
富岳商用ソフトウェア Cradle CFD scFLOW 利用手順書

2023 年 3 月

版数	更新	作成
第 2.0 版	試行利用に対応	2023/3/31

目次

1. まえがき	1
2. ライセンス登録内容の変更について	2
3. Cradle CFD scFLOW メッシャー実行方法	2
3.1. 実行時の環境設定について	2
4. Cradle CFD scFLOW ソルバー実行方法	4
4.1. 実行時の環境設定について	5
5. Cradle CFD scFLOW の環境変更について	6
6. 問合せ方法	6
6.1. 試行利用中の問合せについて	7

1. まえがき

本書の目的

本書では、理化学研究所 計算科学研究センター (R-CCS)がスーパーコンピューター「富岳」上に整備した Cradle CFD scFLOW の利用方法を説明します。

- 「富岳」の一般的な利用方法については、富岳ポータル内の各種マニュアルを参照してください
- Cradle CFD scFLOW の一般的な利用方法については、Cradle CFD scFLOW のマニュアルを参照してください

前提条件

利用者が「利用開始までの流れ」に従い、Cradle CFD scFLOW のライセンス契約締結などの手続きを実施し、ソフトウェア利用環境設定完了通知を受領しているものとします。

または、利用者が「試行利用開始までの流れ」に従い Cradle CFD scFLOW を期間限定の試行利用する場合も本書の対象となりますが、一部手順が異なります。

「富岳」上に整備された商用ソフトウェアの利用にあたっては、ソフトウェア・ライセンスの管理（動作確認）やソフトウェア動作に関する問合せ時の調査を、R-CCS および協力機関がソフトウェアベンダーと協力して実施します。そのため、ライセンス情報、問合せ内容などを R-CCS および協力機関、ソフトウェアベンダー間で相互に共有する場合があります。あらかじめご了承ください。

また、Cradle CFD scFLOW を「富岳」で実行するための前処理等は既に Windows 機で実行されているものとします。

2. ライセンス登録内容の変更について

登録済みのライセンスに関して、利用者の変更（追加・削除）やライセンスファイルの変更などが発生した場合、富岳サポート宛に連絡が必要となります。詳細な手順については「富岳商用ソフトウェア Cradle CFD scFLOW 利用開始までの流れ」を参照してください。

3. Cradle CFD scFLOW メッシャー実行方法

メッシャー実行時のジョブ実行用スクリプト例を以下に示します。作業環境に合わせて適宜修正してください。**赤字箇所**については後述の説明文を参照してください。本ジョブは計算ノードに投入します。

```
#!/bin/bash
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=1"
#PJM -L "elapsed=00:10:00"
#PJM --mpi "proc=5"
#PJM -S
#PJM -g <groupname>
#PJM -x PJM_LLIO_GFSCACHE=/vol0004

module use /vol0004/apps/iscv/scFLOW/modulefiles
module load scFLOW

export MSC_LICENSE_FILE=ライセンスサーバーのポート番号@ライセンスサーバーの IP アドレス

/home/system/tool/dir_transfer ${MESHERPATH}
scflowcomb 入力ファイル名.cmb 4
/home/system/tool/dir_transfer -p ${MESHERPATH}
```

本ジョブスクリプトは、入力ファイル(拡張子.cmb)が格納されたディレクトリ直下からジョブ投入することを前提としています。

3.1. 実行時の環境設定について

- #PJM -x PJM_LLIO_GFSCACHE=/vol0004

ジョブ投入時に指定する環境変数 PJM_LLIO_GFSCACHE に必ず /vol0004 を指定してください。

- **module コマンド**
環境変数を設定するために利用します。
- **module use**
modulefile の格納場所を指定します。変更しないでください。

- **module load *modulefile***
modulefile に定義された環境変数群をセットします。

```
module load scFLOW
```

を指定した場合、「富岳」上にインストールされている最新のバージョンを利用します。

重要： **module load** コマンドで設定される環境変数には実行時パラメーターが含まれている場合があります。実行時パラメーターを指定する場合、必ず **module load** コマンドより後に指定してください。

特定のバージョンを利用する場合、*modulefile* を変更します。

例：v2022_Patch02_Jan2022 版を使用する場合

```
module load scFLOW/v2022_Patch02_Jan2022
```

- **module avail**
利用可能な *modulefile* の一覧を表示します。

```
module use /vol0004/apps/iscv/scFLOW/modulefiles  
module avail scFLOW
```

- **module show *modulefile***
module コマンドによって設定される内容を表示します。

例：scFLOW 指定時に設定される内容を表示

```
module use /vol0004/apps/iscv/scFLOW/modulefiles  
module show scFLOW
```

- **MSC_LICENSE_FILE**

ライセンスサーバーの IP アドレスとポート番号を指定します。富岳サポートから受け取った IP アドレスとポート番号を”ポート番号@IP アドレス”の形式で設定してください。

-
- `/home/system/tool/dir_transfer ${MESHERPATH}`
 - `/home/system/tool/dir_transfer -p ${MESHERPATH}`

Cradle CFD scFLOW で使用するディレクトリを指定します。引数は変更しないでください。dir_transfer については利用手引書 (https://www.fugaku.r-ccs.riken.jp/doc_root/ja/user_guides/use_latest/) を参照してください。

4. Cradle CFD scFLOW ソルバー実行方法

Cradle CFD scFLOW 実行時のジョブ実行用スクリプト例を以下に示します。作業環境に合わせて適宜修正してください。赤字箇所については後述の説明文を参照してください。本ジョブは計算ノードに投入します。

なお、「富岳」計算ノードにおいて動作実績がある最大並列数は、66,000 MPI 並列です。

```
#!/bin/bash
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=1"
#PJM -L "elapsed=00:05:00"
#PJM --mpi "proc=36"
#PJM -S
#PJM -g <groupname>
#PJM -x PJM_LLIO_GFSCACHE=/vol0004

module use /vol0004/apps/isv/scFLOW/modulefiles
module load scFLOW

export MSC_LICENSE_FILE=ライセンスサーバーのポート番号@ライセンスサーバーの IP
アドレス

/home/system/tool/dir_transfer ${SOLVERPATH} ${PMETISLIBPATH} ${CMNLIBPATH}

LFILE=出力ログファイル名
scflowsol -lfilename ${LFILE}.1.0 入力用設定ファイル名.sph 36:1 -stdout-proc ${LFILE}
mv ${LFILE}.1.0 ${LFILE}

/home/system/tool/dir_transfer -p ${SOLVERPATH} ${PMETISLIBPATH}
${CMNLIBPATH}
```

本ジョブスクリプトは、入力用設定ファイル(拡張子.sph)が格納されたディレクトリ直下からジョブ投入することを前提としています。

4.1. 実行時の環境設定について

- #PJM -x PJM_LLIO_GFSCACHE=/vol0004
ジョブ投入時に指定する環境変数 PJM_LLIO_GFSCACHE に必ず /vol0004 を指定してください。
- module コマンド
環境変数を設定するために利用します。
- module use
modulefile の格納場所を指定します。変更しないでください。
- module load **modulefile**
modulefile に定義された環境変数群をセットします。

`module load scFLOW`

を指定した場合、「富岳」上にインストールされている最新のバージョンを利用します。

重要： module load コマンドで設定される環境変数には実行時パラメーターが含まれている場合があります。実行時パラメーターを指定する場合、必ず module load コマンドより後に指定してください。

特定のバージョンを利用する場合、**modulefile** を変更します。

例：v2022_Patch02_Jan2022 版を使用する場合

`module load scFLOW/v2022_Patch02_Jan2022`

➤ module avail

modulefile に指定するキーワードの一覧を表示します。

`module use /vol0004/apps/isy/scFLOW/modulefiles`
`module avail scFLOW`

➤ module show **modulefile**

module コマンドによって設定される内容を表示します。

例：scFLOW 指定時に設定される内容を表示

`module use /vol0004/apps/isy/scFLOW/modulefiles`
`module show scFLOW`

- MSC_LICENSE_FILE

ライセンスサーバーの IP アドレスとポート番号を指定します。富岳サポートから受け取った IP アドレスとポート番号を”ポート番号@IP アドレス”の形式で設定してください。

- `/home/system/tool/dir_transfer ${SOLVERPATH} ${PMETISLIBPATH} ${CMNLIBPATH}`
- `/home/system/tool/dir_transfer -p ${SOLVERPATH} ${PMETISLIBPATH} ${CMNLIBPATH}`

Cradle CFD scFLOW で使用するディレクトリを指定します。引数は変更しないでください。dir_transfer については利用手引書 (https://www.fugaku.r-ccs.riken.jp/doc_root/ja/user_guides/use_latest/) を参照してください。

5. Cradle CFD scFLOW の環境変更について

Cradle CFD scFLOW の環境変更が行われる場合、変更内容と日時が「富岳」利用者ポータルサイトに掲載されます。変更内容を確認し、必要に応じて変更日時までに対応を実施してください。以下に想定される変更内容と、その変更による利用者への影響および対処方法を記します。

- **Cradle CFD scFLOW のバージョンアップ**

module load scFLOW を指定して最新バージョンを使用している場合、変更日時以降実行される Cradle CFD scFLOW のバージョンが新たに導入される最新バージョンに変更されます。現在使用しているバージョンを継続して使用する場合は、scFLOW の部分を scFLOW/製品バージョン に変更してください。

- **Cradle CFD scFLOW の特定バージョンの削除**

削除対象のバージョンを module load で指定している場合、変更日時以降 Cradle CFD scFLOW が利用できなくなります。module load の設定を変更して別のバージョンを使用してください。

6. 問合せ方法

Cradle CFD scFLOW に関する一般的な内容については、ライセンス締結先にお問合せください。その際、「富岳」で利用していることも併せてお伝えください。

「富岳」固有の内容については富岳サポートサイト (<https://fugaku.zendesk.com/hc/ja/requests/new>) にお問合せください。

6.1. 試行利用中の問合せについて

試行利用の場合、問合せ内容に関わらず富岳サポートサイト (<https://fugaku.zendesk.com/hc/ja/requests/new>) にお問合せください。お問合せの際は、問合せ本文に試行利用である旨を記載してください。

なお、問合せ対応に関して、以下の注意事項がありますのでご了承ください。

- 商用アプリケーションの動作に関するお問合せの受付は、新規・継続問合せに関わらず試行利用期間内に限定させていただきます
- 問合せには順次回答しますが、回答が試行利用期間終了後になる可能性があります