

# スパコンの使い方と諸注意

東大物性研 大型計算機室

# 全国共同利用 物性研スーパーコンピュータ

- システムB(ohtaka, 2020年10月～)
  - Dell PowerEdge C6525/R940 (6.881PFLOPS)
  - 1ノードに128コアをもつAMD Romeを搭載
- システムC(enaga, 2018年1月～)
  - HPE SGI 8600 (774 TFLOPS)

詳細な仕様はこちら↓

<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/about-us/system/structure>

# 公募申請に関して

2021年度前期申請  
(B,C,E,Sクラス)の締切は、  
12月2日(水)。

申請クラス	申請受付期間	利用期間	申請ポイント数制限(詳細は下記参照)	
			システム b	システム c
A(軽型)	随時	年度末まで	100ポイント以下	50ポイント以下
B(小型)	年2回 (6月, 12月)	年度末まで	800ポイント以下	100ポイント以下
C(中型)	年2回 (6月, 12月)	年度末まで	8,000ポイント以下	1,000ポイント以下
D(緊急)	随時	採択後6ヶ月間	10,000ポイント以下	1,000ポイント以下
E(大型)	年2回 (6月, 12月)	年度末まで	24,000ポイント以下	3,000ポイント以下
S(特別)	年2回 (6月, 12月)	1年間	10,000ポイント以上	上限・下限無し

- 2020年度後期は、新システムBの稼働開始に伴う特別な措置として、2020年度前期のみ課題採択された課題代表者についても、Aクラス申請を認めています。
  - <https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/news/news/all/m23kjin>
- 申請課題終了後、成果報告書(activity report)を提出。
  - <https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/for-users/report>
- 物性研にて開催する成果報告会への参加およびポスター発表。

# スパコンを利用する際に 守ってほしいセキュリティ事項

- アカウソトの使いまわしはしない。
- スパコンに秘密鍵を置かない。
  - SSHのエージェソト転送により、ローカルPCの秘密鍵を利用可能。
- 秘密鍵にパスフレーズを付ける。

# スパコンを利用する際のマナー

- ログインノードで重い処理をしない。
  - 並列コンパイル(make -j)
  - 多数のプログラムやスレッド並列の実行
  - 同時に複数のrsyncやscp

→ 重い処理はデバッグ用のキュー（パーティション）で行う。
- 開発・デバッグ用のキュー（パーティション）でプロダクトランをしない。
  - i8cpu, i1fatなどはデバッグなどのために用意された「短時間であるが、常時、すぐに使える」ジョブクラス。
  - 多数のジョブを投入し、常時占有してはいけない。

# その他

- バルクジョブの活用（詳しくは「利用の手引き」参照）
  - パラメータサーチなど、複数のジョブを多数実行したい場合、バルクジョブにより複数のジョブをまとめて実行可能。
  - 多くの並列化せずともマルチコア、マルチノードの計算資源を有効活用可能。
- プログラムコードの並列化の推奨
  - ohtakaには1ノードに128コアをもつAMD Romeを搭載。
- /workディレクトリの自動削除について
  - システムB(ohtaka)では4週間程度、システムC(enaga)では2週間以上アクセスされていない/workディレクトリ下のファイルは自動削除される。
- インストール済み物質科学アプリケーション
  - /home/issp/materiappsにプリインストールされているアプリケーション。
  - <https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/visitor/applications>
- VASPに関して
  - システムB(ohtaka)にVASP5, VASP6をインストール予定。
  - インストールされ次第、登録申請方法をメール案内する予定。

# お問い合わせ先

- 公募申請などの一般的なお問い合わせ
  - [center@issp.u-tokyo.ac.jp](mailto:center@issp.u-tokyo.ac.jp)
- システムB(ohtaka)に関するお問い合わせ
  - 障害報告：[center\\_b@issp.u-tokyo.ac.jp](mailto:center_b@issp.u-tokyo.ac.jp)
  - プログラム相談：[program\\_b@issp.u-tokyo.ac.jp](mailto:program_b@issp.u-tokyo.ac.jp)
- システムC(enaga)に関するお問い合わせ
  - 障害報告：[center\\_c@issp.u-tokyo.ac.jp](mailto:center_c@issp.u-tokyo.ac.jp)
  - プログラム相談：[program\\_c@issp.u-tokyo.ac.jp](mailto:program_c@issp.u-tokyo.ac.jp)
- インストール済み物質科学計算アプリケーションに関するお問い合わせ
  - [center-apps@issp.u-tokyo.ac.jp](mailto:center-apps@issp.u-tokyo.ac.jp)
- 詳しくは：<https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/supercom/contactus>