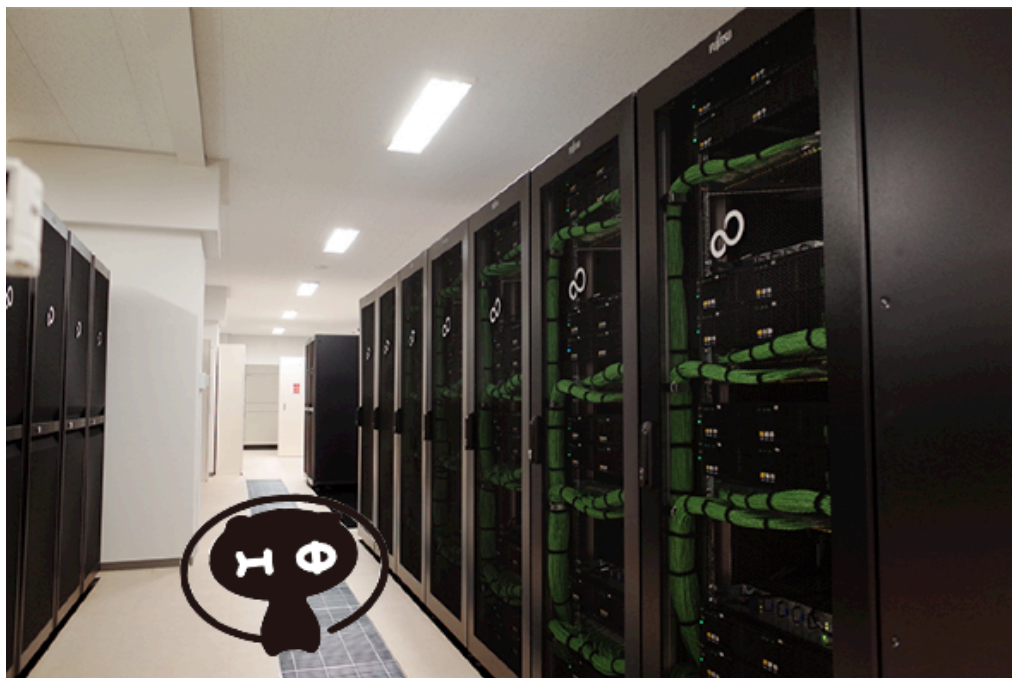


ITOへのログイン、演習環境設定

井戸 康太(東京大学 物性研究所)



ITOとは？

AI・機械学習・ビッグデータ解析などのデータサイエンスと最先端科学技術シミュレーションに対応する研究基盤への提供を目指したスパコン



- ▷ パブリッククラウドとの連携
 - オープンデータ活用
- ▷ 対話的な利用環境の拡充
 - 大規模データのプリポスト処理
- ▷ GPGPU搭載

システム構成



ユーザ



パブリッククラウド
(Amazon web serviceなど)

スパコンITO



ストレージ



フロントエンド
(ログインノード、
基本・大容量メモリノード)



バックエンド
(システムA, B)

ITOの性能 (バックエンドのみ)

▷ Subsystem A(CPU)

- CPU: Intel Xeon Gold 6154 (3.0 GHz, 18 core)× 2 / node
- メモリ:DDR4 192 GB / node
- Top 500で37位, 国内7位(2018年11月)

▷ Subsystem B(CPU, GPU)

- CPU: Intel Xeon Gold 6140 (2.3 GHz, 18 core)× 2 / node
- GPU: NVIDIA Tesla P100 (3584 core) × 4 / node
- メモリ:DDR4 192 GB / node, HBM2 : 16 GB / 1GPU

※使用できる最大使用ノード数・実行時間はリソースグループによって異なります。

https://www.cc.kyushu-u.ac.jp/scp/system/ITO/subsystem/06_limit.html

ITOを使用するためには？

▶ 利用者資格を有するもの(詳細は[こちら](#))

- 大学・高専の教員、学生
- 研究機関の研究職員
- 民間企業
- 外国人/国外居住者の場合、外為法厳守

▶ 基本的には有料(詳細は[こちら](#))

- 例：サブシステムA
 - 共有タイプ:月額 740円/node
 - ノード固定タイプ:月額 5900円/node
- [共同研究制度](#)を利用すると無料

ITOを使用するためには？

- ▶ 利用申請書を記入する(詳細は[こちら](#))
 - 課題名、担当経理者、申請者情報などを記入
- ▶ 提出し、審査結果を待つ
 - だいたい1月程度
- ▶ 利用開始！
- ▶ [トライアルユース](#)
 - 最大1ヶ月間無料！
 - 申請手続き/利用報告の手続きが必要
 - アカウントは通常利用へと引き継げる

ITOで使えるソフトウェア

- ▶ 計算科学:16種
 - Gaussian, VASP, LAMMPS, HΦ など

- ▶ データ解析:3種
 - Rなど

- ▶ 機械学習:4種
 - TensorFlow, Chainerなど

- ▶ 流体・構造解析:4種
 - OpenFOAMなど

- ▶ 科学技術計算:2種
 - Mathematica, Matlab

- ▶ 画像処理:2種

より詳細な情報は
[こちら](#)

ソフトウェアの情報はMateriAppsへ！

- ・ **200**を超える物質科学アプリケーションやツールを紹介
- ・ 月間 10000+ ページビュー、2000+ ユニークユーザ(H30年度)
- ・ 「やりたいこと」からアプリケーションを検索
- ・ 検索タグ：「特徴」「対象」「手法・アルゴリズム」
- ・ **アプリの使い方紹介(レビュー)**
- ・ 開発者情報、アプリの魅力・将来性
- ・ 講習会情報・事例紹介
- ・ キーワード解説



ITOでのHΦ実行(1)

- ▶ 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@ito.cc.kyushu-u.ac.jp
```

→パスワード入力

- ▶ HΦ ver. 3.1.2実行のための関連ディレクトリ
 - 実行ファイルの置き場: /home/rist/HPhi-3.1.2/bin
 - サンプル: /home/tmp/HPhi3.1.2_sample

ITOでのHΦ実行(2)

▷ 入力ファイルの準備

```
$ cp -r /home/tmp/HPhi3.1.2_sample sample  
$ cd sample/CG/Heisenberg
```

▷ ジョブスクリプトのコピー&実行

```
$ cp /home/tmp/HPhi3.1.2_sample/HPhi_standard.sh ./  
$ pjsub HPhi_standard.sh
```

ITOでのHPhi実行(3)

▷ ジョブスクリプトの中身

1	<code>#!/bin/bash</code>	←bashを使うことを明示
2	<code>#PJM -L "rscunit=ito-a"</code>	←IT0のどのシステムを使うか
3	<code>#PJM -L "rscgrp=ito-a-lecture"</code>	←どのリソースグループを使うか
4	<code>#PJM -L "vnode=1"</code>	←ノード数
5	<code>#PJM -L "vnode-core=36"</code>	←ノードあたりのコア数
6	<code>#PJM -L "elapse=00:30:00"</code>	←実行時間
7		
8	<code>module load intel/2018.3</code>	←intelのmpiをロード
9	<code>HPhi=/home/rist/HPhi-3.1.2/bin/HPhi</code>	←HPhiの実行体への環境変数
10	<code>export OMP_NUM_THREADS=8</code>	←OMPスレッド数の設定
11		
12	<code>cd \$PJM_O_WORKDIR</code>	←ジョブ投入ディレクトリへ移動
13		
14	<code>mpirun -np 4 \$HPhi -s stan.in</code>	←4プロセスでHPhiを実行

Tips

- ▶ 流したジョブ状況はpjstatで確認できる
- ▶ 間違えた場合は、pjdel JOB_ID で削除可能
pjdel -u username で一括削除も可能
- ▶ rscgrp=ito-a-lectureは講習会用グループ
vnodeは4まで指定可能
- ▶ 困ったら[公式ページ](#)を見るか、“man コマンド名”をログインノードで叩く