

次世代シミュレーション技術教育 計算機システム 利用者講習会

次世代シミュレーション技術者教育推進室

小畑繁昭

2013年9月30日



第1版

豊橋技術科学大学 次世代シミュレーション技術者教育プログラム

URL: <http://www.adsim.tut.ac.jp/>

The screenshot shows a web browser displaying the homepage of the program. The browser's address bar shows the URL <http://www.adsim.tut.ac.jp/>. The page features a navigation menu at the top with links for '初めの方へ' (For newcomers), '企業の方へ' (For companies), '高等・在学生の方へ' (For students), and '研究者の方へ' (For researchers). The main content area is divided into several sections:

- News:** A red sidebar on the right containing a list of recent news items with dates and brief descriptions.
- Education Program Overview:** A section with a globe icon and text describing the program's goals and members.
- Education Materials Introduction:** A section with a Moodle logo and text about digital and network-based educational materials.
- Event Information:** A section with a calendar icon and text about upcoming events.
- Recruitment:** A section with a person icon and text about recruitment opportunities.
- Activity Report:** A section with a document icon and text about activity reports.
- External Links:** A section with a link icon and text about external links.
- Related Links:** A section with a link icon and text about related links.

On the right side of the page, there is a vertical navigation menu with links to various sections: '豊橋技術科学大学 次世代シミュレーション技術者教育プログラム', '教育プログラムの概要', '教育プログラムのご紹介', '教育教材のご紹介', '教育設備のご紹介', 'イベント情報', '募集', '活動報告', '外部連携', and '関連リンク'. At the bottom right, there are logos for '豊橋技術科学大学' (Toyohashi University of Technology), 'グローバルCOEプログラム' (Global COE Program), and 'CMSI 計測物質科学イニシアチブ' (CMSI Measurement Materials Science Initiative).

Copyright © 豊橋技術科学大学 次世代シミュレーション技術者教育推進室 All rights reserved.

豊橋技術科学大学

次世代シミュレーション技術者教育プログラム

□ 目標・目的

- 最先端企業が真に必要とするスキルを備えた人材を育成・輩出
 - 高度なシミュレーション技術を「使いこなせる」人材
 - 次世代シミュレーション技術を「開発できる」人材
- シミュレーションの**妥当性**と結果の**正当性**を検証できる技術の習得

□ 背景

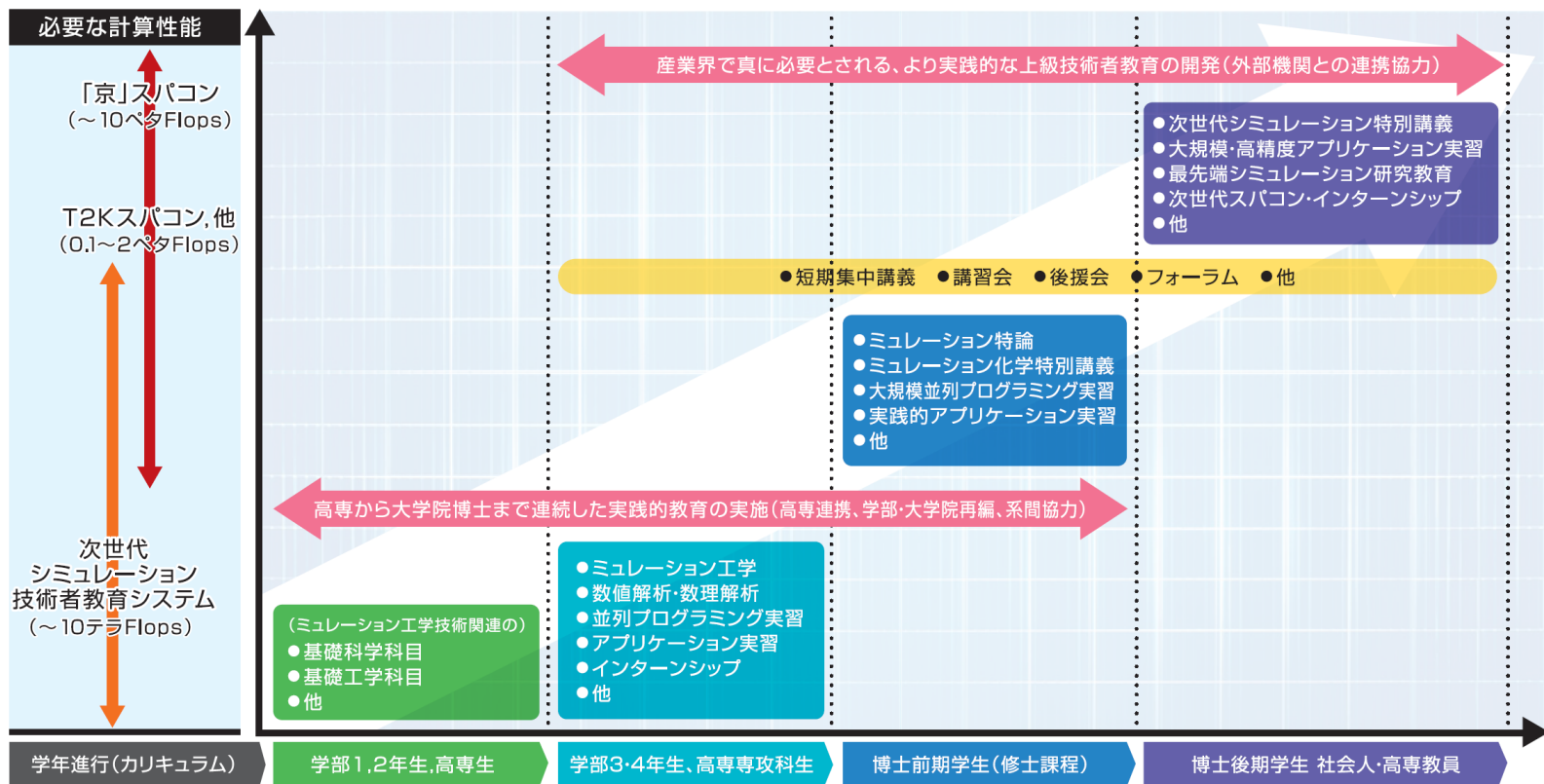
□ 産業界の「現場」の意見

シミュレーションの妥当性とシミュレーション結果の正当性の検証に裏打ちされたシミュレーション技術は研究開発に必須の技術で、我が国の産業の国際競争力の強化に欠かせない。... V-V (Validation and Verification) のできるシミュレーション技術者の必要性は高度なものづくりを推し進める上で極めて高く、わが国の産業界には必要不可欠である。(株式会社豊田中央研究所 菊池 昇 取締役副所長より)

□ 日本学術会議の提言

高品質なシミュレーションを担保とする最も重要な因子は人材育成の問題である。この問題は大学および大学院教育の問題と社会人教育の問題に分けられるが、... (中略) ...他分野も含めて国際的に通用する技術者認定制度に発展するよう国レベルでの支援が必要である。(ものづくり支援のための計算力学シミュレーションの品質保証に向けて(H23.4.28日本学術会議)より)

次世代シミュレーション技術者教育プログラム概要



● 学部1,2年生, 高専生

- 高専教員と本学教員が連携した教育推進と教材開発
- 本学と高専で同時受講できる講義(e-Learning教材)の遠隔地(Live/録画)配信の実施

● 学部3,4年生, 高専専攻科生

- 本学の学系間を横断した教員の連携協力による教育推進と教材開発
- 次世代シミュレーション技術教育システムと高度シミュレーションアプリケーションを活用した実践的実習

● 博士前期学生(修士課程), 博士後期学生 社会人・高専教員

- 学外スパコン(T2K, 『京』等)を活用した研究教育(インターンシップ等を含む)の実施
- より実践的な上級技術者や教育プログラムの開発と講習会等の実施
- 次世代シミュレーション技術者等に関する人材育成機関と連携した上級シミュレーション技術者認定制度, および高専教員, 博士研究員, 社会人技術者・研究者の再教育制度の検討

次世代シミュレーション技術教育プログラム一覧

□ 情報・知能工学系

- 分子シミュレーション技術者(技術開発)
- 分子シミュレーション技術者(応用解析)
- HPC(高速計算機)ソフトウェア技術者

□ 環境・生命工学系

- 分子シミュレーション技術者(実験解析)
- 環境動態シミュレーション技術者

□ 他(予定)

- 流体・熱流体シミュレーション技術者
- 電気・電子(電磁気学, 電子回路)シミュレーション技術者
- 災害(地震・津波)リスク評価シミュレーション技術者
- など

分子シミュレーション技術者（技術開発）

シミュレーション技術者を目指す学生は、これらの選択必修・選択科目を履修するとよい

	学部1年生	学部2年生	学部3年生	学部4年生	博士前期学生	博士後期学生
基礎科学科目 (全系共通)	<ul style="list-style-type: none"> 物理学基礎 ※1 化学基礎 ※1 ICT基礎 プログラミング演習 I 物理学 II, III, IV 化学 II, III 生物学 微分積分学 線形代数 	<ul style="list-style-type: none"> 微分方程式 物理学 化学 確率統計 				
専門科学 ※2 (情報・知能工学系)	<ul style="list-style-type: none"> 離散数学基礎 プログラミング演習 II 	<ul style="list-style-type: none"> 数理生命情報学序論 計算機アーキテクチャ概論 プログラミング演習 III 	<ul style="list-style-type: none"> 数理モデル論 計算機アーキテクチャ 数値解析 多変量解析論 	<ul style="list-style-type: none"> シミュレーション工学 データベース論 	<ul style="list-style-type: none"> シミュレーション特論 量子生命情報学特論 分子情報工学特論 	<ul style="list-style-type: none"> 分子シミュレーション特論
集中講義				<ul style="list-style-type: none"> 化学グラフ論 		
講習会, 他				<ul style="list-style-type: none"> 計算化学 (Gaussian, AMBER, 他) 講習会 計算物性科学 (Phase, OpenMX, 他) 講習会 HPC (並列プログラミング, 計算科学) 講習会 		

※1 高校で物理や化学を履修していない学生

※2 情報・知能工学系の必修科目は除いてある

※3 現在, 開講されていない科目もある

分子シミュレーション技術者(応用解析)

シミュレーション技術者をを目指す学生は、これらの選択必修・選択科目を履修するとよい

	学部1年生	学部2年生	学部3年生	学部4年生	博士前期学生	博士後期学生
基礎科学科目 (全系共通)	<ul style="list-style-type: none"> 物理学基礎 ※1 化学基礎 ※1 ICT基礎 プログラミング演習 I 物理学 II, III, IV 化学 II, III 生物学 微積分学 線形代数 	<ul style="list-style-type: none"> 微分方程式 物理学 化学 確率統計 				
専門科学 ※2 ※3 (情報・知能工学系)		<ul style="list-style-type: none"> 数理生命情報学序論 	<ul style="list-style-type: none"> 数理モデル論 数値解析 多変量解析論 	<ul style="list-style-type: none"> シミュレーション工学 データベース論 	<ul style="list-style-type: none"> シミュレーション特論 量子生命情報学特論 分子情報工学特論 	<ul style="list-style-type: none"> 分子シミュレーション特論
専門科学 ※3 (環境・生命工学系)		<ul style="list-style-type: none"> 基礎物理化学 I, II 	<ul style="list-style-type: none"> 分子物理化学 反応速度論 熱・エネルギー工学 		<ul style="list-style-type: none"> 物理化学特論 	
集中講義				<ul style="list-style-type: none"> 化学グラフ論 ※4 		
講習会, 他				<ul style="list-style-type: none"> 計算化学 (Gaussian, AMBER, 他) 講習会 計算物性科学 (Phase, OpenMX, 他) 講習会 HPC (並列プログラミング, 計算科学) 講習会 		

※1 高校で物理や化学を履修していない学生

※2 情報・知能工学系の必修科目は除いてある

※3 所属系以外の科目も履修することは可能です。各系で規定された単位数まで卒業・終了単位として認められます (学生便覧を参照)

※4 現在、開講されていない科目

HPC(高速計算機)ソフトウェア技術者

シミュレーション技術者をを目指す学生は、これらの選択必修・選択科目を履修するとよい

	学部1年生	学部2年生	学部3年生	学部4年生	博士前期学生	博士後期学生
基礎科学科目 (全系共通)	<ul style="list-style-type: none"> 物理学基礎 ※1 ICT基礎 プログラミング演習 I 物理学 II, III, IV 微分積分学 線形代数 	<ul style="list-style-type: none"> 微分方程式 物理学 確率統計 				
専門科学 ※1 (情報・知能工学系)	<ul style="list-style-type: none"> 論理回路基礎 	<ul style="list-style-type: none"> 計算機アーキテクチャ概論 	<ul style="list-style-type: none"> 論理回路応用 計算機アーキテクチャ オペレーティングシステム コンパイラ 	<ul style="list-style-type: none"> シミュレーション工学 	<ul style="list-style-type: none"> 計算機システム特論 ネットワーク工学特論 	<ul style="list-style-type: none"> 計算機システム工学特論 ネットワークシステム工学特論
講習会, 他				<ul style="list-style-type: none"> HPC技術者講習会 		

※1 高校で物理や化学を履修していない学生

分子シミュレーション技術者(実験解析)

シミュレーション技術者をを目指す学生は、これらの選択必修・選択科目を履修するとよい

	学部1年生	学部2年生	学部3年生	学部4年生	博士前期学生	博士後期学生
基礎科学科目 (全系共通)	<ul style="list-style-type: none"> 物理学基礎 ※1 化学基礎 ※1 ICT基礎 プログラミング演習 I 物理学 II, III, IV 化学 II, III 生物学 微分積分学 線形代数 	<ul style="list-style-type: none"> 微分方程式 物理学 化学 確率統計 				
専門科学 ※2 (環境・生命工学系)	<ul style="list-style-type: none"> 環境生態科学 	<ul style="list-style-type: none"> 基礎物理化学 I, II 	<ul style="list-style-type: none"> 数値解析 I, II 数理情報工学 物理化学 分子物理化学 反応速度論 熱・エネルギー工学 	<ul style="list-style-type: none"> プロセス装置工学 	<ul style="list-style-type: none"> 物理化学特論 	<ul style="list-style-type: none"> 先端環境技術特論 生態工学特論
集中講義						
講習会, 他				<ul style="list-style-type: none"> 分子理論 (Gaussian, 他) 講習会 実験解析 (CHEMKIN, 他) 講習会 		

※1 高校で物理や化学を履修していない学生

※2 コースによって必修科目が異なるので注意してください

環境動態シミュレーション技術者

シミュレーション技術者を目指す学生は、これらの選択必修・選択科目を履修するとよい

	学部1年生	学部2年生	学部3年生	学部4年生	博士前期学生	博士後期学生
基礎科学科目 (全系共通)	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 物理学基礎 ※1 ▪ 化学基礎 ※1 ▪ ICT基礎 ▪ プログラミング演習 I ▪ 物理学 II, III, IV ▪ 化学 II, III ▪ 生物学 ▪ 微分積分学 ▪ 線形代数 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 微分方程式 ▪ 物理学 ▪ 化学 ▪ 確率統計 				
専門科学 ※2 (環境・生命工学系)	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 環境生態科学 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 基礎物理化学 I, II 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 数値解析 I, II ▪ 数理情報工学 ▪ 物理化学 ▪ 大気環境システム工学 		<ul style="list-style-type: none"> ▪ 環境システム工学特論 	<ul style="list-style-type: none"> ▪ 先端環境技術特論 ▪ 生態工学特論
集中講義						
講習会, 他				<ul style="list-style-type: none"> ▪ 動態モデリング (CFX, 他) 講習会 ▪ 実験解析 (CHEMKIN, 他) 講習会 		

※1 高校で物理や化学を履修していない学生

※2 コースによって必修科目が異なるので注意してください

講習会・集中講義 一覧

□ 高度シミュレーション・アプリケーション利活用

- 分子シミュレーション講習会 (Gaussian, AMBER, CONFLEX)
- 化学反応解析講習会 (CHEMKIN)
- 第一原理物性シミュレーション講習会 (Phase/OpenMX)
- 3D塑性加工シミュレーション講習会 (DEFORM-3D)

□ 次世代シミュレーション技術開発

- スーパーコンピュータ利用講習会 (京大, 本学)
- HPC技術者講習会 (OpenMP, MPI, CUDA, Xeon Phi)
- 数値解析講習会 (MATLAB)

□ 集中講義(予定)

- 次世代シミュレーション特論I, II
- 高速計算プログラミング特論I, II

教育設備： 次世代シミュレーション技術教育計算機システム

Manufacture	Hitachi
Cores	480
Linpack Performance	9.656 TFlop/s
Theoretical Peak	10.368 TFlop/s
Power	14.85 KW
Memory	1920 GiB
Interconnect	4X FDR InfiniBand
Operating System	Redhat Enterprise Linux 6.2



2013年 10月 1日より 正式運用開始

教育設備：

次世代シミュレーション技術教育計算機システム

□ 開発処理サーバ

- Hitachi HA8000-tc/HT210 (Xeon E5-2680 8 Cores 2.7 GHz × 2, 64 GB memory, **Nvidia Tesla K20X**) × 2 nodes

□ 演算ノード

- Hitachi HA8000-tc/HT210 (Xeon E5-2680 8 Cores 2.7 GHz × 2, 64 GB memory) × 26 nodes
- Hitachi HA8000-tc/HT210 (Xeon E5-2680 8 Cores 2.7 GHz × 2, 64 GB memory, **Nvidia Tesla K20X**) × 2 nodes

□ ファイルサーバ

- DataDirect NETWORKS SFA10K-M: 240 TB + HP ProLiant DL380P Gen8

□ ネットワーク

- 4X FDR Infiniband Network, Gb Ethernet × 2

□ メインスイッチ

- Cisco Catalyst 3750-x

利用可能な開発環境

コンパイラ

Intel Cluster Studio XE 13.0.1.117 Build 20121010

PGI Accelerator Fortran/C/C++ Server13.1-1

GNU 4.4.6

メッセージ通信ライブラリ(MPI)

Intel MPI 13.0.1.117 Build 20121010

Open MPI 1.6.2

MPICH2 1.5rc3

MPICH1 1.2.7p1

ソフトウェア構成(1)

構造解析

ANSYS Multiphysics	14.5	マルチフィジックス解析ツール
ANSYS CFX	14.5	汎用熱流体解析ソフトウェア
ANSYS Fluent	14.5	汎用熱流体解析ソフトウェア
ANSYS LS-DYNA	14.5	落下・衝突解析ツール
ABAQUS	6.12	汎用非線形有限要素解析プログラム
Patran	2012.2	CAE環境統合プリ・ポストソフトウェア
DEFORM-3D	10.2	有限要素法を用いた3次元塑性加工シミュレーションソフト

計算物質科学

PHASE	11.00	第一原理擬ポテンシャルバンド計算ソフトウェア
PHASE-Viewer	3.2.0	GUI統合環境ソフトウェア
UVSOR	3.42	第一原理擬ポテンシャル誘電応答解析ソフトウェア
OpenMX	3.6	相対論的量子力学に基づくボトムアップ型の階層的な第一原理シミュレーター

ソフトウェア構成(2)

計算化学

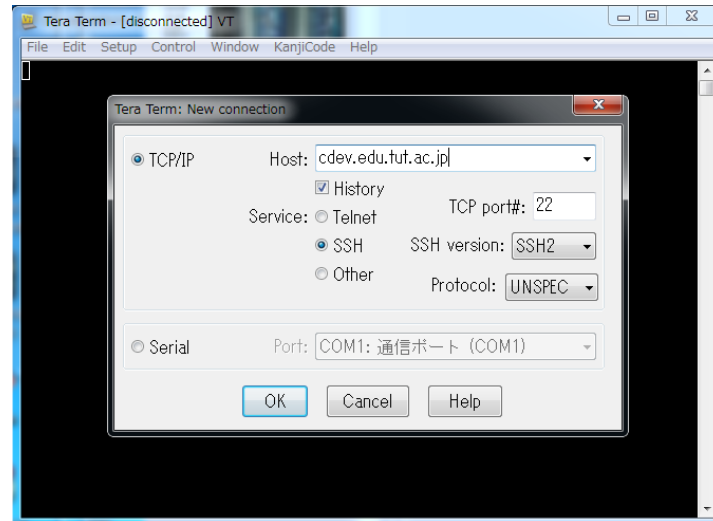
Gaussian	09 Rev.C.01	Electronic structure program
NWChem	6.1.1	A comprehensive and scalable open-source solution for large scale molecular simulations
GAMESS	2012.T2	A general ab initio quantum chemistry package
MPQC	3.0-alpha	Massively Parallel Quantum Chemistry Program
Amber	12	Molecular Dynamics Package
AmberTools	12	Set of several independently developed packages that work well by themselves, and with Amber itself
CONFLEX	7	汎用分子力学計算ソフトウェア
CHEMKIN-PRO	15112	詳細化学反応解析支援ソフトウェア

技術処理

MATLAB	R2012a	数値計算言語
--------	--------	--------

ログイン方法

- TeraTerm や putty などの SSH クライアントを利用して,
cdev.edu.tut.ac.jp
にログインして下さい.



- ユーザ名とパスワードは, 情報メディア基盤センターを利用する
ユーザ名とパスワードが使えます.
- 情報メディア基盤センターを利用するユーザ名とパスワードをお持ちの方は, だれでもログインできます.

コンパイラの利用方法(1)

- Intel compiler, Intel MPIを利用する場合(初期設定)

```
$ module load intelmpi.intel
```

- Intel compiler, OpenMPIを利用する場合

```
$ module load openmpi.intel
```

- Intel compiler, MPICH2を利用する場合

```
$ module load mpich2.intel
```

- Intel compiler, MPICH1を利用する場合

```
$ module load mpich.intel
```

コンパイラの利用方法(2)

□ Intel compilerを利用する場合

```
$ module load intel
```

□ PGI compilerを利用する場合

```
$ module load pgi
```

□ GUN compilerを利用する場合

```
$ module load gcc
```

□ 環境を切り替える場合

```
$ module unload *****
```

例えば, Intel compiler, Intel MPIの環境から, Intel compiler, OpenMPIの環境に変更する場合:

```
% module unload intelmpi.intel
```

```
% module load openmpi.intel
```

コンパイラの利用方法(3)

□ Cプログラムのコンパイル (intel compiler, intel MPIの場合)

□ MPI

```
$ mpiicc sample_c_mpi.c -o sample_c_mpi
```

□ OpenMP

```
$ icc -openmp sample_c_omp.c -o sample_c_omp
```

□ OpenMP, MPIハイブリッド

```
$ mpiicc -openmp sample_c_omp_mpi.c -o sample_c_omp_mpi
```

□ Fortranプログラムのコンパイル (intel compiler, intel MPIの場合)

□ MPI

```
$ mpiifort sample_f_mpi.f90 -o sample_f_mpi
```

□ OpenMP

```
$ ifort -openmp sample_f_omp.f90 -o sample_f_omp
```

□ OpenMP, MPIハイブリッド

```
$ mpiifort -openmp sample_f_omp_mpi.f90 -o sample_f_omp_mpi
```

コンパイラの利用方法(4)

□ Cプログラムのコンパイル (intel compiler, OpenMPI/MPICH2/MPICH1の場合)

□ MPI

```
$ mpicc sample_c_mpi.c -o sample_c_mpi
```

□ Fortranプログラムのコンパイル (intel compiler, OpenMPI/MPICH2/MPICH1の場合)

□ MPI

```
$ mpif90 sample_f_mpi.f90 -o sample_f_mpi
```

□ サンプルプログラムファイル

□ <https://imc.tut.ac.jp/wiki/Research/ClusterSystem>へアクセス

□ 「サンプルファイル」の項目から, sample.omp.mpi.zipをダウンロード

ジョブスケジューラ (**TORQUE4.2**)

- ジョブ実行時は、必ず、ジョブスケジューラを用いる。
- 開発ノードでの実行は避ける。

キュー名	利用可能ノード数	経過時間制限 /ジョブ	プロセス制限 /ノード	メモリ容量制限 /ノード
eduq	26	1時間(最大1時間)	16	3GB(最大48GB)
rchq	28	24時間(最大336時間)	16	3GB(最大48GB)

□ eduq

- 本学教員, 学生等, 開発ノードにログインできる方が利用可能
- 教育用キュー

□ rchq

- 情報メディア基盤センターの研究登録種別Aに登録されている方が利用可能
- 研究用キュー

ジョブスケジューラ(**TORQUE**)の利用方法(1)

□ ジョブ投入例

- Torque用の実行スクリプトを作成し、qsubコマンドで次のようにジョブ投入します

% qsub 実行スクリプトファイル名

No.	オプション	使用例	意味
1	-e	-e filename	標準エラー出力の内容を指定されたファイル名に出力する。-eオプションが指定されていない場合は、qsubコマンドが実行されたディレクトリ上に作成される。その際のファイル名は“ジョブ名.eジョブ番号”になる。
2	-o	-o filename	標準出力の内容を指定されたファイル名に出力する。-oオプションが指定されていない場合は、qsubコマンドが実行されたディレクトリ上に作成される。その際のファイル名は“ジョブ名.oジョブ番号”になる。
3	-j	-j join	標準出力、標準エラー出力を1個のファイルにマージするかしないかの動作を指定する。 -j oe:標準出力に標準エラー出力をマージする -j eo:標準エラー出力に標準出力をマージする -j n: 標準出力と標準エラー出力をマージしない(デフォルト)

ジョブスケジューラ(**TORQUE**)の利用方法(2)

No.	オプション	使用例	意味
4	-q	-q destination	ジョブを投入するキューを指定する。
5	-l	-l resource_list	ジョブの実行に必要なリソース資源を指定する。
6	-N	-N name	ジョブ名を指定する(文字数は15文字まで)。デフォルトはスクリプトでジョブが投入された場合は、スクリプトのファイル名となる。そうでない場合は、“STDIN”になる。
7	-m	-m mail_events	ジョブの状態をメールで通知する指定を行う。 -m n:メールを送信しない -m a:異常終了時 -m b:処理開始時 -m e:処理終了時
8	-M	-M user_list	メールを送信するメールアドレスを指定する。

実行スクリプトファイル例：逐次プログラム

#!/bin/sh

#PBS -l nodes=1:ppn=1 ←1ノード1プロセス利用

#PBS -q eduq ←eduqを指定

cd \$PBS_O_WORKDIR ←実行ディレクトリに移動

./sample_c ←実行コマンド

* 注1: nodes, ppnは1とする

実行スクリプトファイル例: **MPI**

#!/bin/sh

#PBS -l nodes=2:ppn=16 ←2ノード利用, 1ノードあたり16プロセス利用

#PBS -q eduq ←eduqを指定

MPI_PROCS=`wc -l \$PBS_NODEFILE | awk '{print \$1}'` ←MPI_PROCS=総プロセス数

cd \$PBS_O_WORKDIR ←実行ディレクトリに移動

mpirun -np \$MPI_PROCS ./sample_c_mpi ←実行コマンド

- * 注1: eduqを利用する場合: nodesは1~26の値を指定するとする.
- * 注2: rchqを利用する場合: nodesは1~28の値を指定するとする.
- * 注3: ppnは1~16の値を指定する.
- * 注4: MPICH2を用いる場合, mpirunのオプションに「-iface ib0」も指定する.

実行スクリプトファイル例: **OPENMP**

#!/bin/sh

#PBS -l nodes=1:ppn=8 ←8スレッド利用

#PBS -q eduq ←eduqを指定

export OMP_NUM_THREADS=8 ←スレッド数を指定

cd \$PBS_O_WORKDIR ←実行ディレクトリに移動

./sample_c_omp ←実行コマンド

- * 注1: OpenMPのみの並列プログラムの場合nodesは1とする.
- * 注2: ppnは1~16の値を指定する.
- * 注3: ppnの値とOMP_NUM_THREADSの値を一致させる.

実行スクリプトファイル例： **OPENMP/MPI**ハイブリッド

#!/bin/sh

#PBS -l nodes=4:ppn=8 ←4ノードを利用, 1ノードあたり8スレッド利用

#PBS -q eduq ←eduqを指定

export OMP_NUM_THREADS=8 ←各ノードのスレッド数を指定

cd \$PBS_O_WORKDIR ←実行ディレクトリに移動

sort -u \$PBS_NODEFILE > hostlist ←利用するホストリストを作成

mpirun -np 4 -machinefile ./hostlist ./sample_c_omp_mpi ←実行コマンド

* 注1: eduqを利用する場合: nodesは1~26の値を指定するとする.

* 注2: rchqを利用する場合: nodesは1~28の値を指定するとする.

* 注3: ppnは1~16の値を指定する.

* 注4: ppnの値とOMP_NUM_THREADSの値を一致させる.

実行スクリプトファイル例：逐次プログラム メモリ容量の指定

`#!/bin/sh`

`#PBS -l nodes=1:ppn=1,mem=16gb` ←ジョブあたりのメモリ容量16GB

`#PBS -q eduq` ←eduqを指定

`cd $PBS_O_WORKDIR` ←実行ディレクトリに移動

`./sample_c` ←実行コマンド

実行スクリプトファイル例: **MPI**

ホストの指定

```
#!/bin/sh
```

```
#PBS -l nodes=csnd00:ppn=16+csnd01:ppn=16 ←csnd00, csnd01を指定
```

```
#PBS -q eduq
```

```
MPI_PROCS=`wc -l $PBS_NODEFILE | awk '{print $1}'`
```

```
cd $PBS_O_WORKDIR
```

```
mpirun -np $MPI_PROCS ./sample_c_mpi
```

* 注1: 演算ノードのホスト名はcsnd00~csnd27である

* 注2: csnd00, csnd01はTeslaK20Xを搭載している

ジョブ状態の確認方法

□ ジョブの状態表示

```
$ qstat -a
```

□ キューの状態表示

```
$qstat -Q
```

No.	オプション	意味
1	-a	すべてのキューイング・実行中のジョブを表示する
2	-Q	すべてのキューの状態を簡易表示させる
3	-Qf	すべてのキューの状態を詳細表示させる
4	-q	キューの制限値を表示する
5	-n	ジョブに割り当てた計算ノードのホスト名を表示させる
6	-r	実行中のジョブのリストを表示する。
7	-i	非実行中のジョブリストを表示させる

ジョブの削除

□ ジョブの削除にはqdelコマンドを利用する

\$ qdel ジョブ番号

* ジョブ番号はqstatコマンドより確認する.

ソフトウェアの利用方法(1)

□ GAUSSIANを利用する場合

```
$ module load gaussian
```

□ PHASEを利用する場合

```
$ module load pahse
```

□ その他, 利用可能なコマンド

□ ソフトウェア利用環境の設定方法を参照

```
https://imc.tut.ac.jp/wiki/Research/ClusterSystem#A.2BML0w1TDIMKYwpzCiUi1KHSwWIMwbootW5pluWzV.2Fwg-9.2BZwg-13.2BZeVz.2FlcoMABnKlv.2BX9z.2FCQ-
```

□ ソフトウェアの環境設定を削除する場合

```
$ module unload * * * *
```

例えば, Gaussianの環境設定を削除する場合:

```
% module unload gaussian
```

ソフトウェアの利用方法(2)

- 各ソフトウェアをジョブスケジューラを用いて実行する場合, 利用するソフトウェアに応じて実行スクリプトを作成する必要がある

- 例: Gaussain

```
#!/bin/sh
#PBS -l nodes=1:ppn=1
#PBS -q eduq

export g09root="/common/gaussian09-C.01"
. $g09root/g09/bsd/g09.profile

cd $PBS_O_WORKDIR

g09 methane.com
```

- 各ソフトウェアの実行スクリプト例:

- ジョブ実行方法を参照

<https://imc.tut.ac.jp/wiki/Research/ClusterSystem#A.2BMLgw5zDWW5.2BITGW5bNU->

ソフトウェアの利用方法(3): WEB UIからの実行方法

URL: <https://stsk.edu.tut.ac.jp/>

ユーザ名とパスワードは、情報メディア基盤センターを
利用するユーザ名とパスワード。

ShareTask MPI ログイン

ID (GDAFREQ)

パスワード

ブラウザにログイン情報を保存する

ログイン リセット

5.43-1-tut.ac.jp (C)2012 ANCL Inc.

ログイン前

ジョブ登録

トップ | ジョブ登録 | ジョブリスト | キュー混雑状況 | バッチジョブ利用集計

LOGOUT

TUT HPCシステムへようこそ！

本Webインターフェースより、豊橋技術科学大学次世代シミュレーション技術教育計算機システムの構造解析、計算物質科学、計算化学、技術処理などのアプリケーションソフトウェアを実行できます。

以下より、利用したいソフトウェアを選択してください。

* Serial版とParallel版の両方が利用できます。

構造解析		
ANSYS Multiphysics *	14.5	マルチフィジクス解析ツール
ANSYS CPX	14.5	汎用熱流体解析ソフトウェア
ANSYS LS-DYNA	14.5	落下・衝突解析ツール
ABAQUS	6.12	汎用非線形有限要素解析プログラム
Petran	2012.2	CAE環境統合プリポストソフトウェア
DEFORM-3D	10.2	有限要素法を用いた3次元塑性加工シミュレーションソフト
計算物質科学		
PHASE *	11.00	第一原理擬ポテンシャルバンド計算ソフトウェア
UNSOR *	3.42	第一原理擬ポテンシャル誘電応答解析ソフトウェア
OpenMX *	3.6	相対論的量子力学に基づくボトムアップ型の階層的第一原理量子シミュレーター
計算化学		
Gaussian *	09 Rev.C.01	Electronic structure program
NWChem *	6.1.1	A comprehensive and scalable open-source solution for large scale molecular simulations
GAMMESS *	2012 R2	A general ab initio quantum chemistry package
MPQC	3.0-alpha	Massively Parallel Quantum Chemistry Program
Amber *	12	Molecular Dynamics Package (AmberToolsを含みます)
CONFLEX *	7	汎用分子力学計算ソフトウェア
技術処理		
MATLAB	R2012a	数値計算言語
汎用		
SHELL		シェルスクリプト

ログイン後

今後の講習会予定

- HPC技術者講習会: GPGPU編 **本日午後**
- HPC技術者講習会: MPI編
- HPC技術者講習会: OpenMP編
- HPC技術者講習会: Xeon Phi編
- CloudStackによるHadoop環境の構築・利用
- など

その他, 受講したい講習会内容があれば...

次世代シミュレーション技術者教育推進事務室へ:
office@adsim.tut.ac.jp

次世代シミュレーション技術教育計算機システムマニュアル:
<https://imc.tut.ac.jp/wiki/Research/ClusterSystem>