jsub (Open OnDemand)

新規ジョブの投入

新規ジョブ投入は以下の3つのステップで行います:

- 1. データ準備:作業ディレクトリの設定、入力ファイルの準備
- 2. スクリプト・リソース設定:実行スクリプトの選択・編集、計算リソースの設定
- 3. 投入確認: 設定内容の確認とジョブ投入

各ステップは画面上部のタブで切り替えることができます。

データ準備					
作業ディレクト	リの設定				
作業ディレクトリを	選択		×		
← → ↑ △ ~/ccood_job/copy				Ċ	
Q フォルダを検索…					
	samples	>_ sample-module.sh	>sample.csh	►_ sample.sh	test0397.com
1個のフォルダ, 4個のファイル	,				
				キャンセノ	ル copy を選択

- 「作業ディレクトリ」欄に直接パスを入力するか、「参照」ボタンをクリックしてディレクトリを選択します
- 新しいディレクトリを作成する場合は、 📴 ボタンをクリックして名前を入力し、「作成」ボタンを押します

| ディスクリソースの確認

「ディスクリソース」パネルでは、利用可能なディスク容量と使用量を確認できます。「更新」ボタンをクリックすると最新情報に更新 されます。

ファイル一覧の確認

「ファイル一覧」タブでは、作業ディレクトリ内のファイルとフォルダを確認できます。「一覧を更新」ボタンをクリックすると内容が 更新されます。

| ファイルのアップロード

ドラッグ&ドロップでアップロード
ファイルをドラッグ&ドロップするか、クリックして選択してください(最大500MB)
「ファイルアップロード」タブでは、ローカルコンピュータからサーバーにファイルをアップロードできます。

- 1. 破線で囲まれた領域にファイルをドラッグ&ドロップするか、クリックしてファイルを選択します
- 2. アップロードが完了すると、自動的にファイル一覧に追加されます

ファイルのコピー

「ファイルコピー」タブでは、サーバー上の別の場所からファイルをコピーできます。

コピー先:										
~/ccood_job										
選択したファイル/フォルダをコピーする先のパスを指定										
✓ フォルダ内のコンテンツも再帰的にコピー										
□ 既存のファイルを上書き										
□ コピーを実行										
○ 更新 ① ホーム 〔↑ 上へ〕										
現在の場所: /apl										
ショートカット	ファイル									
ホーム	フィルタ									
アプリケーション		\Box	\Box	\Box						
	abcluster	ABINIT-MP	alphafold	amber	аосс					
		\Box	\Box	\Box	\Box					
	aocl	apptainer	autoconf	autodock	autodock-gpu					
	\Box			\Box	\Box					
	autodock-vina	bio	boost	censo	cmake					

- 1. 左側のパネルをクリックしたり、フォルダをダブルクリックしてコピー元のディレクトリに移動します
- 2. コピーしたいファイルやフォルダを選択します
- 3. 「コピー先」に宛先パスを入力するか、「参照」ボタンで選択します
- 4. 必要に応じてオプション(再帰的コピー、上書き)を選択します
- 5. 「コピーを実行」ボタンをクリックします



1. 「実行スクリプト」欄に直接パスを入力するか、「参照」ボタンをクリックしてスクリプトファイルを選択します

2. 新しいスクリプトを作成する場合は、「新規」ボタンをクリックします

■ スクリプトエディタの使用

- 1. 「エディタで編集」ボタンをクリックしてスクリプトエディタを開きます
- 2. スクリプトを編集し、「保存」ボタンをクリックして変更を保存します
- 3. 「更新」ボタンをクリックするとスクリプト内容が再読み込みされます

計算リソースの設定

スクリプトのリソース設定を右フォームで行えます:

- ジョブタイプ:標準計算、GPU計算、大容量メモリから選択
- **ノード数**: 使用するノード数
- CPUコア数: 使用するCPUコア数(または「コアプリセット」ボタンから選択)
- GPU数: GPU計算の場合、使用するGPU数
- 最大実行時間: ジョブの最大実行時間(時間:分:秒)
- MPI並列数: MPI並列プロセス数
- OpenMP並列数: OpenMP並列スレッド数

■ 追加オプション

「オプション」パネルを展開すると、以下の設定が可能です:

- 標準出力・エラー出力をマージ: 出力ファイルを一つにまとめる設定
- 再実行なし: システム障害時などにジョブを再実行しない設定

■ スクリプトとの連携

- スクリプトから設定を読み込む: スクリプト内のPBSディレクティブから設定を自動読み込み
- スクリプトに設定を適用:現在の設定をスクリプトに反映

投入確認と実行

オプション

■ ジョブ名の設定

「ジョブ名」欄にジョブの識別名を入力します。空欄の場合はスクリプト名が使用されます。

■ メール通知設定

- 1. 「メール通知を使用」にチェックを入れます
- 2. 通知先のメールアドレスを入力します (デフォルトはRCCSに登録されているアドレス)
- 3. 通知タイミング (開始時、終了時、異常終了時)を選択します

設定内容の確認

「投入確認」タブでは、これまでに設定した内容が表示されます。

確認項目:

- データと作業環境(作業ディレクトリ、実行スクリプト、ジョブ名)
- リソース設定(ジョブタイプ、ノード数、CPUコア数、GPU数、実行時間など)
- 通知設定(出力マージ、メール通知)

ジョブの投入

- 1. 設定内容を確認します
- 2. 問題がなければ「ジョブを投入」ボタンをクリックします
- 3. 投入成功時には確認メッセージが表示され、ジョブIDが発行されます
- 4. 「ジョブー覧」画面に自動的に移動し、投入したジョブが表示されます