

HΦのインストール方法

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. HΦのインストール概要
2. MateriAppsLive!を利用したインストール
3. ISSPスパコンでの利用
4. インストールの実演

補助資料

1. HΦの計算環境構築方法マニュアル (紙媒体)
2. setup.pdf (USB内)



Let's install HΦ !

1. HΦインストール概要

- ・ HΦインストールまでの 3 step

1. 必要環境をそろえる。

必須 : Cコンパイラ、LAPACK

オプション: MPIライブラリ

2. HΦをダウンロード

MateriAppsのページから公式ページへ。

3. HΦをビルド

make, cmakeで簡単にインストール可能。

1-1. HΦで必要な環境

- ・ HΦのコンパイル・使用には以下の環境が必要です。
 1. Cコンパイラ
インテル、富士通、GNUなど
 2. LAPACKライブラリ
インテルMKL, 富士通, ATLASなど
 3. MPIライブラリ (オプション)
MPI並列を行わない場合は必要ありません

1-2. HΦのダウンロード

- Googleで「MateriApps HPhi」で検索！

公開度：3 ★★★ ドキュメント充実度：2 ★★★ **PickUp!**

並列計算機に対応した数値厳密対角化法による有効モデルソルバーパッケージ。広汎な多体量子系の有効模型(多軌道ハバード模型、ハイゼンベルグ模型、近藤格子模型など)の基底状態及び低励起状態の波動関数を並列計算によって求める。ランチョス法による基底状態計算、熱的純粋量子状態を利用した比熱・帯磁率の温度依存性計算が可能。

開発者

山地洋平(東京大学 大学院工学系研究科), 三澤貴宏(東京大学 物性研究所), 藤堂眞治(東京大学 大学院理学系研究科), 吉見一慶(東京大学 物性研究所), 河村光晶(東京大学 物性研究所), 川島直輝(東京大学 物性研究所)

対象物質・モデル

ハバード模型, ハイゼンベルグ模型, 近藤格子模型, キタエフ模型, キタエフ-ハイゼンベルグ模型, 多軌道ハバード模型



このWebページの下の方にダウンロードするためのリンクがあります。

ダウンロード

- ソフトウェア・ソースコード
- マニュアル([日本語版](#) / [英語版](#))

1-3. HΦのビルド (1)

- HΦではmake・cmakeでビルドができます。
(数行コマンドを打つだけでビルド可能！)
- cmakeで選べる計算環境
 1. sekirei: ISSPシステムB “sekirei”
 2. fujitsu: 富士通コンパイラ
(ISSPシステムC”maki”, 京コンピュータ)
 3. intel: intelコンパイラ+ Linux PC
 4. gcc: GCC + Linux PC

1-3. HΦのビルド (2)

- cmakeでのビルド方法

1. srcの下にbuildフォルダを作成

```
$ mkdir ./build
```

2. buildフォルダでmakefile作成

```
$ cmake -DCONFIG=xxx ../
```

(xxxにsekirei, maki, intel, gccのどれかを入れます)

3. makeコマンドの実行

```
$ make
```

build/srcにHPhiの実行ファイルが出来ます。

インストール概要は以上です。
なお、HΦでは最新情報の取得を
するためのMLがあります。
登録は「[MateriApps HΦページ](#)」
の「[HΦ query form](#)」から。
よろしければ登録ください



2. MateriAppsLive!を利用した インストール

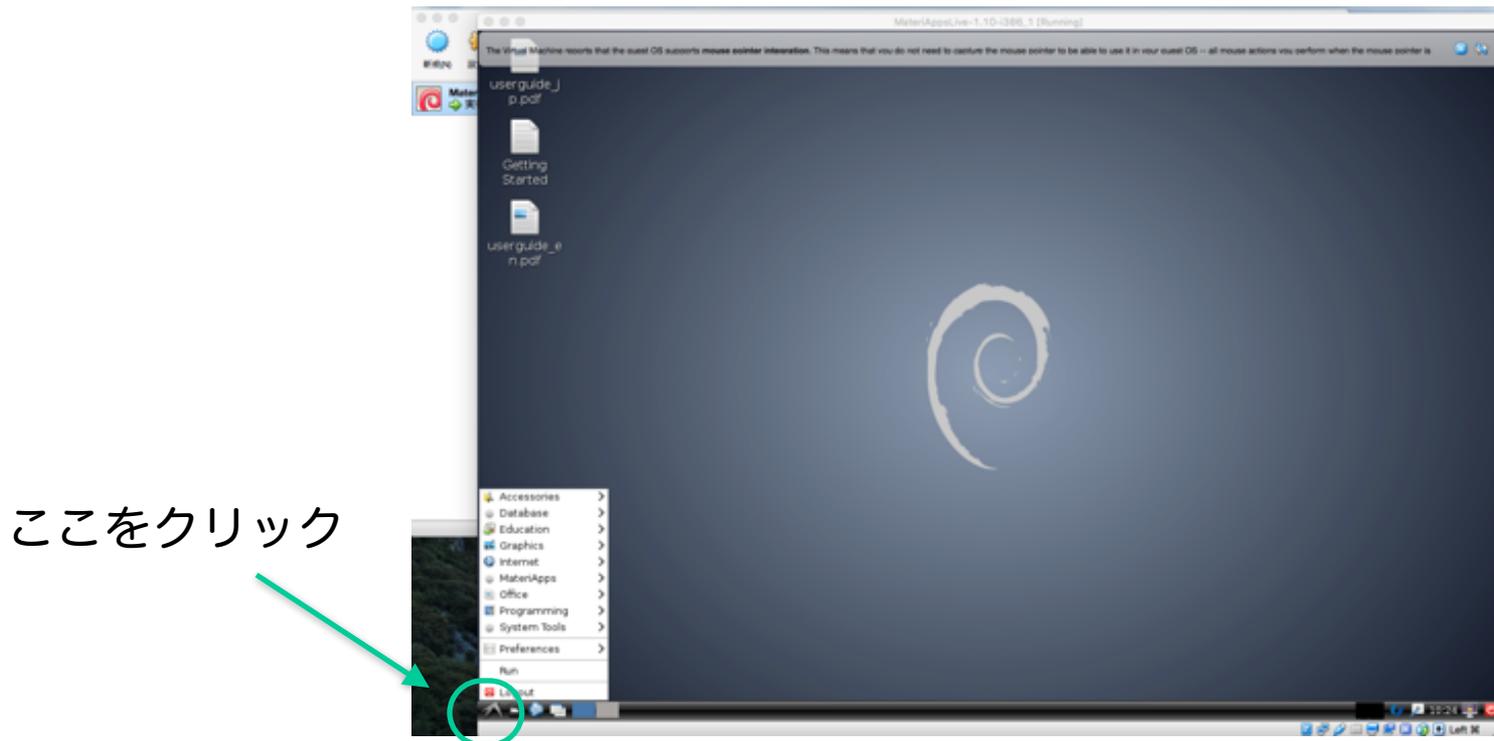
- ・ HΦインストールまでの 3 step
 1. **必要環境をそろえる** → VirtualBox+MateriAppsLive!
必須 : Cコンパイラ、LAPACK
オプション : MPIライブラリ
 2. **HΦをダウンロード**
MateriAppsのページから公式ページへ。
 3. **HΦをビルド**
make, cmakeで簡単にインストール可能。

2-1. 必要環境の設定

- VirtualBox + MateriApps Live!のインストール
参考資料
 - USBからインストール
～setup.pdf (提供：MateriApps Live!開発チーム)
 - インターネットからインストール
～Hphiの計算環境構築方法マニュアル

2-2. HPhiのダウンロード (1)

- ・ ブラウザを開く (「Internet」 - 「Iceweasel」)



2-2. HΦのダウンロード (2)

- 「MateriApps HPhi」と打って検索

公開度：3 ★★★ ドキュメント充実度：2 ★★★ **PickUp!**

並列計算機に対応した数値厳密対角化法による有効模型ソルバーパッケージ。広汎な多体量子系の有効模型(多軌道ハバード模型、ハイゼンベルグ模型、近藤格子模型など)の基底状態及び低励起状態の波動関数を並列計算によって求める。ランチョス法による基底状態計算、熱的純粋量子状態を利用した比熱・帯磁率の温度依存性計算が可能。

開発者

山地洋平(東京大学 大学院工学系研究科), 三澤貴宏(東京大学 物性研究所), 藤堂眞治(東京大学 大学院理学系研究科), 吉見一慶(東京大学 物性研究所), 河村光晶(東京大学 物性研究所), 川島直輝(東京大学 物性研究所)

対象物質・モデル

ハバード模型, ハイゼンベルグ模型, 近藤格子模型, キタエフ模型, キタエフ-ハイゼンベルグ模型, 多軌道ハバード模型



このWebページの下の方にダウンロードするためのリンクがあります。

ダウンロード

- ソフトウェア・ソースコード
- マニュアル([日本語版](#) / [英語版](#))

2-2. HPhiのダウンロード (3)

- ・ リリースノートページからダウンロード

ここをクリック



v1.1.1

Edit

 mitsuaki1987 released this 28 days ago

Release note

[日本語 / Eng]

[HPhi-release-1.1.1.tar.gz](#)にはマニュアルのpdfファイルが入っています。こちらをダウンロードしてください。

インストール方法(Linux PC + Intelコンパイラの場合)

```
tar xzvf HPhi-release-1.1.1.tar.gz
cd HPhi-release-1.1.1
bash HPhiconfig.sh intel
make
```

「~/Downloads」フォルダに
「HPhi-release-1.1.1.tar.gz」がダウンロードされます。

2-3. HPhiのビルド (1)

- HPhiフォルダの作成

LXTerminalを開き、以下のコマンドを打ちます。

```
$ 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
```

→ これによりHPhiフォルダが作成されます。

- マニュアルの取得

```
$ pmanfm ./HPhi/doc
```

と打つことでマニュアルのあるフォルダが開きます。

2-3. HΦのビルド (2)

- ・ 実行ファイルの作成

1. srcの下にbuildフォルダを作成

```
$ mkdir ./build
```

2. buildフォルダでmakefile作成

```
$ cmake -DCONFIG=gcc ../
```

3. makeコマンドの実行

```
$ make
```

→ build/srcにHPhiの実行ファイルが出来ます。

2-3. HΦのビルド (3)

- ・ 動作確認 (1次元Heisenberg鎖 Lanczos法)

1. Heisenbergchainフォルダへ移動

```
$ cd ../samples/Standard/Spin/Heisenbergchain
```

2. 実行ファイルのコピー

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

3. プログラムの実行

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

→ 計算が開始されれば成功です。

MateriApps Live!へのHΦの
インストールの説明は以上です。
MateriApps Live!には
ALPS, OpenMX など
様々なアプリが入っています。
興味がある方は是非色々と
試してみてください。



3. ISSPスパコンsekireiでの利用

- ・ システムB sekireiではHΦはプリインストール済。
- ・ 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
/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/

3-1. 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)

- システムBで計算可能なサイズの日安

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

3-2. 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>

3-2. 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。

3-2. 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 スパコンのマニュアルに記載)

ex.) $N=30$, $Sz=0$ のカゴメ格子の Lanczos 法での計算

Fat ノード 1 ノード40cpuを使用：100 分程度で計算完了

消費ポイント = 0.33 ポイント ~ 4 ポイント/日 × 2/24 日

→ 簡単な試計算は十分可能。

3-3. sekireiでの使用方法(1)

例) 1次元Heisenberg ChainでのLanczos 法による計算

1. 計算環境の準備

HPhiのバイナリファイルへのPATHを通します
(これでHPhiと打つだけで実行可能になります)。

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

2. 入力ファイルの準備

サンプルファイルをコピーします。

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

3-3. sekireiでの使用方法(2)

3. ジョブのサブミット

/home/issp/materiapps/HPhi/sample_jobscript/

にジョブ投入用のスクリプトのサンプルとして、

- expertモード用: HPhi_expert.sh

- standardモード用: HPhi_standard.sh

がそれぞれ用意されています。 コマンドの実行例は以下の通りです。

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

```
$ qsub HPhi_standard.sh
```

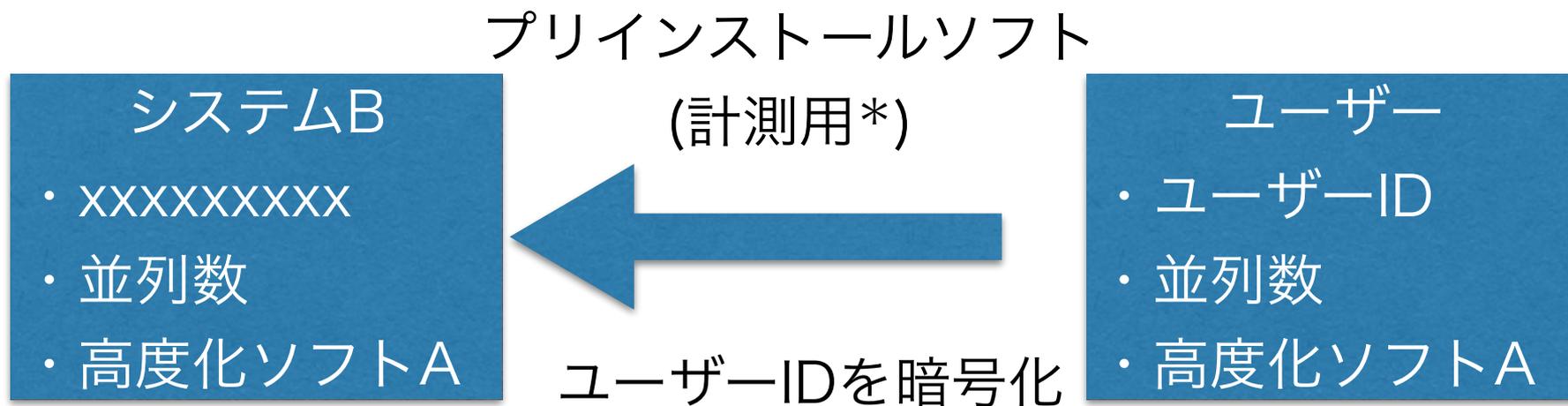
4. 結果の確認

output_Lanczos/zvo_energy.dat

とエネルギーの値を比較し、値が一致しているか確認します。

3-4. (補) sekireiでの利用回数測定 (1)

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

3-4. (補) sekireiでの利用回数測定 (2)

計測・非計測の方法

① プリインストールされたソフトウェアを利用する場合
自動で測定されます。

② オリジナルコードを改造・ビルドした場合
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。

- 測定を希望しない場合

HPhi_nocount を実行ファイルとして選択してください。

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お願いいたします。

それでは、HΦを

- ・ MateriApps Live!
 - ・ sekirei
 - ・ 自前の環境 (クラスタなど) でインストール/試計算を試してみましょう(15分程度)。
- 余裕があれば、サンプルを色々と実行してみてください。

