

[大規模科学計算システム]

アプリケーションサービスの紹介

情報部情報基盤課 共同利用支援係

1 はじめに

本センター大規模科学計算システムでは、分子軌道計算、数式処理、データ処理等の各アプリケーションソフトウェアをサービスしています。本稿では、スーパーコンピューター AOBA でサービスを行っているアプリケーションソフトウェアの紹介をします。

アプリケーションソフトウェアの紹介は、以下の URL の本センター大規模科学計算システム Web サイトにも掲載しています。

■アプリケーションサービス <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/software-service/>

表1 アプリケーションソフトウェアとサービスホスト

アプリケーションソフトウェア		サービスホスト
非経験的分子軌道計算プログラム	Gaussian16	AOBA-B
反応経路自動探索プログラム	GRRM17 ※ 1	AOBA-B
統合型数値計算ソフトウェア	Mathematica ※ 2	フロントエンドサーバ
数値解析ソフトウェア	MATLAB ※ 1	フロントエンドサーバおよび AOBA-B
熱流体解析ソフトウェア	OpenFOAM	AOBA-B
第一原理計算統合パッケージ	Quantum Espresso	AOBA-A および AOBA-B

※ 1 学術目的での利用（非商用利用）のみ可能です。

※ 2 東北大学の構成員のみ利用可能です。

2 ご利用の前に

2.1 リモートログイン

アプリケーションを利用するためには、フロントエンドサーバに SSH (Secure SHell) を用いてリモートログインする必要があります。フロントエンドサーバにリモートログインする方法については、本誌11ページ「鍵作成とログイン方法」をご参照下さい。

■利用申請からログインまで <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/first-use/>

2.2 ファイル転送

ローカル PC で作成したインプットファイルをストレージシステムに転送したり、アプリケーションで実行した結果ファイルをローカル PC に転送する場合は、ファイル転送が必要になります。ファイル転送については本誌18ページ「ストレージシステムの利用法」をご参照下さい。

■データ転送（ストレージ） <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/storage/>

2.3 GUI アプリケーションの利用

GUI アプリケーション (Mathematica および MATLAB) を利用する場合は、ローカル PC に X Window System 環境の設定が必要です。

2.3.1 Linux からの利用

標準で X Window System がインストールされています。ローカル PC からリスト 1 のように -X オプション (または -Y オプション) を付けてログインしてください。

リスト 1 GUI アプリケーションを利用する場合のログイン方法

(秘密鍵のファイル名を id_rsa_cc としてローカル PC の ~/.ssh 以下に作成した場合)

【ローカル PC からログインサーバに SSH 接続】

```
localhost$ ssh -i ~/.ssh/id_rsa_cc -X 利用者番号@login.cc.tohoku.ac.jp
```

【ログインサーバからフロントエンドサーバに SSH 接続】

```
login$ ssh -X front
```

X Forwarding によりローカル PC の画面にフロントエンドサーバで動作する GUI アプリケーション画面が表示されます。

2.3.2 macOS からの利用

macOS では X Window System 環境の「XQuartz」をインストールして下さい。Linux からの利用と同様に利用可能です。接続方法はリスト 1 と同様です。

- XQuartz (<https://www.xquartz.org/>)

2.3.3 Windows からの利用

■商用のアプリケーションを利用する場合 Windows 用 X サーバは、X サーバソフトとしていくつかのメーカーから販売されています。

- ASTEC-X (<http://www.astec-x.com>)
- OpenText Exceed (<https://www.macnica.net/opentext/exceed.html/>)

■無償のアプリケーションを利用する場合 VcXsrv Windows X Server が無料で利用できます。VcXsrv のインストールには WSL2 が必要になります。

- XcXsrv (<https://sourceforge.net/projects/vcxsrv/>)
- WSL2 (<https://docs.microsoft.com/ja-jp/windows/wsl/>)

3 非経験的分子軌道計算プログラム Gaussian16

Gaussian は、Carnegie-Mellon 大学の Pople を中心として開発された分子軌道計算プログラムパッケージです。広範囲にわたる非経験的モデルおよび半経験的モデルをサポートしています。

本センター AOBA-B での Gaussian の実行には、以下のような特長があります。

- 最大 128 並列までの並列処理が行え、実行時間の短縮が可能です。
- 256GB の搭載メモリを用いて、大規模なモデルの解析が可能です。
- スクラッチファイル (テンポラリファイル) を高速な SSD ディスクに置くことにより、ファイル入出力時間が短縮されます。

■サービスホスト AOBA-B

■バージョン Gaussian16 C.01

3.1 利用方法

以下は Gaussian 利用方法の概要です。

3.1.1 実行コマンド

Gaussian のインプットファイルは、拡張子を .com として作成します。(リスト 2 : e2-01.com)

インプットファイルを Windows のエディタで作成した場合、拡張子.com のファイルは Windows で実行ファイルと認識されるため、誤ってダブルクリックなどでインプットファイルを実行しないようご注意ください。また、ファイル転送ソフトでストレージシステムにインプットファイルを転送する際には、アスキーモードを指定して転送してください。

フロントエンドサーバにログイン後、subg16 コマンドにキュー名 (lx) と利用ノード数 (1)、および入力プログラム名を指定することにより、AOBA-B のバッチリクエストとして実行されます。(リスト 3)

バッチリクエストについては、「ジョブの実行方法」をご参照下さい。

■ジョブの実行方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/>

リスト 2 サンプルファイル e2-01.com

```
%NProc=128      #並列数
%Mem=128Gb     #確保メモリ量
# RHF/6-31G(d) Pop=Full Test
```

```
Formaldehyde Single Point
```

```
0 1
C  0.   0.   0.
O  0.  1.22  0.
H  .94  -.54  0.
H -.94  -.54  0.
```

(最終行にも空行が必要)

リスト 3 e2-01.com を解析するジョブ投入コマンド

```
[front1 ~]$ subg16 -q lx -b 1 e2-01 (subg16コマンドに入力ファイルを指定する際は拡張子.comを省きます)
プロジェクトコード : un0000にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: lx.
```

3.1.2 実行結果の確認

計算が終了すると、インプットファイル名に拡張子.log がつけられた結果ファイル (例: e2-01.log) が作成されます。計算結果をはじめ、CPU 時間などの計算機使用量に関する情報もここに含まれます。

正常終了ならば、このファイルの末尾に「Normal termination of Gaussian 16.」というメッセージが出力されます。ファイルの末尾を表示する tail コマンドで確認できます。(リスト 4)

リスト 4 実行結果の確認

```
[front1 ~]$ tail e2-01.log
:
Job cpu time:      0 days  0 hours  0 minutes 10.9 seconds.
Elapsed time:     0 days  0 hours  0 minutes  0.7 seconds.
File lengths (MBytes):  RWF=      72 Int=      0 D2E=      0 Chk=      8 Scr=      8
Normal termination of Gaussian 16 at Fri Apr  1 12:00:00 2021.
```

結果ファイルの詳細な見方は、マニュアル等をご参照ください。

3.1.3 ユーティリティプログラム

formchk などのユーティリティプログラムは、/mnt/stfs/ap/g16 以下に配置されています。実行パスの設定を行うか、絶対パスでユーティリティプログラムを実行します。

3.2 マニュアル

本センター本館 1 階 利用相談室に以下の資料を備えてあります。

- 電子構造論による化学の探求 第 3 版, ガウシアン社, 2017
- Gaussian 16 Online Manual, <https://gaussian.com/techsupport/>
- Gaussian プログラムによる量子化学計算マニュアル: 堀憲次、丸善出版
- すぐできる量子化学計算ビギナーズマニュアル: 武次鉄也、講談社
- すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル: 長岡正隆、講談社
- Gaussian プログラムで学ぶ情報化学・計算化学実験: 堀憲次、丸善出版

3.3 利用方法についての問合せ

AOBA-B での利用方法についてのご質問は、サイバーサイエンスセンターの利用相談フォームをご利用下さい。

■利用相談 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/consultation/>

3.4 Gaussian、GaussView サイトライセンス

東北大学では Gaussian および GaussView のサイトライセンスを取得しており、東北大学内のコンピュータにインストールすることができます。

東北大学所属の教職員または学生の利用が可能です。学外で利用するコンピュータにインストールすることはできません。東北大学内でインストールしたコンピュータを学外に持ち出すこともできません。

3.4.1 申込み方法

インストールに必要な情報をお知らせしますので、利用を希望される方はサイトライセンス利用申請書作成フォーム https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application/cgi-bin/gaussian_license.html (東北大学内か

らのみアクセス可能)でPDFファイルを作成し、押印(またはサイン)の上、共同利用支援係までメールでご送付ください。

なお、申請には東北大メール(Gmail)アドレスが必要です。

4 反応経路自動探索プログラム GRRM17

GRRMは、NPO法人量子化学探索研究所(<https://iqce.jp/>)で開発される反応経路自動探索プログラムです。利用の方法、最新情報については<https://iqce.jp/GRRM/>をご参照ください。

■サービスホスト AOBA-B

4.1 利用方法

フロントエンドサーバにログイン後、ジョブスクリプトファイルと入力データファイル(.com)を作成またはアップロードし、AOBA-Bのバッチリクエストとして実行します。

バッチリクエストについては、「ジョブの実行方法」をご参照下さい。

■ジョブの実行方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/>

4.1.1 ジョブスクリプトファイルの作成

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。リスト5の例ではファイル名をrun.cshとしてテキストファイルで保存します。

リスト5 ジョブスクリプトファイル run.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -q lx -b 1 #投入するキュー名とノード数を指定(固定)
#PBS -l elapstim_req=1:00:00 #実行する時間を指定
#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が指定される
source /usr/ap/etc/GRRM17/config.sh #GRRM17の環境変数ファイルを読み込む
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
```

4.1.2 入力データファイル(.com)の作成、またはファイルの転送

入力データファイルの拡張子は.comにします。リスト6ではtest.comファイルを例に解説します。test.comファイルはフロントエンドサーバにログインしてテキストエディタで作成するか、ローカルPCのGaussViewなどで作成したものを、ストレージシステムにテキストモードでアップロードします。

リスト6 入力データファイル test.com

```
# GRRM/MP2/6-31G
0 1
C -0.0000000000000000 -0.0000000000000000 -0.549482561269
O 0.0000000000000000 0.0000000000000000 0.708343639882
H 0.0000000000000000 0.934113144104 -1.131025039307
H -0.0000000000000000 -0.934113144104 -1.131025039307
Options
GauProc=2

(最終行にも空行が必要)
```

この入力データファイルの場合、Gaussianの並列度は「2」になります。GRRMの並列JOB数との積がAOBA-B1ノードの利用可能並列数(128)を越えないように注意して下さい。test.comを「ジョブスクリプトファイルの作成」で作成したrun.shでジョブを投入した場合、並列数は以下のようになります。

$$(\text{Gaussian 並列度 } 2) \times (\text{GRRM 並列 JOB 数 } 16) = (\text{並列数 } 32)$$

4.1.3 ジョブの投入、状況確認、取り消し・削除

front のコマンドプロンプト上で、以下のコマンドでリクエストを投入します。(リスト 7)

リスト 7 ジョブの投入

```
[front1 ~]$ qsub run.sh
プロジェクトコード : un00000にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: lx.
```

ジョブが投入され、待ち順に従ってリクエストが実行されます。リクエストを投入したディレクトリに test.com が保存されている必要があります。また、計算結果のファイルも同じディレクトリに作成されます。

投入したリクエストの状況確認と、取り消しは以下のコマンドで行います。(リスト 8)

リスト 8 リクエストの状況確認と、取り消し

```
[front1 ~]$ reqstat (リクエストの状況確認、リクエスト番号の確認)
[front1 ~]$ qdel 12345.job (リクエストの取り消し・削除)
```

4.1.4 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、ローカル PC にダウンロードして下さい。

4.1.5 実行についての注意事項

作業ディレクトリに「test.log」が存在する状態で、その GRRM JOB を開始する際に投入したものと同一のシェルスクリプトを再投入すると、再び GRRMp が起動され、GRRM JOB が再開されます。GRRM 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。

5 統合型数値計算ソフトウェア Mathematica

Mathematica は Stephen Wolfram によって作られた、プログラミング言語を備えた数式処理システムです。Mathematica の機能は、数値計算、記号計算、グラフィックスという 3 つに大別でき、この 3 つが一体となって使いやすいインタフェースを提供しています。

■サービスホスト フロントエンドサーバ

■バージョン version 12.2

5.1 利用方法

5.1.1 Mathematica の起動

■GUI 版 GUI 版の Mathematica の起動には、フロントエンドサーバに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。

リスト 9 GUI 版の起動方法

```
[front1 ~]$ mathematica
```

GUI 版の Mathematica が起動します。(図 1)



図 1 GUI 版 Mathematica の起動画面

■CUI 版 GUI を使用せず、コマンドライン上で起動することもできます。(リスト 10)

リスト 10 テキスト版の起動方法

```
[front1 ~]$ math
Mathematica 12.2.0 Kernel for Linux x86 (64-bit)
Copyright 1988-2021 Wolfram Research, Inc.

In[1]:=
```

5.2 マニュアル・参考資料

Mathematica の使い方は、マニュアル・参考資料 や、Web などをご参照ください。

- Mathworks 社 <https://www.wolfram.com/>

本センター本館 1 階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

- スティーブンウルフラム Mathematica ブック (日本語版)：トッパン
- Mathematica 方法と応用：J.W. グレイ、サイエンティスト社
- Mathematica プログラミング技法：R. メーダー、トッパン
- 入門 Mathematica：日本 Mathematica ユーザー会、東京電機大学出版局
- はやわかり Mathematica：榊原進、共立出版
- もっと Mathematica で数学を：吉田孝之、培風館

6 数値解析ソフトウェア MATLAB

MATLAB は高機能な数値計算機能と多彩な可視化機能を備えた技術計算ソフトウェアです。科学的、工学的分野の様々な数値計算 (特に行列演算)、データ解析、シミュレーション、およびビジュアライゼーションのための統合環境を提供しています。提供される全ての Toolbox が利用可能です。

■サービスホスト フロントエンドサーバ、AOBA-B

■バージョン R2021a

6.1 利用方法

6.1.1 MATLAB の起動

■GUI 版 GUI 版 MATLAB の起動には、フロントエンドサーバに接続する際に X forwarding の設定を行う必要があります。

リスト 11 GUI 版 MATLAB の起動方法

```
[front1 ~]$ matlab
```

GUI 版の MATLAB が起動します。(図 2)

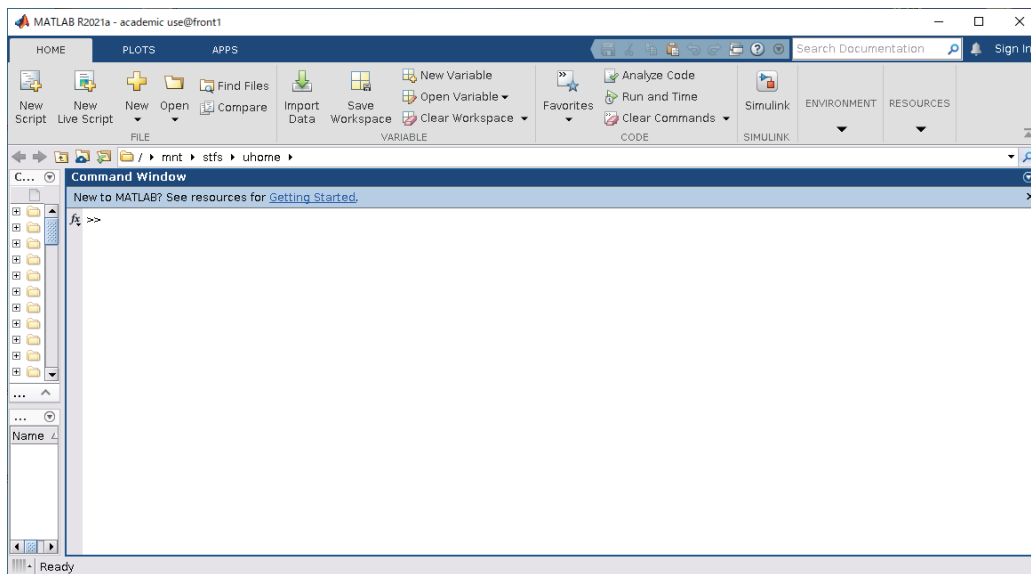


図 2 GUI 版 MATLAB の起動画面

■CUI 版 GUI を使用せず、コマンドライン上で起動することもできます。(リスト 12)

リスト 12 CUI 版 MATLAB の起動方法

```
[front1 ~]$ matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay
```

```
< M A T L A B (R) >  
Copyright 1984-2021 The MathWorks, Inc.  
R2021a (9.10.0.1602886) 64-bit (glnxa64)  
February 17, 2021
```

```
For online documentation, see https://www.mathworks.com/support  
For product information, visit www.mathworks.com.
```

```
>>
```

6.2 バッチジョブ実行

MATLAB の並列処理機能を使用し、AOBA-B の 1 ノードを利用して 128 並列までの処理が可能です。最大メモリも 256GB まで利用可能です。大規模な計算にご利用ください。

バッチジョブ実行ではグラフ描画など画面出力のあるプログラムや、対話的な処理は行えません。

バッチリクエストについては、「ジョブの実行方法」をご参照下さい。

■ジョブの実行方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/>

function として作成した test (リスト 13) を実行するためにはジョブスクリプトファイル (リスト 14) を作成します。

リスト 13 サンプルファイル test.m

```
function test
p=parpool('local',128) % 並列プールを作成 (128個)

n = 1024;
A = 500;
a = zeros(1,n);
parfor i = 1:n
    a(i) = max(abs(eig(rand(A))));
end
toc

poolobj = gcp('nocreate');
delete(poolobj) %並列プールを削除
```

リスト 14 パッチリクエストファイル run.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -q lx -b 1 #投入するキュー名とノード数を指定 (固定)
#PBS -l elapstim_req=1:00:00 #実行する時間を指定
cd $PBS_O_WORKDIR #リクエストを投入したディレクトリに移動
matlab -batch test #バッチジョブ形式で実行
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

リスト 15 バッチリクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub run.sh
プロジェクトコード : un00000にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: lx.
```

6.3 Parallel Server による複数ノード実行

Parallel Server の機能により、AOBA-B の複数ノードを利用した実行が可能です。利用方法については以下のマニュアルをご参照下さい。

■AOBA-B での MATLAB Parallel Server の使い方

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/pdf/AOBA-B-Parallel-Server.pdf>

6.4 サンプルプログラム

MATLAB には豊富なデモがありますので、ご利用ください。MATLAB 上で、demo コマンドを実行すると、デモ画面が開きます。

6.5 マニュアル・参考資料

MATLAB の使い方は、マニュアル・参考資料などをご参照ください。

■マニュアル 日本語オンラインマニュアルが公開されています。以下のページをご参照ください。

- https://www.mathworks.co.jp/help/ja_JP/techdoc/index.html

■参考資料 本センター本館 1 階 利用相談室に、以下の資料を備えてあります。

- MATLAB による制御理論の基礎：野波健蔵、東京電機大学出版局
- MATLAB による制御のためのシステム同定：足立修一、東京電機大学出版局
- だれでもわかる MATLAB：池原雅章、培風館

- はやわかり MATLAB 第 2 版：芦野隆一、共立出版
- 最新 MATLAB ハンドブック第 3 版：小林一行、秀和システム
- MATLAB グラフィックス集：小国力、朝倉書店
- MATLAB と利用の実際：小国力、サイエンス社
- MATLAB の総合応用：高谷邦夫、森北出版
- 最新使える！ MATLAB：青山貴伸、講談社
- 使える！ MATLAB/Simulink プログラミング：青山貴伸、講談社
- MATLAB による画像&映像信号処理：村松正吾、CQ 出版
- Matlab によるグラフ描画：西村竜一（広報誌 SENAC Vol.37 No.1 (2004-1)）
- 高機能数値計算・可視化機能ソフト MATLAB の基本的な使い方：陳国曜 他（広報誌 SENAC Vol.46 No.3 (2013-7)）

6.6 利用方法についての問合せ

利用方法についてのご質問は、MathWorks サポート窓口、コミュニティ Q&A サイトをご利用下さい。

■MathWorks サポート窓口 https://jp.mathworks.com/support/contact_us.html

■コミュニティ Q&A サイト <https://jp.mathworks.com/matlabcentral/answers/>

7 熱流体解析ソフトウェア OpenFOAM

OpenFOAM (Open source Field Operation And Manipulation の略称) は数値解析開発、及び数値流体力学を含む連続体力学の前後処理用の C++ 製ツールボックスです。

使い方についての問合せは開発元 Web サイトやユーザコミュニティをご利用下さい。

■サービスホスト AOBA-B

7.1 OpenCFD 版

■開発元 Web サイト <https://www.openfoam.com>

■バージョン v2012

OpenFOAM の実行文を記述したジョブスクリプトファイル (リスト 16) を作成して qsub コマンドでリクエストを投入します。

リスト 16 ジョブスクリプトファイル例 job.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -T intmpi
#PBS -l elapstim_req=24:00:00
#PBS -q lx -b 1
source /usr/ap/etc/OpenFOAM/v2012/config.sh
cd $PBS_0_WORKDIR

... OpenFOAM実行文 ...
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

リスト 17 バッチリクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub job.sh
プロジェクトコード：un0000にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: lx.
```

7.2 The OpenFOAM Foundation 版

■開発元 Web サイト <https://openfoam.org>

■バージョン 8

OpenFOAM の実行文を記述したジョブスクリプトファイル（リスト 18）を作成して qsub コマンドでリクエストを投入します。

リスト 18 ジョブスクリプトファイル例 job.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -T intmpi
#PBS -l elapstim_req=24:00:00
#PBS -q lx -b 1
source /usr/ap/etc/OpenFOAM/8/config.sh
cd $PBS_O_WORKDIR
... OpenFOAM実行文 ...
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

リスト 19 バッチリクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub job.sh
プロジェクトコード：un0000にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: lx.
```

バッチリクエストについては、「ジョブの実行方法」をご参照下さい。

■ジョブの実行方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/>

8 第一原理計算統合パッケージ Quantum Espresso

Quantum ESPRESSO は、第一原理電子構造計算と材料モデリングのためのオープンソース統合パッケージです。

使い方についての問合せは開発元 Web サイトやユーザコミュニティをご利用下さい。

■開発元 Web サイト <https://www.quantum-espresso.org>

■サービスホスト AOBA-A および AOBA-B

8.1 AOBA-A での実行

■バージョン 6.3 (pw.x のみの提供)

Quantum Espresso の実行文を記述したジョブスクリプトファイル（リスト 20）を作成して qsub コマンドでリクエストを投入します。

リスト 20 ジョブスクリプトファイル例 job.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -l elapstim_req=24:00:00
#PBS -q sx --venode=1
source /usr/ap/etc/QE/SX/6.3/config.sh
cd $PBS_O_WORKDIR
... Quantum Espresso実行文 ...
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

リスト 21 バッチリクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub job.sh
プロジェクトコード：un0000にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: sx.
```

8.2 AOBA-B での実行

■バージョン 6.7

Quantum Espresso の実行文を記述したジョブスクリプトファイル (リスト 22) を作成して qsub コマンドでリクエストを投入します。

リスト 22 ジョブスクリプトファイル例 job.sh

```
#!/bin/sh
#PBS -T intmpi
#PBS -l elapstim_req=24:00:00
#PBS -q lx -b 1
source /usr/ap/etc/QE/LX/6.7/config.sh
cd $PBS_0_WORKDIR

... Quantum Espresso実行文 ...
```

以下のコマンドでリクエストを投入します。

リスト 23 バッチリクエストの投入方法

```
[front1 ~]$ qsub job.sh
プロジェクトコード : un0000 にリクエストを投入します
Request 12345.job submitted to queue: lx.
```

バッチリクエストについては、「ジョブの実行方法」をご参照下さい。

■ジョブの実行方法 <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/>