

# 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



2020年10月~  
**System B, Ohtaka**  
**6.881 PFLOPS**  
memory : 420 TB  
storage : 2.3 PB



2022年6月~  
**System C, Kugui**  
**0.973 PFLOPS**  
memory : 35.25TB  
storage : 1.35 PB



詳細な仕様はこちら→ <https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/system>

# 公募申請に関して

2023年度前期申請  
(B,C,E,Sクラス)はすでに  
締め切りました。  
これから申請希望の方は、  
後期申請またはA,Dクラ  
スをご利用ください。

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	650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	6,500ポイント以下	500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	500ポイント以下
E(大型)	年2回(6月, 12月)	年度末まで	20,000ポイント以下	1,500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

- 申請課題終了後、成果報告書(activity report)を提出。
  - <https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/report/result/about>
- 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, kuguiには1ノードに128コアをもつAMD CPU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(kugui)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://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/system/systembinfoc/software>
  - [https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/system/newssystemc/newssystemc\\_software](https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/system/newssystemc/newssystemc_software)
- VASPに関して
  - システムB(ohtaka)、システムC(kugui)にVASP5, VASP6がインストールされている。
  - 登録申請方法は下記参照。
    - [https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/vasp\\_guide](https://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/vasp_guide)

# 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(kugui)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://mdcl.issp.u-tokyo.ac.jp/scc/contact>