

GRRM 実行サンプルスクリプトファイルの置き場所

Primergy RX300 用と UV1000 用のサンプルスクリプトファイルをそれぞれ ccfep1:/local/apl/pg/GRRM11/samples および ccfep1:/local/apl/uv/GRRM11/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=small
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:
12: setenv LANG C
13: source /local/apl/pg/g09b01/g09/bsd/g09.login
14: setenv subgau g09.csh
15: setenv subchk formchk
16: setenv subgrr GRRM.out
17:
18: set path=(/local/apl/pg/GRRM11 $path)
19:
20: 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 1cpu あたり 4 GB までのメモリー使用量で収まるなら small、8GB までなら large 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（センター固有の制限事項）。

10 行目はセンター固有の設定で、ワークディレクトリーを指定します。指定がない場合は **GRRMp** は直ちに異常終了します。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。確実に衝突しないようにするためにはディレクトリー名が重複しないように設定します。

12 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。

13 行目は使用する **Gaussian 09** の設定を読み込ませています。**g09b01** 以外には **g09c01** を指定できます。

14 行目は **GRRM** で必要な環境変数です。センターでは **g09.csh** を指定します。

15-16 行目は **GRRM** で必要な環境変数です。

18 行目は **g09.csh**、**GRRMp**、**GRRM.out** をパスに通すための設定です。

20 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。処理内容は以下のことを行っています。

1. ジョブ投入ディレクトリー毎すべて **work** ディレクトリーにコピーします。
2. コピー先の **work** ディレクトリーで本物の **GRRMp**, **formchk**, **GRRM.out** を実行します。
3. ジョブ投入ディレクトリーとの同期を取るためにジョブ投入ディレクトリーに ***_STOP.rrm** というファイルがあれば、**work** ディレクトリーにコピーします。その後、**work** ディレクトリーをジョブ投入ディレクトリーに同期させます。この同期の間隔は 30 秒です。
4. ジョブ終了時に最後の同期を行います。

ジョブの投入の仕方

(Primergy RX300 で計算する場合)

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

(UV1000 で計算する場合)

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

センターで **GRRM** を使う上での注意点

1. **/local/apl/pg/GRRM11** 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ので、よそにコピーして利用しても何も計算できません。
2. **work** ディレクトリーとジョブ投入ディレクトリーの間で同期を取るため、ジョブの実行中にジョブ投入ディレクトリーに変更を加えても、***_STOP.rrm** というファイル以外は全て **work** ディレクトリーの内容で上書きされます。新規にファイルを作っても消去されます。