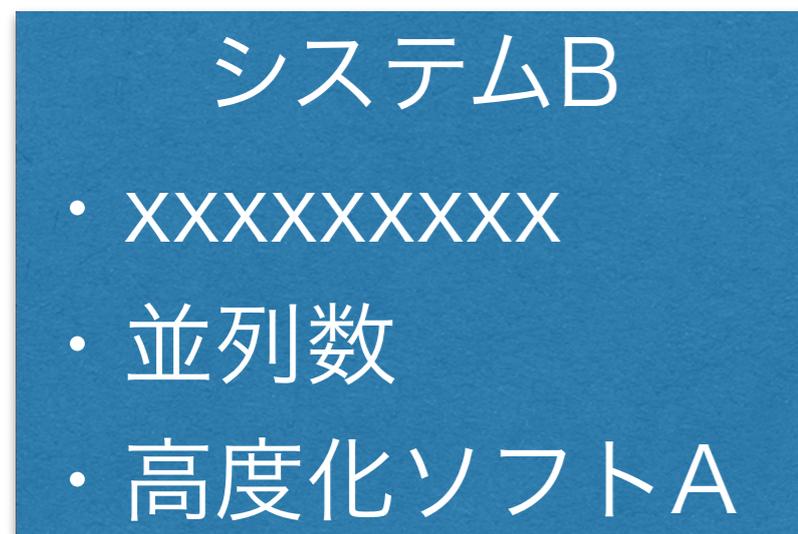
なお、ディレクトリごとコピーしたい場合には、"-r"オプションをつければOKです。

```
$scp -r user_name@ohtaka.issp.u-tokyo.ac.jp:path_to_file path_to_copy
```

2-5. (補) ohtaka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

プリインストールソフト
(計測用*)



ユーザーIDを暗号化

個人情報は見えない

(*) 利用率を計測しないソフトの選択

2-5. (補) ohtakaでの利用回数測定

プリインストールソフト以外の利用回数測定方法

→ 自分で改造したものやdevelop版などを利用する場合

```
$ /home/issp/materiapps/bin/issp-ucount odatse
```

を実行することで利用率の測定を行うことができます。ジョブスクリプトに上記コマンドを追記するよう、ご協力をお願いします。

なお、2DMAT以外のソフトウェア利用回数をカウントする場合には、odatseの箇所を該当ソフトウェアに変更してください。該当ソフトウェア名は下記URLページに記載しています。

<https://www.pasums.issp.u-tokyo.ac.jp/useratio>

どんな場合にスパコンを使うと便利？

アルゴリズムごとのMPI実装に関する簡単な紹介

(ohtakaでは1ノード128cpuなので128プロセスでのMPI並列可能)

1. **mapperモードで細かく一気に計算したい場合**

プロセス数を多くして刻みを細かくする。



2. **exchangeで温度分割点を増やして細かく計算したい場合**

プロセス数ごとに温度分割が行われるので、プロセス数を増やす。

3. **bayseで候補点数がたくさんある場合**

全候補点での獲得関数の評価をMPI並列しているので高速化可能。

自由演習時間の過ごし方 (1)

興味のあるチュートリアルを行ってみる。

1. STR

<https://2dmat.github.io/odatse-STR/manual/main/ja/index.html>

2. SXR

<https://2dmat.github.io/odatse-SXR/manual/main/ja/index.html>

3. LEED

<https://2dmat.github.io/odatse-LEED/manual/main/ja/index.html>

ODAT-SE solver module: odatse-STR for sim-trhepd-rheed 1.0-dev ドキュメント
WELCOME TO ODATSE-STR DOCUMENTATION!

コンテンツ :: はじめに »

Welcome to odatse-STR documentation!

Contents:

- はじめに
 - ODAT-SEとは
 - odatse-STRとは
 - ライセンス
 - バージョン履歴
 - 主な開発者
- odatse-STR のインストール
 - 実行環境・必要なパッケージ
 - ダウンロード・インストール
 - 実行方法
 - アンインストール
- チュートリアル
 - TRHEPD 順問題ソルバー
 - Nelder-Mead法による最適化
 - グリッド型探索
 - ベイズ最適化
 - レプリカ交換モンテカルロ法による探索
 - ポピュレーションアニーリングによる探索
 - ユーザープログラムによる解析
- 入出力
 - 入力パラメータ
 - ソルバー用補助ファイル
- 謝辞
- お問い合わせ

コンテンツ :: はじめに »

自由演習時間の過ごし方(2)

- テンプレートを利用した順問題ソルバーの導入 (1)
 - template作成用のリポジトリ：odat-se-template
 - URL: <https://github.com/issp-center-dev/odat-se-template>
 - src/templateの下にソルバーの作り方に関するテンプレートが存在
 - sampleの下に以下の実行用ファイルなどあり。
 - booth, himmelblau, linear_regression
 - 詳細(マニュアル付)はodatse-galleryで近日公開予定。
 - odat-se-templateを利用する際は、自身がodat-seを書き換えられる環境で試してください(スパコンのプリインストールされたodat-seには書き込みができず、インストールできないのでご注意ください)

自由演習時間の過ごし方(2)

- テンプレートを利用した順問題ソルバーの導入 (2)
 - odat-se-templateマニュアルを事前知識として与えたmyGPT
 - <https://chatgpt.com/g/g-6744675c4ee8819185d4eb66782c2016-odat-se-template-tutorial-expert>
- いくつか例題を作って試してみることも可能。
(注) 間違える場合も多いので、あくまでも参考となるベースを作る程度。

ODAT-SE-Template Tutorial Expert ▾



ODAT-SE-Template Tutorial Expert

By KAZUYOSHI YOSHIMI ✎

ODAT-SEへの順問題ソルバー導入に関する日本語チュートリアル専門家。

ODAT-SEのインストール方法を教えてください。

ODAT-SEでモデルを設定する手順を教えてください。

ODAT-SEのデータ解析で使用する主要なコマンドは？

ODAT-SEのエラーを解決する方法を教えてください。

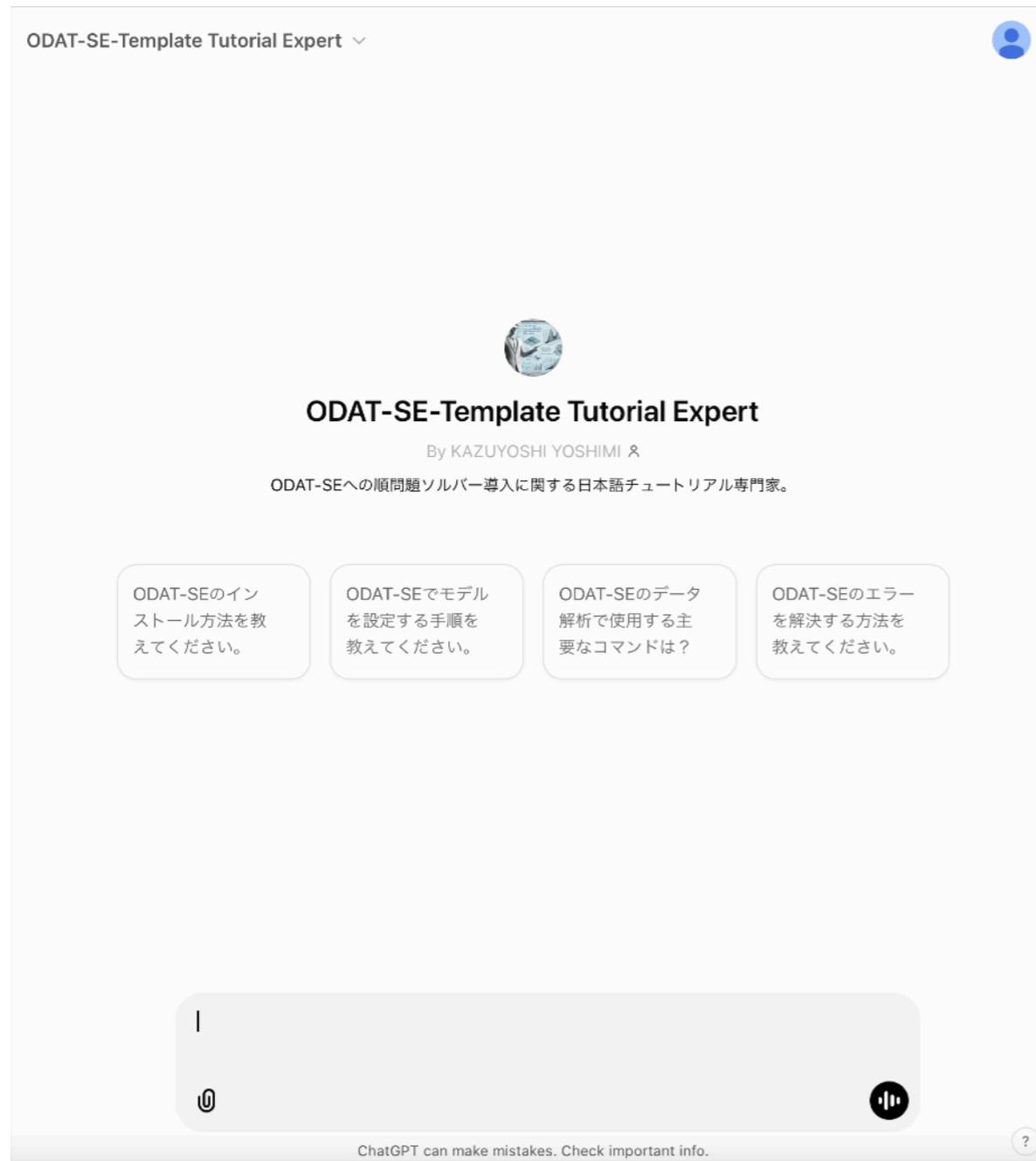
Message ODAT-SE-Template Tutorial Expert



ChatGPT can make mistakes. Check important info.



自由演習時間の過ごし方(2)



ODAT-SE-Template Tutorial Expert

ODAT-SE-Template Tutorial Expert
By KAZUYOSHI YOSHIMI

ODAT-SEへの順問題ソルバー導入に関する日本語チュートリアル専門家。

- ODAT-SEのインストール方法を教えてください。
- ODAT-SEでモデルを設定する手順を教えてください。
- ODAT-SEのデータ解析で使用する主要なコマンドは？
- ODAT-SEのエラーを解決する方法を教えてください。

ChatGPT can make mistakes. Check important info.

チュートリアルに従って実行した際に、エラーが出た場合には、そのエラーをメッセージに貼り付けると解決方法を提案してくれる。

実際、今の場合、input.tomlに
`[solver]`
`type = "FourierSolver"`
を追加していないため、エラーが出たが、これを追加すると実行できた。