

## 高速計算サービスについて

総合情報基盤センター 准教授 布村 紀男

### 1. はじめに

2011 年の 2 月の新システム更新に伴い、高速計算機が廃止されました。その代替えとしてネットワーク経由での全国共同利用施設の計算資源利用へ移行にすることとなりました。現在、京都大学のスーパーコンピュータシステムの機関利用で、高速計算サービスを提供しています。本稿では機関利用システムの概要と使い方を紹介します。

### 2. 仕様

#### (1) ハードウェア

Thin SMP システム 4 ノード  
(16 コア メモリ 32GB) × 4 富士通 HX600

#### (2) ファイルシステム

- ・ホームディレクトリ
- 使用可能容量は各自 30GB
- ・大容量ディスク /LARGEH

計算結果の一時ファイルや Gaussian のスクラッチファイル保存場所として利用可能です。富山大学が機関契約している利用可能容量 4TB は 6 つの領域に等分割されています。バックアップ領域は、/LARGEHT01,T03,T05 です。

/LARGEHS00/グループ名 (SAS: 16GB/s)  
/LARGEHS02/グループ名 (SAS: 16GB/s)  
/LARGEHT04/グループ名 (SATA: 5GB/s)  
/LARGEHT01/グループ名 (SATA: 5GB/s)  
/LARGEHT03/グループ名 (SATA: 5GB/s)  
/LARGEHT05/グループ名 (SATA: 5GB/s)

#### (3) ソフトウェア

基本ソフトウェアでは、RedHat EL 4.6 が採用され、次のコンパイラ、ライブラリが利用できます。

- ・ Fujitsu Compiler + SSLII + NAG + IMSL
- ・ Intel Compiler + MKL
- ・ PGI Compiler + ACML

### 3. 申請について

申請は、富山大学総合基盤センター（以下 センター）で受付けた後、取りまとめて京都大学に申請しています。京都大学から発行される大型計算機

システム利用承認書に登録番号、初期パスワード等が記載されています。なお、富山大学に割り当てられているグループ名は利用承認書には記載されていないのでセンターにお問い合わせください。

### 4. 利用について

#### ・ NQS バッチシステム

NQS によりジョブスケジュールが管理されています。小規模用エンタリーコースのキュー名「eh」では CPU 制限は 1 時間です。富山大学に割り当てられているキュー名はグループ名と同じです。このキュー名での CPU 利用は、最大 336 時間に制限されています。NQS バッチジョブは、NQS スクリプトを作成して利用します。サンプルスクリプトは /thin/local/samples/nqs/ に置かれています。ジョブの投入は、qsub コマンドで行います。

#### \$ qsub NQS スクリプト名

一時ファイル等で、大容量ディスクを使用する場合は、/LARGEHS00/グループ名/もしくは /LARGEHT02/グループ名/以下にホームディレクトリ(ユーザ名)を作成し、利用できます。なお、ディスク quota が 4TB/6 のため、不要ファイルは溜め込まず必ず削除をお願いいたします。

#### ・ Gaussian09 利用

汎用量子化学計算ソフトウェア Gaussian09 は subg09 コマンドで実行できます。

\$ subg09 queue\_name input\_file [-sdir dir]

Gaussian のスクラッチファイルのディレクトリは、オプション -sdir で指定します。大容量ディスク /LARGEHS00, S02 の領域の指定も可能です。

詳細な利用方法は、京都大学の Web 情報をご覧ください。 <http://web.kudpc.kyoto-u.ac.jp/hpc/>

### 5. おわりに

京都大学ではシステムのリプレイスが行われ、2012 年度 5 月より新システムが稼働する予定となっています。現行システムの 4~5 倍の性能向上が見込まれています。どうぞご利用ください。