



# 環境設定

# 準備1: 必要なファイル、データをコピー

- Cygulus にログインした後、以下のコマンドを実行して必要なファイルを各自のディレクトリにコピー
- **your\_account** の部分は各自のアカウント名に置換

```
$ cd /work/EDU5/your_account
$ cp /work/EDU5/naruhikot/share/hands-on.tar.gz .
$ tar xvzf ./hands-on.tar.gz
$ cd /work/EDU5/your_account/hands-on
```

```
hands-on/
|-- Example1
|   |-- example1.py
`-- submit.sh
|-- Lab1
|   |-- exercise1
|       |-- example_solution
|           |-- exercise1.py
|           `-- submit.sh
|   |-- exercise1.py
`-- submit.sh
|-- exercise2
|   |-- example_solution
|       |-- exercise2.py
|       `-- submit.sh
|   |-- exercise2.py
`-- submit.sh
|-- exercise3
|   |-- example_solution
|       |-- exercise3.py
|       `-- submit.sh
|   |-- exercise3.py
`-- submit.sh
|-- exercise4
|   |-- example_solution
|       |-- exercise4.py
|       `-- submit.sh
|   |-- exercise4.py
`-- submit.sh
|-- Lab2
|   |-- example_solution
|       |-- solution.py
|       `-- submit.sh
|   |-- nways_serial.py
`-- submit.sh
|-- input
`-- alk.traj.dcd
```

## 準備2-1: 必要なライブラリのインストール

- /work/EDU5/*your\_account*/hands-on ディレクトリにて以下のコマンドを実行して、python 仮想環境を構築し、必要なパッケージをインストール

```
$ module load python/3.8 cuda/12.3.0
$ python -m venv venv
$ source venv/bin/activate
(venv) $ pip install numpy==1.24
(venv) $ pip install cupy-cuda12x
(venv) $ pip install numba
(venv) $ pip install MDAnalysis
```

## 準備2-2: 必要なライブラリのインストール

- インストールが成功すれば、以下のような出力が確認できる

```
...  
Successfully installed <パッケージ名>
```

- 以下のようなワーニングが出たとしても、今回の実習では無視してOK
  - パッケージ管理ツールである pip のバージョンが古いので、アップデートした方が良いのでは？ と言われているが、今回の実習では無視しても問題ありません

```
WARNING: You are using pip version 19.3.1; however, version 24.0 is available.  
You should consider upgrading via the 'pip install --upgrade pip' command.
```

## 準備2-3: 必要なライブラリのインストール

- 全てのライブラリをインストールした後に、以下を実行

```
(venv) $ pip list
```

- 右のような出力が得られれば準備は完了
- ここまで完了すれば、次回以降のログインでは、

```
$ module load python/3.8 cuda/12.3.0
$ source /work/EDU5/$USER/hands-on/venv/bin/activate
```

とするだけで、python仮想環境が有効になります

Package	Version
biopython	1.83
contourpy	1.1.1
cupy-cuda12x	12.3.0
cycler	0.12.1
fasteners	0.19
fastrlock	0.8.2
fonttools	4.49.0
GridDataFormats	1.0.1
gsd	3.2.1
importlib-metadata	7.0.1
importlib-resources	6.1.2
joblib	1.3.2
kiwisolver	1.4.5
llvmlite	0.41.1
matplotlib	3.7.5
MDAnalysis	2.4.3
mmtf-python	1.1.3
mrcfile	1.5.0
msgpack	1.0.7
networkx	3.1
numba	0.58.1
numpy	1.24.0
packaging	23.2
pillow	10.2.0
pip	19.3.1
pyparsing	3.1.1
python-dateutil	2.8.2
scipy	1.10.1
setuptools	41.6.0
six	1.16.0
threadpoolctl	3.3.0
tqdm	4.66.2
zipp	3.17.0

# 準備3: Nsight Systems のローカル端末 (Cygnus ではない)へのインストール

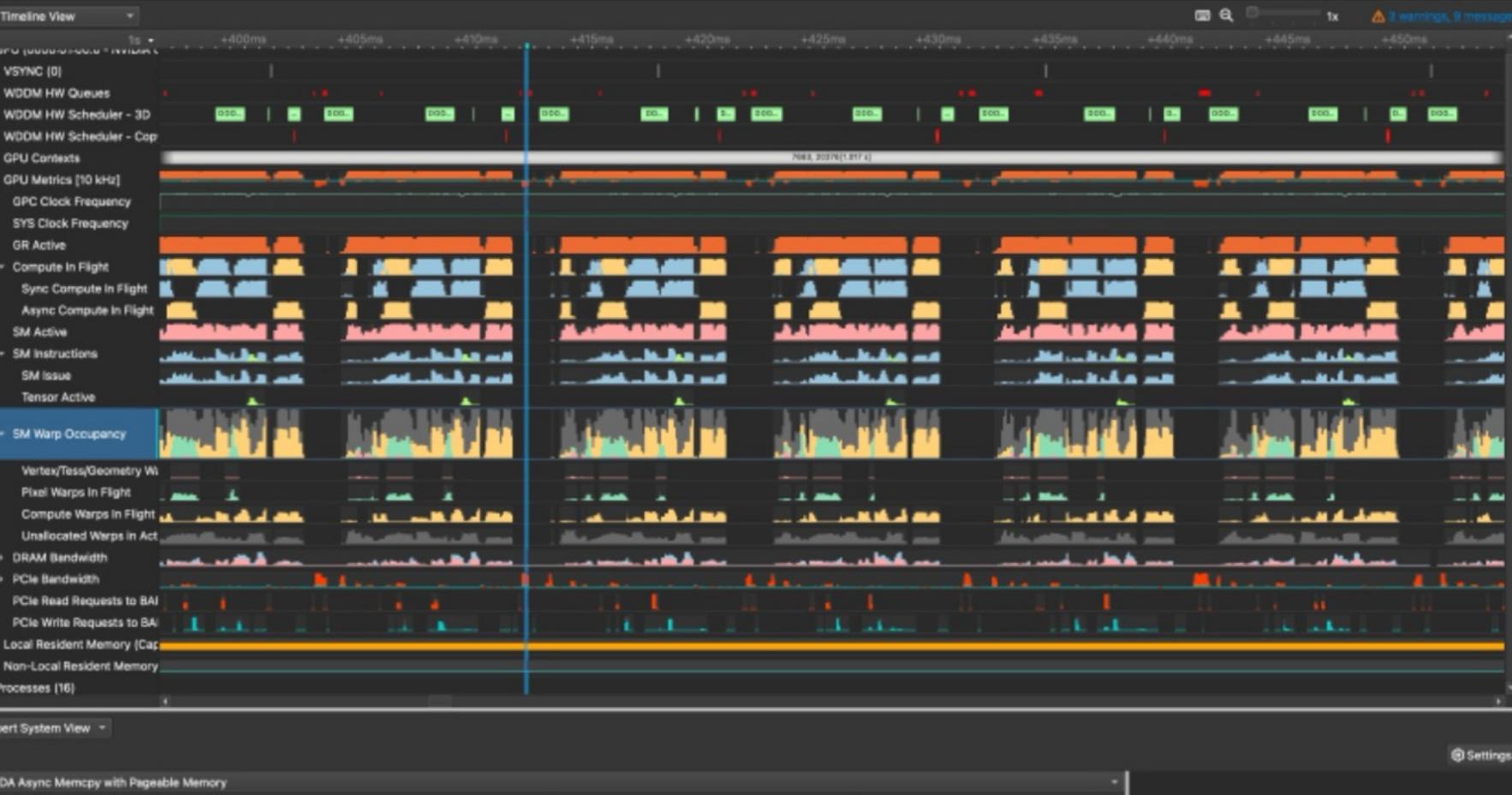
Win/Mac/Linux 用を提供

## NVIDIA Nsight Systems

NVIDIA Nsight™ Systems is a system-wide performance analysis tool designed to visualize an application's algorithms, identify the largest opportunities to optimize, and tune to scale efficiently across any quantity or size of CPUs and GPUs, from large servers to our smallest system on a chip (SoC).

[Get started](#)

Nsight Systems 2024.1 is available now.



The screenshot shows the Nsight Systems interface with a green oval highlighting the "Get started" button. Below the button, a message indicates that version 2024.1 is available now. The main window displays a complex timeline view with multiple panels showing GPU and CPU activity, memory usage, and other performance metrics.

## Download NVIDIA Nsight Systems

### Nsight Systems 2024.1 is Available Now

Review the [supported platforms](#) for NVIDIA Nsight™ Systems to choose the correct version for your host and profiling target.

If profiling from the CLI, pick your platform based on where the CLI will be run. If using the GUI (Full Version) to view reports, do profiling, or do remote profiling, pick your platform based on the host PC architecture where the GUI will be run.

Also review the [system requirements](#) before downloading.

Desktop, workstation, and server platforms:

- [Download for Windows on x86\\_64](#)
- [Download for Linux on x86\\_64](#)
- [Download for Linux on Power9](#)
- [Download for Linux on Arm Servers and NVIDIA Grace](#)
- [Download for macOS](#)

<https://developer.nvidia.com/nsight-systems>



