

# 計算機利用の手引き

最終更新: 2025/7/3

以前のマニュアルは[こちら](#)にあります。

- クイックスタートガイド
- FAQ (一般・分子科学)
- 利用上の注意点

- 
- システムの全体像

- 
- ジョブの投入方法(jsub)
  - Gaussian ジョブの投入方法(g16sub, g09sub)
  - ORCA ジョブの投入方法(osub)
  - ジョブの状況確認(jobinfo)
  - ジョブの削除(jdel)

- 
- jobtype、キュー構成、キュー係数、CPU点数
  - ディスク領域について

- 
- アプリケーションのビルド(コンパイラとライブラリ)
  - 並列プログラムのビルドと実行
  - Environment Modules の利用
  - Apptainer(Singularity)コンテナの利用

- 
- RCCS固有コマンド
    - CPU 点数やディスクの使用状況確認(showlim)
    - 実行済ジョブの情報取得(joblog)
    - ジョブの待ち時間予測(waitest)
    - 次回メンテナンスまでの時間を表示する(next-maintenance)
    - ジョブの保留(ホールド; jhold)と保留解除(リリース; jrls)
    - 計算ノード上のファイル操作(remsh)

- 
- グループメンバーの追加、削除 => [メンバー管理申請](#)
  - CPU点数やディスク容量の追加 => [資源追加申請](#)
  - 海外への出張中にアクセスしたい => [日本国外からのSSH接続申請](#)
  - メンバーのリソース制限をしたい => [リソース制限\(要ログイン\)](#)
    - 代表者のみが実行可能です。CPU 数, GPU 数, CPU 点数, ディスク使用量を制限できます

- 既知の問題
- Tips
  - コマンドライン操作について
  - jsub ヘッダー(select)のサンプル
  - サンプルジョブの実行
  - Python, Ruby 環境について
  - パッケージプログラム一覧(分子科学)
  - アプリケーションライブラリの構築方法