基礎生物学分野で申請されたユーザー向け情報

- パッケージプログラム一覧（基礎生物学）
- 分子生物学用データベース一覧
- FAQ（基礎生物学）

3TBメモリマシンの使い方

- キュー名が異なります（キュー名：HB）
- 指定できる最大メモリ量は、1.5TB または 3TB です
- （必要なメモリ量が1Tb以下の場合はHBキューでなく、下記の設定で実行ください）
  - 256Gb以下に収まる場合は、ncpus=64 (128Gbメモリ）または ncpus=128(256Gbメモリ）を指定
  - 256Gb〜1Tbに収まる場合は、 jobtype=largemem を使うこと
- ■ リソース指定の書き方
- 1.5Tbメモリを使う（最大同時実行2ジョブ）

```
#PBS -l select=1:ncpus=48:mpiprocs=1:ompthreads=48
```

- 3Tbメモリを使う（同時利用1ジョブ）

```
#PBS -l select=1:ncpus=96:mpiprocs=1:ompthreads=96
```

- ■ ジョブの投入方法
- **必ず -q HB と付けてキューを指定する**

```
jsub -q HB jobfile.sh
```

- ■ 消費点数
- 1.5TBメモリ（48ncpus）使用 ： 80点/時間
- 3TBメモリ（96ncpus）使用 ： 160点/時間
- **点数の例：**
- Trinity-rnaseq クエリDNA配列：96,706件、クエリファイルサイズ183MB
- 48 ncpus 指定
- 所要時間:11:07:24
- 消費点数：889点

```
$ head trinity.sh
 #PBS -l select=1:ncpus=48:mpiprocs=1:ompthreads=48
 #PBS -l walltime=12:00:00
 ...
```

- 実行コマンド

```
$ jsub -q HB trinity.sh
```

インストール済み分子生物学用アプリケーションの使い方

modules で管理されているもの

- 主なアプリケーションは「modules」で管理されています。
- 最初に必ず設定の読み込みを実行してください

source /apl/bio/etc/bio.sh

- 利用できるアプリケーションの一覧を表示する

module avail

- ジョブスクリプト内での記述方法

```
#!/bin/bash
#PBS -l select=1:ncpus=12:mpiprocs=1:ompthreads=12
#PBS -l walltime=4:00:00
source /apl/bio/etc/bio.sh
module load diamond
cd ${PBS_O_WORKDIR}
diamond blastp --db spo.dmnd --out sce.tab --outfmt 6 --query sce_prot.fasta
```

apptainer(singularity) コンテナが用意されているもの

- 一部のアプリケーションはapptainerのコンテナで提供しています
- コンテナの在処：/apl/bio/container/(アプリケーション名)
- コマンドの書き方

apptainer exec (options..) コンテナ名　コマンド...

- 例：（-B オプションで現在のディレクトリをコンテナ内の同じ場所にマウントしています）

apptainer exec -B ${PWD} container_name.sif command --option...

利用講習会資料 (2025)

1. センター概要、申請などについて (readme.pdf)
2. 分子生物学用データベースとアプリケーションについて (bioapp.pdf)
3. ジョブ管理システムの使い方（前編）　(RCCS_2025j.pdf)
4. ジョブ管理システムの使い方（後編）　(RCCSjsub2.pdf)

添付	サイズ
概要	682.61 KB
データベース紹介とアプリケーションの利用方法	456.65 KB
ジョブ管理システムの使い方（前編）	503.79 KB
ジョブ管理システムの使い方（後編）	449.65 KB