

# 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

**2014年3月12日**



**第2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 window displaying the homepage of the program. The page features a dark background with a grid of navigation buttons and a news section. The navigation buttons are arranged in a grid and include:

- 教育プログラムの概要
- 教育プログラムのご紹介
- 教育設備のご紹介
- 教育教材のご紹介
- イベント情報
- 募集
- 活動報告
- 外部連携
- 関連リンク

The news section, titled "News", lists several updates:

- 2014年02月21日 3月5日 (水) 教育・人材育成「マルチスケールの計算材料科学」を開催します。
- 2014年02月07日 3月12日 (水) HPC技術者講習会・MPI版を開催します。
- 2014年02月07日 3月12日 (水) 次世代シミュレーション技術教育計算機システム・利用講習会を開催します。
- 2014年01月22日 2月5日 (水) 第7回コンピュータ・シミュレーション・フォーラム・オンラインコミュニティングを開催します。
- 2013年11月12日 12月2日 (月) 第2回CMSI人材育成シンポジウム「大規模計算に生じた数値誤差及び可視化」を開催します。
- 2013年09月12日 9月30日 (月) HPC技術者講習会・GPU版を開催します。

At the bottom of the page, there is a copyright notice: 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

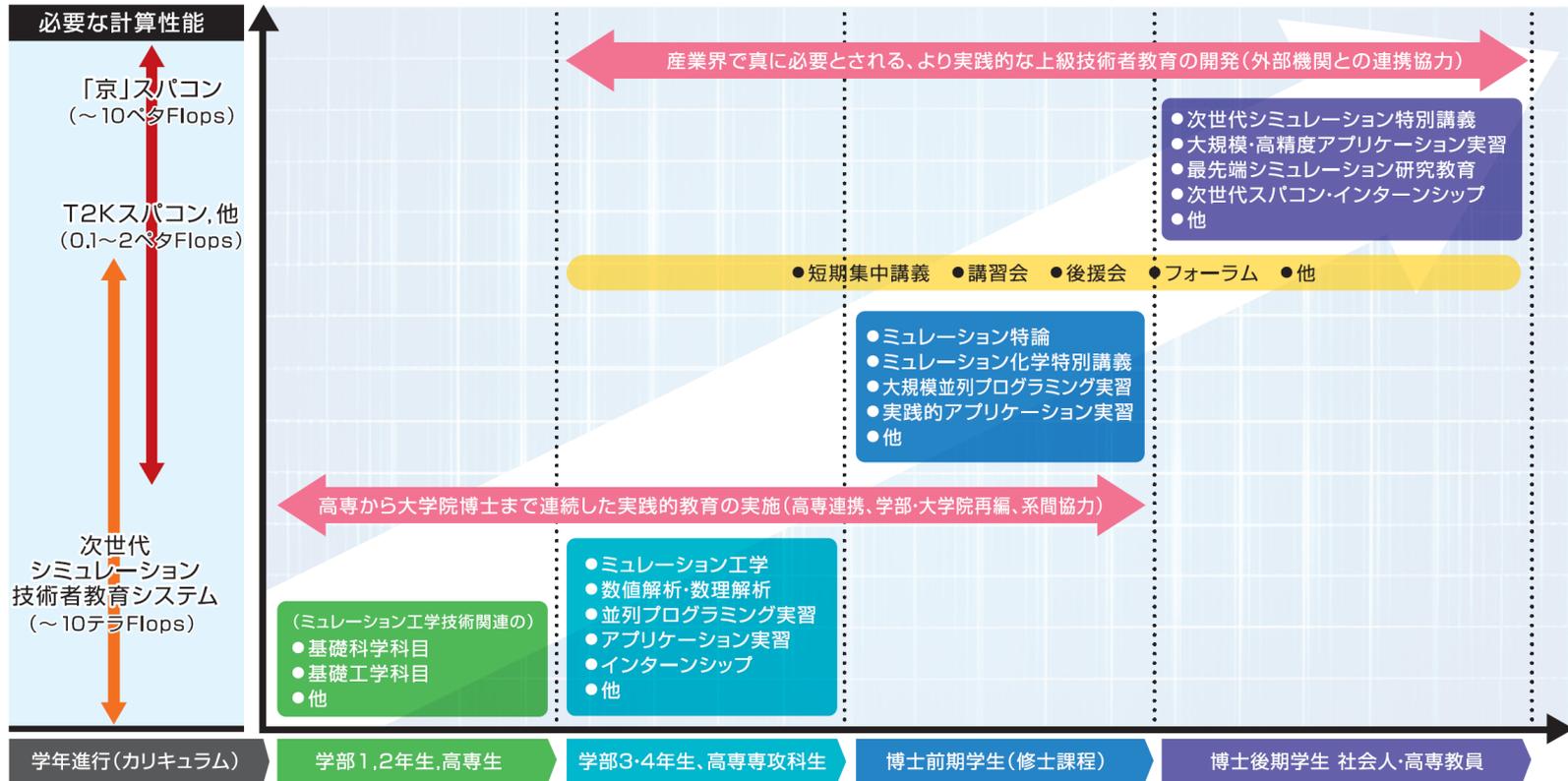
#### □ 産業界の「現場」の意見

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

---

5分野6種類の教育プログラム:

## ① 機械工学課程・専攻: 計算力学技術者教育プログラム

機械工学のシミュレーション(計算力学)に精通し, 関連する研究や製品開発ができ, 機械工学の知識に基づいて計算結果の妥当性を検証できる技術者を育成。

## ② 電気・電子情報工学課程・専攻: 電磁界シミュレーション技術者教育プログラム

電磁界シミュレーション技術に精通し, 素子や機械の開発を助け, 電磁気学に基づき計算結果の妥当性を検証できる技術者を育成。

## ③ 情報・知能工学課程・専攻: シミュレーション科学技術者教育プログラム

シミュレーション技術(計算科学)に精通し, 新しい理論や計算法の考案, 導入, 検証, また関連するアプリケーション・プログラムの作成や修正ができる技術者を育成。

# 次世代シミュレーション技術教育プログラム一覧

---

## 5分野6種類の教育プログラム:

### ④ 情報・知能工学課程・専攻:高速計算機(HPC)ソフトウェア技術者教育プログラム

高速計算機や数値計算アルゴリズムに精通し、メニーコアや計算機クラスター開発などの現場、またはそのためのソフトウェア開発の現場で活躍できる技術者を育成。

### ⑤ 環境・生命工学課程・専攻:分子シミュレーション技術者教育プログラム

分子シミュレーション技術に精通し、創薬や機能性材料、分子反応解析などの「ものづくり」の現場で活躍できる人材を育成。

### ⑥ 建築・都市システム学課程・専攻:都市空間シミュレーション技術者教育プログラム

都市空間における環境や防災に関するシミュレーション技術に精通し、安全・安心で持続可能な都市空間形成の現場で活躍できる人材を育成。

# 次世代シミュレーション技術者教育プログラム 修了認定を受けるために

---

## □ 教育プログラム受講登録

本教育プログラムの修了認定を受けるためには、次世代シミュレーション技術者教育推進室において予め受講登録する必要があります。

(登録は学部3年次と博士前期1年次の前期期間(履修登録期間)に受け付けをします)

## □ 教育プログラム修了認定要件

本教育プログラムの修了認定要件は、学生が所属する課程・専攻の卒業・修了要件を満たし、次世代シミュレーション技術者教育推進室が指定する科目について、必要な最低修得科目数以上を修得している必要があります。

# 教育プログラム修了認定要件

## 次世代シミュレーション技術者教育プログラム指定科目の概要：

科目区分	認定要件 科目数※1	指定科目の概要
専門分野別 学部科目 ※2	3～6科目以上	学部 3, 4 年次に開講される授業科目の中から、次世代シム推進室が精査し、シミュレーション技術者に必須の知識や技術を含む内容であると指定した科目。必修指定科目と選択指定科目がある。
専門分野別 博士前期科目	2科目以上	博士前期課程で開講される授業科目の中から、次世代シム推進室が精査し、シミュレーション技術者に必須の知識や技術を含む内容であると認定された科目。必修指定科目と選択指定科目がある。
AS 科目	2科目	次世代シム推進室が開発した科目。最新のシミュレーション技術やプログラミング技術に関して、講習会と実習を組み合わせた内容の科目。また、次世代シム推進室と連携する外部組織が開発した教材を含む。専門分野によっては、一部、必修となる。

※1 専門分野によって認定要件となる最低修得科目数は異なる。

※2 学部で未履修の場合、あるいは他大学から大学院に入学した場合は、原則として、学部講義を履修すること（ただし、博士前期課程の修了要件の単位としては認められない）。時間割の関係で履修ができない場合、一部の科目を e-学習教材で修得できるよう準備中です。

# 次世代シミュレーション技術者教育プログラム 指定科目(1)

## (1) 計算力学技術者教育プログラム科目

### 機械工学課程 第3年次入学者及び進級者

区分	指定科目	授業科目	単位数	講時数				備考
				3年次		4年次		
				前期	後期	前期	後期	
専門分野別	必修	計算機援用工学演習	2		2			1科目以上習得しなければならない。
	選択	CAD/CAM/CAE演習	2		2			2科目以上修得しなければならない。
		弾性力学	2		1			
		振動工学	2		1			
		制御工学	2		1			
		流体力学	2		1			
		応用熱工学	2	1				
		ロボット工学	2	1				
		熱流体輸送学	2		1			
		材料信頼性工学	2			1		
		現代制御工学	2			1		
応用流体力学	2			1				

### 機械工学専攻

区分	指定科目	授業科目	単位数	講時数				備考
				1年次		2年次		
				前期	後期	前期	後期	
専門分野別	必修	—						
	選択	振動工学特論	2		1			2科目以上修得しなければならない。
		構造・表面工学特論	2		1			
		材料保証学	2	1				
		ロボット工学特論	2		1			
		システム制御特論	2	1				
		応用流体力学	2		1			
		乱流工学	2	1				
		輸送現象論	2	1				
		応用燃焼学	2		1			
AS科目	選択	次世代シミュレーション特論Ⅰ	1	集中		(集中)	2科目以上修得しなければならない。	
		次世代シミュレーション特論Ⅱ	1	集中		(集中)		
		高速計算プログラミング特論Ⅰ	1	集中		(集中)		
		高速計算プログラミング特論Ⅱ	1	集中		(集中)		

## (2) 電磁界シミュレーション技術者教育プログラム科目

### 電気・電子情報工学課程 第3年次入学者及び進級者

区分	指定科目	授業科目	単位数	講時数				備考
				3年次		4年次		
				前期	後期	前期	後期	
専門分野別	必修	電磁波工学	2		1			2科目以上修得しなければならない。
		高周波回路工学	2		1			
	選択	電気材料論	2			1		
		光エレクトロニクス	2			1		
		計測工学	2			1		
		集積回路工学	2			1		
		量子力学Ⅱ	2		1			
		固体電子工学Ⅰ	2		1			

### 電気・電子情報工学専攻

区分	指定科目	授業科目	単位数	講時数				備考
				1年次		2年次		
				前期	後期	前期	後期	
専門分野別	必修	マイクロ波回路工学	2	1				
	選択	固体電子材料論	2		1			2科目以上修得しなければならない。
		光・量子電子工学	2		1			
		材料エレクトロニクス論	2		1			
		デジタルシステム論	2		1			
AS科目	選択	次世代シミュレーション特論Ⅰ	1	集中		(集中)	2科目以上修得しなければならない。	
		次世代シミュレーション特論Ⅱ	1	集中		(集中)		
		高速計算プログラミング特論Ⅰ	1	集中		(集中)		
		高速計算プログラミング特論Ⅱ	1	集中		(集中)		

# 次世代シミュレーション技術者教育プログラム 指定科目(2)

## (3)シミュレーション科学技術者教育プログラム科目

### 情報・知能工学課程 第3年次入学者及び進級者

区分	指定科目	授業科目	単位数	講時数				備考
				3年次		4年次		
				前期	後期	前期	後期	
専門分野別	必修	数値解析論	2	1				2科目以上修得しなければならない。
		シミュレーション工学	2			1		
	選択	応用線形代数論	2	1				
		データベース	2		1			
		分子情報学	2		1			
		計算機アーキテクチャ	2	1				
		多変量解析論	2		1			

## (4)高速計算機(HPC)技術者教育プログラム

### 情報・知能工学課程 第3年次入学者及び進級者

区分	指定科目	授業科目	単位数	講時数				備考
				3年次		4年次		
				前期	後期	前期	後期	
専門分野別	必修	計算機アーキテクチャ	2	1				2科目以上修得しなければならない。
		オペレーティングシステム	2		1			
	選択	応用線形代数論	2	1				
		数値解析論	2	1				
		デジタル信号処理	2		1			
		コンパイラ	2		1			
		ユビキタス・分散処理	2		1			
		シミュレーション工学	2			1		

### 情報・知能工学専攻

区分	指定科目	授業科目	単位数	講時数				備考
				1年次		2年次		
				前期	後期	前期	後期	
専門分野別	必修	シミュレーション特論	2	1				2科目以上修得しなければならない。
		量子・生命情報学特論	2	1				
	選択	分子情報学特論	2	1				
		アルゴリズム工学特論	2		1			
AS科目	選択	次世代シミュレーション特論Ⅰ	1	集中		(集中)		2科目以上修得しなければならない。
		次世代シミュレーション特論Ⅱ	1	集中		(集中)		
		高速計算プログラミング特論Ⅰ	1	集中		(集中)		
		高速計算プログラミング特論Ⅱ	1	集中		(集中)		

### 情報・知能工学専攻

区分	指定科目	授業科目	単位数	講時数				備考
				1年次		2年次		
				前期	後期	前期	後期	
専門分野別	必修	計算機システム特論	2		1			2科目以上修得しなければならない。認定プログラムによっては、一部、必修となる。
		アルゴリズム工学特論	2		1			
	選択	シミュレーション特論	2	1				
AS科目	選択	次世代シミュレーション特論Ⅰ	1	集中		(集中)		2科目以上修得しなければならない。認定プログラムによっては、一部、必修となる。
		次世代シミュレーション特論Ⅱ	1	集中		(集中)		
		高速計算プログラミング特論Ⅰ	1	集中		(集中)		
		高速計算プログラミング特論Ⅱ	1	集中		(集中)		

# 次世代シミュレーション技術者教育プログラム 指定科目(3)

(5) 分子シミュレーション技術者教育プログラム科目  
環境・生命工学課程 第3年次入学者及び進級者

区分	指定科目	授業科目	単位数	講時数				備考
				3年次		4年次		
				前期	後期	前期	後期	
専門分野別	必修	物理化学	2	1				
	選択I	数理解析A	2	1				3科目以上修得しなければならない。
		数理解析B	2	1				
		数理情報工学	2	1				
		生命化学I	2	1				
		有機化学	2	1				
		分子生物学I	2	2		1		
		分子生物学II	2	2				
	有機合成学	2	1					
	選択II	熱・エネルギー工学	2		1			2科目以上修得しなければならない。
高分子科学		1		1				
高分子材料工学		1		1				

環境・生命工学専攻

区分	指定科目	授業科目	単位数	講時数				備考
				1年次		2年次		
				前期	後期	前期	後期	
専門分野別	必修(共通)	物理化学特論	2	1				
	選択	分子生命科学特論	2	1				1科目以上修得しなければならない。
		有機材料工学特論	2	1				
		バイオ材料工学特論	2	1				
		応用有機化学特論	2		1			
		分子物理化学特論	1	1				
AS科目	選択	次世代シミュレーション特論I	1	集中		(集中)	2科目以上修得しなければならない。(一部、必修)	
		次世代シミュレーション特論II	1	集中		(集中)		
		高速計算プログラミング特論I	1	集中		(集中)		
		高速計算プログラミング特論II	1	集中		(集中)		

(6) 都市空間シミュレーション技術者教育プログラム科目  
建築・都市システム学課程 第3年次入学者及び進級者

区分	指定科目	授業科目	単位数	講義数				備考
				3年次		4年次		
				前期	後期	前期	後期	
専門分野別	必修	構造力学IV	2		1			3科目以上修得しなければならない。
	選択	鋼構造学	1.5	1				
		建設材料学	2		1			
		建築環境設備学	2		1			
		空間情報演習	1		1			
		交通システム工学	2		1			
		流れと波の力学	2	1				
		土木計画学	2	1				

建築・都市システム学専攻

区分	指定科目	授業科目	単位数	講義数				備考
				1年次		2年次		
				前期	後期	前期	後期	
専門分野別	必修	リスクマネジメント論	2		1			2科目以上修得しなければならない。
	選択	構造解析論	2	1				
		耐震構造設計論	2	1				
		建築設備デザイン	2		1			
		建築環境デザイン	2		1			
		地盤解析論	2		1			
		水圏防災論	2		1			
		産業政策論	2	1				
AS科目	選択	次世代シミュレーション特論I	1	集中			2科目以上修得しなければならない。	
		次世代シミュレーション特論II	1	集中				
		高速計算プログラミング特論I	1	集中				
		高速計算プログラミング特論II	1	集中				

# 講習会一覧

---

## □ 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)

## □ ビヨンド・シミュレーション・フォーラム

## □ 次世代シミュレーション講演会

## □ など

# 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 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

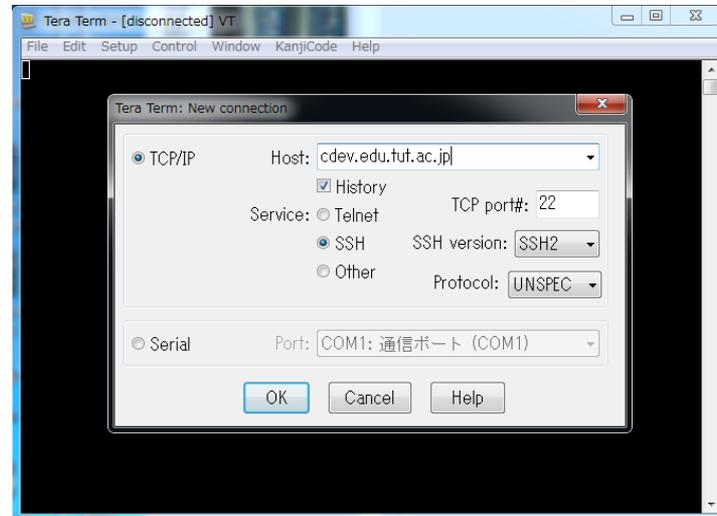
Gaussian	09 Rev.C.01	Electronic structure program
NWChem	6.1.1	A comprehensive and scalable open-source solution for large scale molecular simulations
GAMESS	2012.T2	A general ab initio quantum chemistry package
MPQC	3.0-alpha	Massively Parallel Quantum Chemistry Program
Amber	12	Molecular Dynamics Package
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, だれでもログインし利用することができます.

# 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.
- \* 注5: nodesと-np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

設定可能なメモリ容量

例：#PBS -l nodes=1:ppn=4,mem=48gb,pvmem=48gb

## **mem**

Maximum physical memory used by all processes. Unit can be b (bytes), w (words), kb, kw, mb, mw, gb or gw. If it is omitted, default value will be used.

## **pmem**

Maximum per-process physical memory. Unit can be b (bytes), w (words), kb, kw, mb, mw, gb or gw. If it is omitted, default value will be used.

## **vmem**

Maximum virtual memory used by all processes. Unit can be b (bytes), w (words), kb, kw, mb, mw, gb or gw. If it is omitted, default value will be used.

## **pvmem**

Maximum virtual memory per processes. Unit can be b (bytes), w (words), kb, kw, mb, mw, gb or gw. If it is omitted, default value will be used..

# 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.

# 空きノードの確認

- 空きノードを確認するためにはpbsnodesコマンドを利用する

```
$ pbsnodes
```

出力例:

```
[so010@cdev1 ~]$ pbsnodes
```

```
csnd03
```

```
state = job-exclusive
```

```
np = 16
```

```
properties = CPU,rch,edu
```

```
ntype = cluster
```

```
jobs = 0/7051.cdev0, 1/7051.cdev0, 2/7051.cdev0, 3/7051.cdev0, 4/7051.cdev0, 5/7051.cdev0, 6/7051.cdev0, 7/7051.cdev0,  
8/7051.cdev0, 9/7051.cdev0, 10/7051.cdev0, 11/7051.cdev0, 12/7051.cdev0, 13/7051.cdev0, 14/7051.cdev0, 15/7051.cdev0
```

```
status =
```

```
rectime=1394164812,varattr=,jobs=7051.cdev0,state=free,netload=1126540823,gres=,loadave=16.07,ncpus=16,physmem=6578766  
0kb,availmem=131292528kb,totmem=133945092kb,idletime=149109,nusers=1,nsessions=1,sessions=24874,uname=Linux csnd03  
2.6.32-220.4.2.el6.x86_64 #1 SMP Mon Feb 6 16:39:28 EST 2012 x86_64,opsys=linux
```

```
mom_service_port = 15002
```

```
mom_manager_port = 15003
```

```
csnd04
```

```
state = job-exclusive
```

```
np = 16
```

```
properties = CPU,rch,edu
```

```
ntype = cluster
```

```
jobs = 0/7051.cdev0, 1/7051.cdev0, 2/7051.cdev0, 3/7051.cdev0, 4/7051.cdev0, 5/7051.cdev0, 6/7051.cdev0, 7/7051.cdev0,  
8/7051.cdev0, 9/7051.cdev0, 10/7051.cdev0, 11/7051.cdev0, 12/7051.cdev0, 13/7051.cdev0, 14/7051.cdev0, 15/7051.cdev0
```

```
status =
```

```
rectime=1394164805,varattr=,jobs=7051.cdev0,state=free,netload=1166074960,gres=,loadave=16.26,ncpus=16,physmem=6578766  
0kb,availmem=131275400kb,totmem=133945092kb,idletime=149100,nusers=1,nsessions=1,sessions=23347,uname=Linux csnd04  
2.6.32-220.4.2.el6.x86_64 #1 SMP Mon Feb 6 16:39:28 EST 2012 x86_64,opsys=linux
```

```
mom_service_port = 15002
```

```
mom_manager_port = 15003
```

# 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:

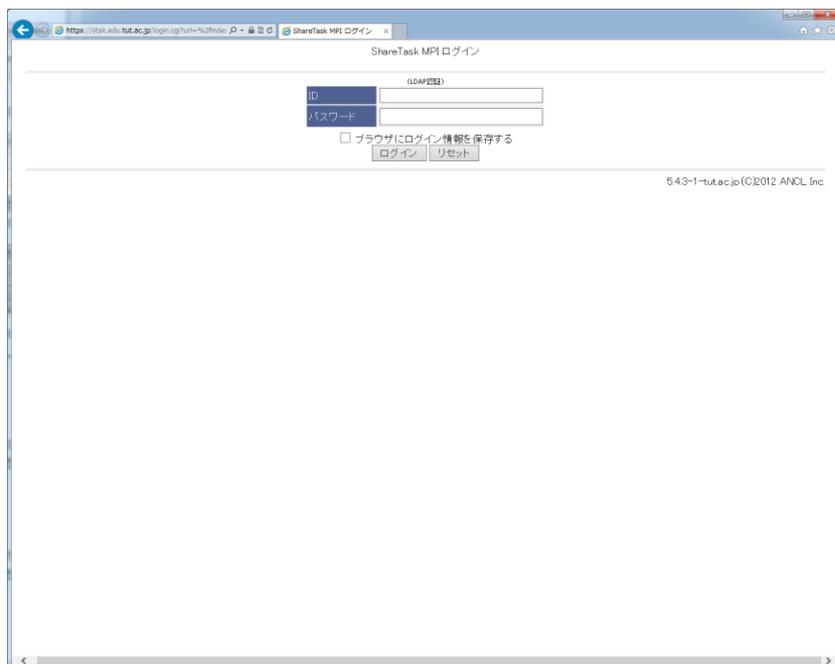
- ジョブ実行方法を参照

<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。



ログイン前



ログイン後

# ソフトウェアの利用方法(3): WEB UIからの実行方法

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。

構造解析		
ANSYS Multiphysics *	145	マルチフィジックス解析ツール
ANSYS CFX	145	汎用熱流体解析ソフトウェア
ANSYS LS-DYNA	145	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GUI・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
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第一原理量子シミュレーター
計算化学		
Gaussian *	09 Rev.C01	Electronic structure program
NWChem *	6.1.1	A comprehensive and scalable open-source solution for large scale molecular simulation
GAMESS *	2012.F2	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

使用したいソフトウェア名をクリック。

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 ようこそ so010さん [LOGOUT]

## Gaussian

◎ジョブの実行に必要な情報を入力してください

ジョブ名 (簡単な名前をつける)	<input type="text"/>	入力ファイルアップロード * <b>選択必須*</b> (最大10個まで)
バージョン/アプリケーション	gaussian-09C.01 * <b>選択必須*</b>	参照... * <b>必須*</b>
キュー	TUT-eduq * <b>選択必須*</b>	参照... * <b>必須*</b>
並列度 (ノード数 × コア数)	入力ファイルの <b>%%ProcShared</b> あるいは <b>%%Proc</b> の値を自動反映	参照... * <b>必須*</b>
追加オプション	通常は入力不要 %%09 <ファイル名> <追加オプション> <***>は自動的に置換記述されます	参照... * <b>必須*</b>
コメント (目的、パラメータ等を自由形式で記述)	<input type="text"/>	参照... * <b>必須*</b>
メールによるお知らせ	<input type="checkbox"/> 開始時 <input type="checkbox"/> 正常終了時 <input type="checkbox"/> 異常終了時	参照... * <b>必須*</b>
メール送付先	cbata@adsim.tut.ac.jp	参照... * <b>必須*</b>

◎指定内容を確認したらこのボタンでサブミット >>>

登録 キャンセル キューの混雑状況を見る

5.4.3-1-tut.ac.jp (C)2012 ANCL Inc.

- \* 使用したいソフトウェアのバージョンの指定
- \* サブミットしたいキューの指定
- \* 追加オプションの指定
- \* インputファイルの指定

を行い、「登録」をクリックすることでジョブが登録・実行されます。詳細は同ページヘルプをご覧ください。

# ソフトウェアの利用方法(3): WEB UIからの計算結果のダウンロード

The image shows two screenshots of the ShareTask MPI web UI. The left screenshot displays a job list table with columns for ID, Job Name, Application Name, Queue, and Status. An arrow points to the 'ID' column, with a text box below it stating: 「ジョブリストページから、当該ジョブのIDをクリック」. The right screenshot shows a detailed view for job ID 2631, including a table of input files and calculation result files, each with a 'Download' button. Below this is a 'Linux Information' table.

ID	ジョブ名	アプリケーション名	キュー	コメント	ユーザー
2631	matlab-R2012a	TUT-eduq	-		so010
2630	snobar-12-pmemd-parallel	TUT-eduq	-		
2629	conflex-7-serbi	TUT-eduq	-		
2628	matlab-R2012a	TUT-eduq	-		
2627	abseqe-612	TUT-eduq	-		
2626	isdyna-14.5	TUT-eduq	-		
2625	fluent-14.5-parallel	TUT-rchq	-		
2624	cfr-14.5-cfdflow-parallel	TUT-eduq	-		
2623	multiphysics-14.5-parallel	TUT-eduq	-		
2622	abseqe-612	TUT-eduq	-		
2599	shell-serial	TUT-eduq	-		
2597	shell-serial	TUT-rchq	-		
2596	shell-parallel	TUT-rchq	-		
2595	shell-parallel	TUT-eduq	-		
2594	matlab-R2012a	TUT-eduq	-		
2593	matlab-R2012a	TUT-eduq	-		
2592	matlab-R2012a	TUT-eduq	-		
2591	matlab-R2012a	TUT-eduq	-		
2590	conflex-7-serbi	TUT-eduq	-		

nodes	cores	CPU time	CPU time(system)	elapsed time	load average
1	16	00:00:00	N/A	00:00:00	N/A

VM size	VM size(peak)	RSS	paging	lobuf_max	disk use
0.00KB	0.00KB	0.00KB	N/A	N/A	763.01MB

\* ポップアップ画面の「Download」をクリックすることで、結果ファイルをダウンロードすることができます。詳細は同ページヘルプをご覧ください。

# ソフトウェアの利用方法(3): WEB UIからの実行時の注意

ジョブリストページから、  
当該ジョブのIDをクリック

ST\*\*\*\*.shをクリック

ID	ジョブ名	アプリケーション名	キュー	コメント	ユーザー
2631	matlab-R2012a	TUT-eduq	-		so010
2630	snobar-12-pmemd-parallel	TUT-eduq	-		
2629	conflex-7-serial	TUT-eduq	-		
2628	matlab-R2012a	TUT-eduq	-		
2627	absque-612	TUT-eduq	-		
2626	lsdyna-14.5	TUT-eduq	-		
2625	fluent-14.5-parallel	TUT-rchq	-		
2624	cfx-14.5-cfdview-parallel	TUT-eduq	-		
2623	multiPhysics-14.5-parallel	TUT-eduq	-		
2600	absque-612	TUT-eduq	-		
2599	absque-612	TUT-eduq	-		
2598	shell-serial	TUT-eduq	-		
2597	shell-serial	TUT-rchq	-		
2596	shell-parallel	TUT-rchq	-		
2595	shell-parallel	TUT-eduq	-		
2594	matlab-R2012a	TUT-eduq	-		
2593	matlab-R2012a	TUT-eduq	-		
2592	matlab-R2012a	TUT-eduq	-		
2591	matlab-R2012a	TUT-eduq	-		
2590	conflex-7-serial	TUT-eduq	-		

nodes	cores	CPU time	CPU time(system)	elapsed time	load average
1	16	00:00:00	N/A	00:00:00	N/A

VM size	VM size(peak)	RSS	paging	lobuf_max	disk use
0.00KB	0.00KB	0.00KB	N/A	N/A	763.01MB

- \* 実行スクリプトファイルは「ST\*\*\*\*.sh」で作られ利用されます。
- \* ジョブ登録後、ジョブリストページから、実行スクリプトファイル内容が確認できますので、正しく実行されているか必ずご確認ください。

# 今後の講習会予定

---

- HPC技術者講習会:GPGPU編
- HPC技術者講習会:MPI編 **本日午後**
- 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>