

粒子法計算環境説明資料

神戸大学 海事科学研究科
湯浦哲大



計算環境について

インストールすべきソフトウェア(Win10 64bit) :

- Visual Studio 2019 : C++コード実行総合環境 (推奨)
- PuTTY (PuTTYgen) : ペア鍵作成に利用
- WinSCP : TSUBAME3.0へのアップロード等
- Tera Term : 計算実行のためのターミナル
- Rhinoceros 6 : CADデータから三角メッシュ作成
- DualSPHysics v3.1 : 静定状態計算用の水粒子配置作成
- Paraview 4.3.1 : STLファイルからVTKファイルの作成
- Paraview(最新版) : 可視化等



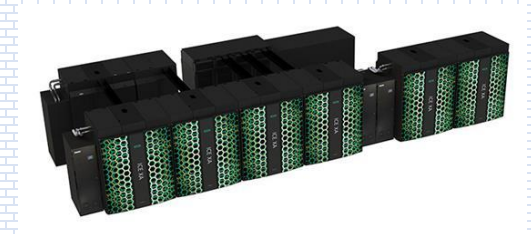
計算環境について

使用するハードウェア：

東京工業大学のGPUスパコンTSUBAME3.0

〈1 計算ノードあたり〉

- CPU 2 基 (14core/ 28 threads)
- Memory 256GiB
- GPU 4 基



詳細はTSUBAME3.0利用の手引き

<https://helpdesk.t3.gsic.titech.ac.jp/manuals/handbook.ja/>

https://www.gsic.titech.ac.jp/kyodou/beginners_course

<https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/index.php/lectures>



計算環境について

通信開始：

- ログインディレクトリ（ホームディレクトリ）
/home/n/XXXX (n: 数字, XXXX: TSUBEMEアカウント)
- 計算ディレクトリ（グループディレクトリ）
/gs/hs0/tgh-20IAK

※ログインディレクトリはグループディレクトリに変更可

（ホームディレクトリ内の.bashrcの書き換え）



計算環境について

- 使用するソフトウェア, アプリケーション:

OS: **SUSE Linux Enterprise Server 12 SP4**

(※TSUBAME3.0利用の手引きには以前のバージョンにて記載している)

CUDAライブラリ: **cuda/10.2.89**

OpenMPI: **openmpi/3.1.4-opa10.10**

(※本年度より, OSのアップグレードのため変更)



計算環境について

使用する計算コード（MPS）：

●ソースファイル

- main.cu
- karnel.cu： カーネル関数他
- RdD.cu
- Wrt.cu

●ヘッダーファイル

- mps.h： クラス定義
- constantvalue.h
- flg.h
- type.h

●メイクファイル

- makefile

●リソースファイル

- initial.txt： 初期粒子配置
- physical.txt： パラメータ

●シェルスクリプト

- gcc.sh： 計算機の設定
- Job_tsubame.sh



計算環境について

使用する計算コード（VS2019）：

- `binary_to_ascii.cpp`： stlファイルをtxtファイルに変換
- `dual.cpp`： 静定状態計算用初期粒子配置ファイル作成
- `mpi.cpp`： 本計算用初期粒子配置ファイル作成

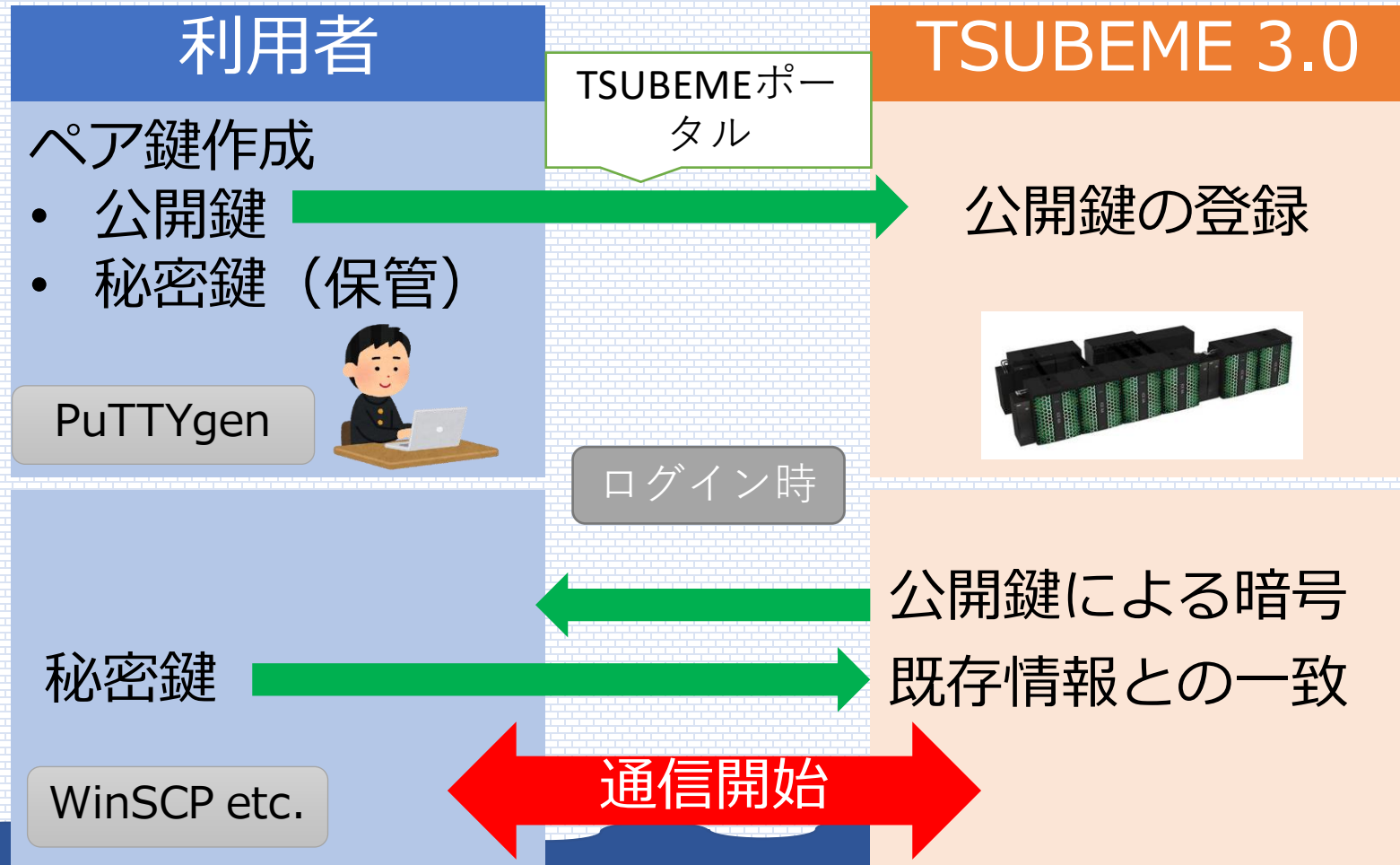
使用する計算バッチファイル（Dual）：

- `particles`： DualSPHysics v3.1用水粒子配置ファイル作成

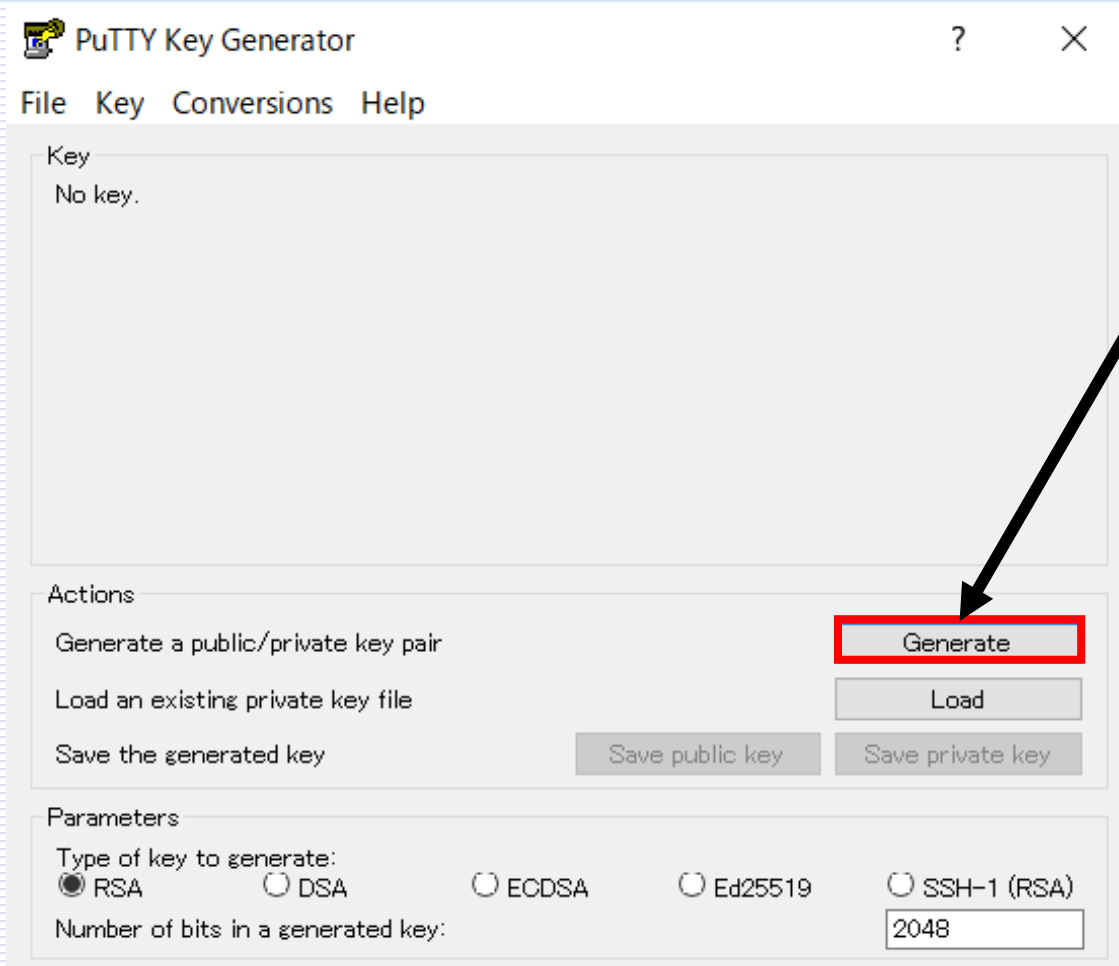


計算環境について

• TSUBAME3.0との通信（SSH通信）

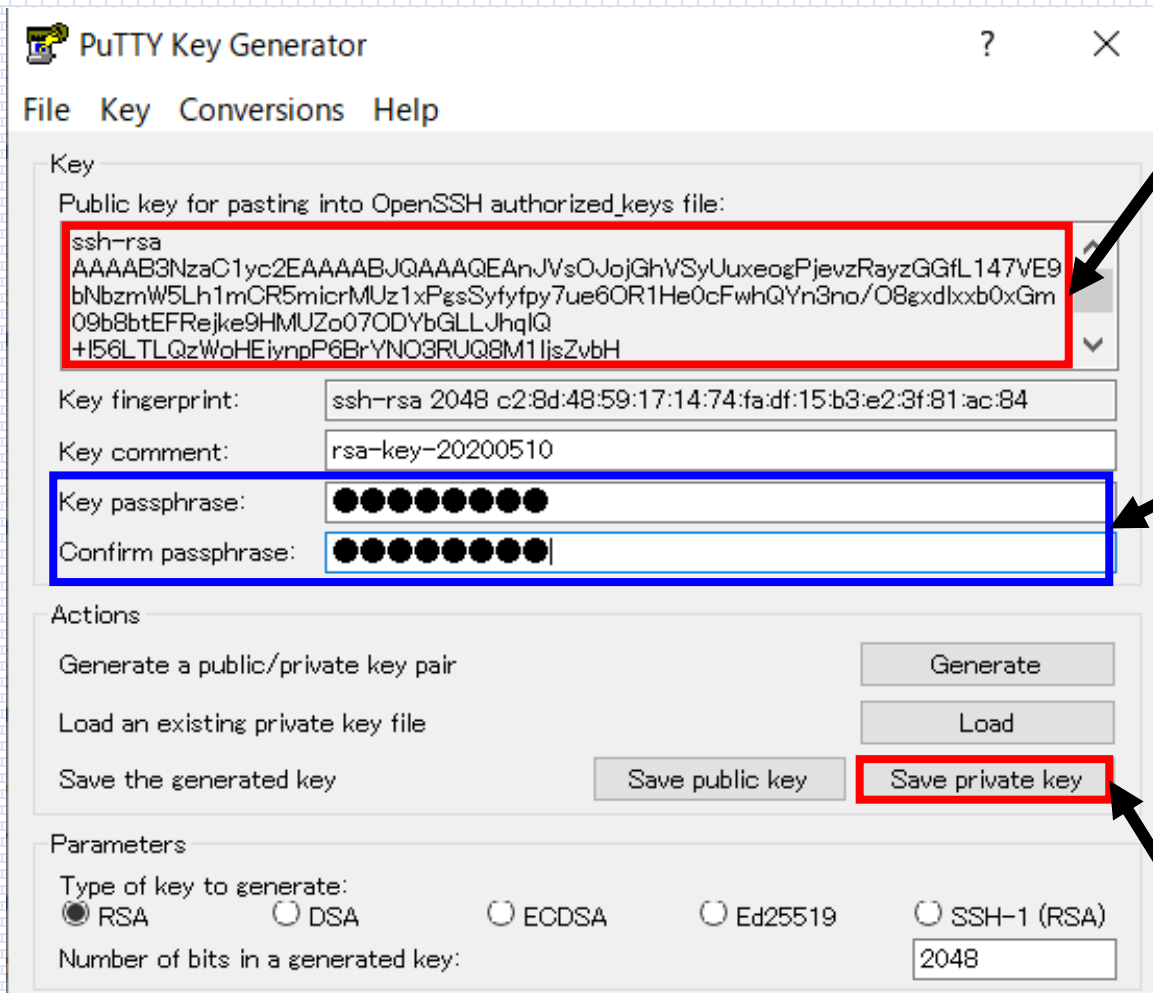


PuTTYgenでペア鍵生成



“Generate”をクリック
(ペア鍵生成)

PuTTYgenでペア鍵生成



The screenshot shows the PuTTY Key Generator window. The 'Key' section has a red box around the public key text. The 'Key passphrase' and 'Confirm passphrase' fields are highlighted with a blue box. In the 'Actions' section, the 'Save private key' button is highlighted with a red box. The 'Parameters' section shows 'RSA' selected and '2048' bits.

PuTTY Key Generator

File Key Conversions Help

Key

Public key for pasting into OpenSSH authorized_keys file:

```
ssh-rsa
AAAAB3NzaC1yc2EAAAABJQAAAAQEAJVsOJoJGhVSYUuxeogPjevzRayzGGfL147VE9
bNbzmW5Lh1mCR5micrMUz1xPgsSyfyfpy7ue6OR1He0cFwhQYn3no/O8gdxlxb0xGm
09b8btEFRejke9HMuZo07ODYbGLLJhqlQ
+I56LTLQzWoHEiynpP6BrYNO3RUQ8M1IisZvbH
```

Key fingerprint: ssh-rsa 2048 c2:8d:48:59:17:14:74:fa:df:15:b3:e2:3f:81:ac:84

Key comment: rsa-key-20200510

Key passphrase: ●●●●●●●●

Confirm passphrase: ●●●●●●●●

Actions

Generate a public/private key pair Generate

Load an existing private key file Load

Save the generated key Save public key Save private key

Parameters

Type of key to generate:
☒ RSA ☐ DSA ☐ ECDSA ☐ Ed25519 ☐ SSH-1 (RSA)

Number of bits in a generated key: 2048

“Public key”
をすべてコピー
(公開鍵をTSUBAME
ポータルへ)

秘密鍵にパスワード
をかける
(紛失防止)

“Save private key”
をクリック
(秘密鍵を保存)

公開鍵の登録

トップページ | TSUBAME計算サービス × +

t3.gsic.titech.ac.jp

アプリ 神戸大学大学院海... 神戸大学学生向けポ... トップページ | TSUBA... トップページ 神戸... 神戸大学附属図書館 日本船舶海洋工学会 日本財団 オーシャンイ... ファイル - KAISERオン... サービスストップ | マイ...

 **TSUBAME計算サービス**
TSUBAME3.0

Japanese
English

メニュー

- トップ
 - TSUBAMEポータル**
 - お知らせ
 - 規則・利用細則
 - 利用料について
 - 年間スケジュール
 - アカウント取得方法
 - 利用の手引き
 - ハードウェア構成
 - ▼ ソフトウェア構成
 - システムソフトウェア
 - ▼ サポートされているアプリケーション
 - HPCIで整備されたアプリケーション
 - 実験的サービス
 - 障害情報
 - ヘルスチェック項目
 - システムログ収集項目
 - 障害履歴
 - FAQ
 - お問い合わせ
 - モニタリング情報
 - 講習会
 - ▼ ソフトウェア配布
 - Mathematica
 - MATLAB
 - ChemOffice / ChemDraw

現在のTSUBAMEの運用状況 / Current TSUBAME Operational Status

2020.5.7 12:00 : CIFSアクセスに不具合

重要なお知らせ

2020-04-07
[2020年度のTSUBAME運用を開始しました \(変更点一覧\)](#)

2020-03-27
[2020年度春のTSUBAME講習会の延期について](#)

2020-03-17
[グループディスクの購入猶予期間について\(2020年度\)\(4/17追記\)](#)

2020-03-06
[学内配布中のソフトウェア利用に関する注意喚起](#)

お知らせ

2020-05-07
[MSC Nastran 2020.0 公開のお知らせ](#)

2020-04-30
[Jupyterサービスのメンテナンスについて\(5/1実施\)](#)

2020-04-16
[TSUBAMEポータルメンテナンスのお知らせ\(4/20実施\)](#)

2020-04-10
[TSUBAMEポータルメンテナンスのお知らせ\(4/13実施\)](#)

<https://www.t3.gsic.titech.ac.jp/>
よりTSUBAMEポータルへアクセス
上記アドレスのブックマーク登録
推奨

公開鍵の登録

TSUBAMEポータルページ

利用者権限：

アカウント：hpci005168

現在の状態：利用中

所属グループ：jh190061,tgh-19
IAX,tgh-20IAK

[TSUBAME利用状況]

[ジョブ一覧](#)

[予約ノード一覧](#)

[利用者情報]

[利用者情報表示](#)

[SSH公開鍵登録](#)

[Webサービス利用](#)

[パスワード設定](#)

[利用規約一覧](#)

[課金管理]

[支払コード管理](#)

[予算コード承認依頼\(Q\)](#)

[グループ]

[所属グループ管理](#)

[履歴表示](#)

SSH公開鍵追加

SSH公開鍵をコード入力または、ファイルアップロードにて追加することができます。

SSH公開鍵コードを入力して追加ボタンを押してください。

公開鍵コード入力

```
ssh-rsa AAAAB3NzaC1yc2EAAAABJQAAAAQEAJVs0JoiGhVSyUuxeogPievzRayzGGfL147VE9bNbzmW5Lh1mCR5micrMUz1xPg  
sSyfyfpy7ue6OR1He0cFwhQYn3no/Q8gxdLxxb0xGm09b8btEEReijke9HMuZo070DYbGLLJhaIQ+L58LTLQzWoHEiynpP6BrYNQ  
3RUQ8M1Lis7ybH+YyiT4ya0XbTnB1VDTzuwj8HtCuGeziUy62t23ufUoSg3wjbTy8Iot23C1AbByzPgse3LYiRtaIkVkp3CLVh  
YaX0yUkWjhWubzWITfEo4pnIwLK9+MVUckHCx9ecHRCZCdkXuNkgAy+DW+N16LrR0K9zneg1kpwVxYRQ== rsa-key-2020051  
0l
```

1. “SSH公開鍵登録” をクリック
2. PuTTYgenで生成された公開鍵をペースト
3. “追加” をクリック

追加

登録するSSH公開鍵をアップロードしてください。

WinSCPの設定

ログイン

新しいサイト
tsubame_groupstrage
tsubame_Homestrage

セッション
転送プロトコル(F)
SFTP

ホスト名(H) login.t3.gsic.titech.ac.jp ポート番号(R) 22

ユーザ名(U) hpci005168 パスワード(P)

保存(S) 設定(D)...

ツール(T) 管理(M) ログイン 閉じる ヘルプ(H)

☒ 最後のセッションを閉じた後の起動時にログインを表示(S)

高度なサイトの設定

環境
ディレクトリ
ごみ箱
暗号化
SFTP
シェル
接続
プロキシ
トンネル
SSH
鍵交換
認証
バグ対策
メモ

☐ 常に SSH2 の認証をバイパスする(B):

認証オプション
☒ Pageant での認証を試みる(P)
☒ SSH2 でキーボードによる認証を許可する(I)
☒ パスワードを自動送信する(P)
☐ SSH1 で TIS または CryptoCard 認証を許可する(T)

認証条件
☐ エージェントの転送を許可する(F)

秘密鍵(K)
C:\Users\YouLabo\Desktop\key.ppk

公開鍵を表示(D) ツール(T)

GSSAPI
☒ GSSAPI/SSPI 認証を許可する (SSH-2)(G)
☐ GSSAPI/SSPI 証明書の権利委譲を許可する(C)

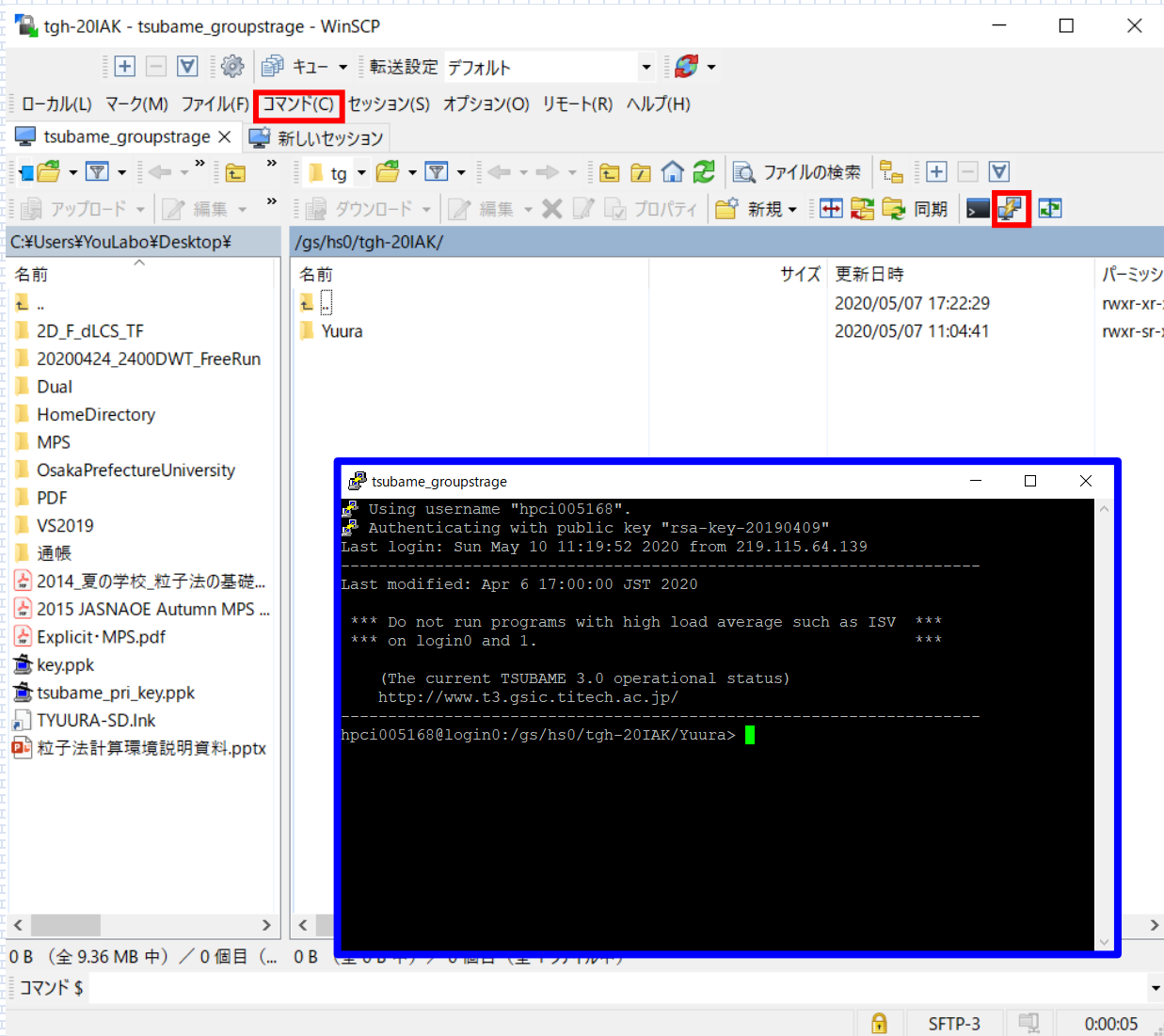
色(C) OK キャンセル ヘルプ(H)

TSUBAME_ID@login.t3.gsic.titech.ac.jp
を入力


設定>SSH>認証より
秘密鍵ファイルを選択

設定を保存.
ログインすると
ホームストレージが表示される

PuTTYターミナル



コマンド>PuTTYを開く
or Ctrl + P

Or  をクリックで
青枠のターミナルが開く