

### 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

🔄 📁 📄 🍷 ☰

🔍

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

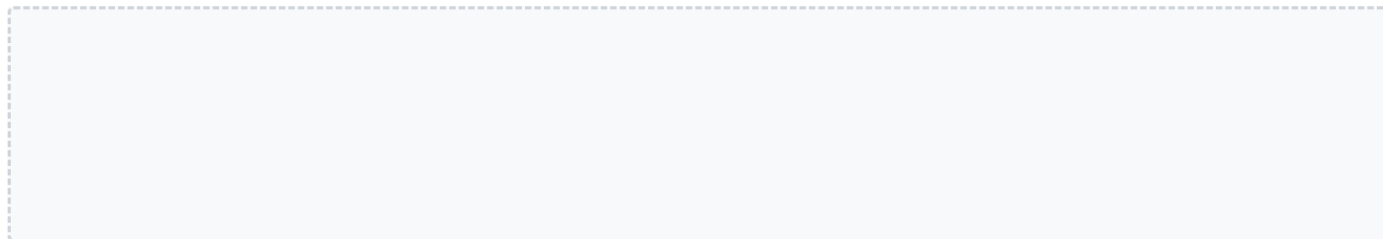
「ディスクリソース」パネルでは、利用可能なディスク容量と使用量を確認できます。「更新」ボタンをクリックすると最新

#### 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、一覧が更新されます。

## 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

参照

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

ホーム

上へ

現在の場所: /apl

ショートカット

ホーム

アプリケーション

ファイル

フィルタ...



abcluster



ABINIT-MP



alphafold



amber



aocc



aocl



aptainer



autoconf



autodock



autodock-gpu



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

## スクリプト・リソース設定

### 実行スクリプトの選択・編集

## スクリプト内容

実行スクリプト

~/ccood\_job/test/

□ 参照

+ 新規

実行するスクリプトファイルのパス

```
#!/bin/sh
#PBS -l select=1:ncpus=18:mpiprocs=1:ompthreads=18
#PBS -l walltime=00:30:00

if [ ! -z "${PBS_O_WORKDIR}" ]; then
    cd "${PBS_O_WORKDIR}"
    WORK=/lwork/users/${USER}/${PBS_JOBID}/gaussian
else
    WORK=/gwork/users/${USER}/tmp.$$
fi

if [ ! -d ${WORK} ]; then
    mkdir ${WORK}
```

✎ エディタで編集

↻ 更新

⬆ スクリプトから設定を読み込む

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

? ????????????

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

? ???????

「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」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。

? ???????

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. 「ジョブ一覧」画面に自動的に移動し、投入したジョブが表示されます