

GRRMの実行方法（東北大学サイバーサイエンスセンター編）

1. 利用登録

センターの計算機をご利用頂くには利用登録が必要です。詳細は以下のHPをご参照下さい。

【大規模科学計算システム 利用申請からログインまで】

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/first-use/>

2. ログインサーバを経由したフロントエンドサーバへのログイン

ローカル端末から公開鍵暗号方式を利用したSSH接続でログインサーバを経由してフロントエンドサーバにログインします。

ログインサーバホスト名 : `login.cc.tohoku.ac.jp`

フロントエンドサーバホスト名 : `front`

ログインID : アルファベット1桁+数字5桁の利用者番号

ログイン認証 : 公開鍵暗号方式

ログインについての詳細は以下のHPをご参照下さい

【SSHログインのための暗号鍵ペアの作成】

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/first-use/#toc4>

【ログインサーバを経由したフロントエンドサーバへのログイン】

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/first-use/#toc5>

3. GRRM実行バッチリクエストファイルの作成

GRRMはAOBA-B上で実行します。GRRMプログラムを実行するためのスクリプトファイルの作成例です。以下の例ではファイル名をexample.shとしてテキストファイルで保存します。

(example.sh ここから)

```
#!/bin/sh
#PBS -q lx -b 1          (AOBA-B 1ノードを利用することを指定)
#PBS -N grrm-test       (リクエスト名を指定。指定しない場合はリクエスト番号)
#PBS -l elapstim_req=01:10:00 (実行時間要求を1時間10分で指定)
source /usr/ap/etc/GRRM17/config.sh (GRRM17の環境変数ファイルを指定)
cd $PBS_O_WORKDIR      (リクエストを投入したディレクトリに移動)
GRRMp test -p16 -h1
                        (GRRMを起動。この例ではtest.comファイルを実行し、GRRMのJOB並列数が16、
                        計算時間の上限値が1時間になる)
```

(example.sh ここまで)

GRRMで利用できる並列コンピュータの利用形態、利用可能並列数、メモリ量は下表の通りです。

利用形態	利用可能並列数	最大経過時間	メモリ容量	-qオプション	-bオプション
共有	128コア	既定値/最大値 72 時間/720 時間	256GB	lx	1 (1ノード実行)

詳細は以下のHPをご参照下さい。

【サブシステム AOBA-B】

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/lx406rz-2/>

【ジョブの実行方法】

のジョブを最初からやり直すときは、作業ディレクトリから識別子が.logや.rrmの全ファイルを消去してから（あるいは新しいディレクトリを作成して）行う必要があります。

6. 実行結果の確認、ファイルの転送

reqstatコマンドで実行したリクエストが表示されなければ実行が終了しています。実行結果のファイルはリクエストを投入したディレクトリに作成されます。テキストエディタでファイルの内容を確認するか、WinSCPなどのソフトでローカルの Windowsマシンなどにダウンロードして下さい。

7. 参考

GRRMについては以下のHPをご参照下さい。

【NPO法人 量子化学探索研究所】

<https://iqce.jp/>

【化学反応経路自動探索】

<https://iqce.jp/GRRM/>

当センターの利用については以下のHPをご参照下さい。

【東北大学サイバーサイエンスセンター 大規模科学計算システムHP】

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/>

【アプリケーションサービス/Gaussian16】

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/software-service/#toc3>