

CCMSハンズオン：RESPACK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RESPACK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

K ω (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！



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RESPACKはプリインストール済。
- ・ 各種ファイルの置き場所 (覚書)
 - RESPACKのインストール場所
/home/issp/materiapps/respac/
 - 実行ファイルのインストール場所
/home/issp/materiapps/respac/respac-20190226-1
 - サンプルスクリプトと入力ファイルの場所
/home/issp/materiapps/respac/respac-20190226-1/sample

2-3. sekireiでのソフトウェア実行 (3)

Quantum Espresso + RESPACKを用いたAIの計算

1. 計算環境の準備

```
$ source /home/issp/materiapps/respack/respackvars.sh
```

2. 入力ファイルの準備

```
$ cp -r $RESPACK_ROOT/sample ./respack-samples  
$ cd ./respack-samples/quantum-espresso/Al.fcc.6x6x6
```

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/respack/sample_jobscript/job_qe_handson.sh .  
$ mkdir tmp ← 結果格納用フォルダの作成  
$ qsub job_qe_handson.sh
```

4. 計算終了後、RESPACK用のファイルに変換

```
$ qe2respack.py ./tmp/scf/Al.save
```

5. RESPACKを実行

```
$ cp /home/issp/materiapps/respack/sample_jobscript/job_respack_handson.sh .  
$ qsub job_respack_handson.sh
```

→ Wannier関数、直接・交換相互作用が計算されます。

2-4. sekireiでのソフトウェア実行 (4)

job_qe_handson.shの中身

```
#!/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 1 ← ノードの個数の指定
#PBS -l walltime=0:30:00 ← 最大計算時間 (時間：分：秒)
source /home/issp/materiapps/qe/q-e-vars.sh ← Quantum Espressoの
cd $PBS_O_WORKDIR ← 実行環境呼び出し
mpijob pw.x -in Al.scf.in > scf.out
mpijob pw.x -in Al.band.in > band.out
bands.x -in Al.bands.in > bands.out
mpijob pw.x -in Al.nscf.in > nscf.out
```

ジョブの確認は

\$qstat -u アカウント名

でできます。

(注) ccms_i18cpuキューはこの講習会中のみ使用可能です。

2-4. sekireiでのソフトウェア実行 (5)

job_respack_handson.shの中身

```
#!/bin/sh
#QSUB -queue ccms_i18cpu
#QSUB -node 1
#QSUB -mpi 1
#QSUB -omp 24
#QSUB -place pack
#QSUB -over false
#PBS -l walltime=00:30:00
#PBS -N AI
source /home/issp/materiapps/respack/respackvars.sh
cd ${PBS_O_WORKDIR}
date
rm LOG*
calc_wannier < input.in > LOG.wan
mpijob calc_chiqw < input.in > LOG.chiqw
calc_j3d < input.in > LOG.j3d
calc_w3d < input.in > LOG.w3d
date
```

← 投入ジョブの名前

← RESPACKの
実行環境呼び出し

←calc_wannierの実行 (MPI非対応)

←calc_chiqwの実行 (MPI対応)

←calc_j3d, calc_w3dの実行 (MPI非対応)

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

プリインストールソフト
(計測用*)

システムB

- ・XXXXXXXXXX
- ・並列数
- ・高度化ソフトA

ユーザー

- ・ユーザーID
- ・並列数
- ・高度化ソフトA

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