

GRRM 実行サンプルスクリプトファイルの置き場所

Primergy RX300/CX2550 用と UV2000 用のサンプルスクリプトファイルをそれぞれ `ccfep:/local/apl/pg/GRRM14/samples` および `ccfep:/local/apl/uv/GRRM14/samples` 以下に置いてあります。サブディレクトリーに `sample1`、`sample2`、`sample3` があり、それぞれ簡易マニュアルの例 1、例 2、例 3 に対応しています。

Primergy 版 GRRM 実行サンプルスクリプトファイル `sample2.csh` の内容

```
1: #!/bin/csh -f
2: #PBS -l select=ncpus=16:mpiprocs=1:ompthreads=16:jobtype=large
3: #PBS -l walltime=25:00:00
4:
5: if ($?PBS_O_WORKDIR) then
6:   cd ${PBS_O_WORKDIR}
7: endif
8:
9: set GRRMinp=sample2
10: setenv WORK /work/users/${LOGNAME}/grrm.$$
11: if ( ! -d ${WORK} ) mkdir ${WORK}
12: setenv GAUSS_SCRDIR ${WORK}
13:
14: setenv LANG C
15: source /local/apl/pg/g09d01/g09/bsd/g09.login
16: setenv subgau g09grrm
17: setenv subchk formchk
18: setenv subgrr GRRM.out
19:
20: set path=(/local/apl/pg/GRRM14 $path)
21:
22: GRRMp ${GRRMinp} -p8 -h24
```

各行の説明

1 行目は `csh` のスクリプトの定型句です。

2 行目は必要な CPU 数を記述しています。`ncpu` は GRRM で使う CPU 数です。`mpiprocs` は 1 を指定します。`ompthreads` は `ncpu` で指定したものと同じ数を指定します。`jobtype` は `large` もしくは `avx2` を指定します。

3 行目は GRRM の計算に必要な時間を指定します。どうしても時間が見積れない場合は多めに記述します。時間が長い場合は、他のジョブに追い越される場合や直ぐにジョブが実行されない場合があります。

5～7 行目は `jsub` を実行したディレクトリーに移動するための定型句です。

9 行目は GRRM のマニュアルにあるように入力ファイルの `basename` です。絶対パス、相対パスで記述

しないでください (RCCS 固有の制限事項)。

10 行目は RCCS 固有の設定で、ワークディレクトリーを指定します。他のジョブと (なるべく) 衝突しないように、プロセス番号 (\$\$) をディレクトリー名に含めています。

11~12 行目は、Gaussian 用のスクラッチディレクトリーをワークディレクトリーに設定します。

14 行目はシステムのメッセージを英語にするためのものです。

15 行目は使用する Gaussian 09 の設定を読み込ませています。

16-18 行目は GRRM で必要な環境変数です。RCCS では subgau に g09grm を指定します。

20 行目は GRRMp、GRRM.out をパスに通すための設定です。

22 行目は GRRMp の実行させるためのものです。この GRRMp は本物の GRRMp ではなく、内部で本物の GRRMp を呼び出します。

ジョブの投入の仕方

(Primergy RX300/CX2550 で計算する場合)

```
jsub -q PF sample2.csh
```

(UV2000 で計算する場合)

```
jsub -q PS sample2.csh
```

RCCS で GRRM を使う上での注意点

1. /local/apl/pg/GRRM14 以下にある実行ファイルは本物の GRRM のプログラムではありません。他所へのコピーは許諾されません。
2. GRRM はファイル I/O が多いため、NFS 上のディレクトリーでは実行できないようにしています。PRIMERGY では NFS を使用していないため、どのディレクトリーでも実行できますが、UV2000 では/home が NFS で運用されているため、/pan_week を使う必要があります。このディレクトリーは 8 週間で消去されますので、ご注意ください。