



TOHOKU
UNIVERSITY

ISSN 2436-0066

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広報

SENAC

Vol.54 No.2 2021-4



Cyberscience
Center

Supercomputing System
Tohoku University

www.ss.cc.tohoku.ac.jp

大規模科学計算システム関連案内

<大規模科学計算システム関連業務は、サイバーサイエンスセンター本館内の情報部情報基盤課が担当しています。>

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

階	係・室名	電話番号(内線)* e-mail	主なサービス内容	サービス時間
				平日
一階	利用相談室	022-795-6153 (6153) sodan@cc.tohoku.ac.jp 相談員不在時 022-795-3406 (3406)	計算機利用全般に関する相談 大判プリンタ、利用者端末等の利用	8:30～17:15 8:30～21:00
	利用者談話室	(3444)	自販機	8:30～21:00
	展示室* (分散 コンピュータ博物館)*	*見学希望の方は共同利用支援係までご連絡ください。	歴代の大型計算機等の展示	9:00～17:00
三階	総務係	022-795-3407 (3407) cc-som@grp.tohoku.ac.jp	総務に関すること	8:30～17:15
	会計係	022-795-3405 (3405) cc-kaikei@grp.tohoku.ac.jp	会計に関すること、負担金の請求に関すること	8:30～17:15
	共同利用支援係 (受付)	022-795-3406 (3406) 022-795-6251 (6251) uketuke@cc.tohoku.ac.jp	利用手続き、利用相談、講習会、ライブラリ、見学、アプリケーションに関すること	8:30～17:15
	共同研究支援係	022-795-6252 (6252) rs-sec@cc.tohoku.ac.jp	共同研究、計算機システムに関すること	8:30～17:15
	ネットワーク係	022-795-6253 (6253) i-network@grp.tohoku.ac.jp	ネットワークに関すること	8:30～17:15
四階	研究開発部	022-795-6095 (6095)		
五階	端末機室	(3445)	PC 端末機(X 端末)	8:30～17:15

* () 内は東北大学内のみの内線電話番号です。青葉山・川内地区以外からは頭に 92 を加えます。

本誌の名称「SENAC」の由来

昭和 33 年に東北地区の最初の電子計算機として、東北大学電気通信研究所において完成されたパラメロン式計算機の名前で SENAC-1 (SENdai Automatic Computer-1) からとって命名された。

[共同研究成果]

数値解の安定条件を考慮した y 形溶接構造の冷却過程における 水素凝集挙動解析および本解析プログラムによる数値解析 高速化へ向けての考察

尾関郷¹, 横堀壽光¹, 大見敏仁², 小川道夫¹, 糟谷正³¹ 帝京大学 戦略的イノベーション研究センター² 湘南工科大学 機械工学科³ 東京大学大学院 工学系研究科

溶接部における強度安全性維持における重要な問題として、低温割れが挙げられる。低温割れは溶接部冷却後に発生する残留応力と、溶接金属中に存在する水素の凝集により発現する水素脆化が原因とされている。特に金属中の水素拡散・凝集挙動の時系列変化を把握することが重要であるが、水素拡散の様子を実験的に観察することは非常に困難であることから、数値計算による予測が工学的に重要である。本研究では、著者らが新たに開発した熱伝導-熱応力-局所応力誘起水素拡散連成解析を用いて、予熱を含んだ y 形溶接部の冷却過程における水素拡散・凝集挙動を解析するとともに、数値解析の安定条件についての考察を行った。また、長時間解析に適応するため、本解析プログラムの高速化についても検討した。

記号説明

l_0	Length of analytical model	$\bar{\sigma}$	Equivalent stress
C	Hydrogen concentration	σ_{ys}	Yield stress
C_0	Hydrogen concentration in atmosphere	H_p	Work hardening coefficient
D	Diffusion coefficient (= $D_0 \exp(-Q/RT)$)	$\bar{\epsilon}_p$	Equivalent plastic strain
D_0	Diffusion constant independent of temperature	c_1, α^*, m_1	Constants
T	Absolute temperature	h	Hydrogen transfer coefficient
T_{out}	Temperature in atmosphere	t_c	Time of hydrogen diffusion
Q	Activation energy	t_h	Time of heat transfer
R	Gas constant	ρ	Density
ΔV	Volume change due to accommodation of a hydrogen	c	Specific heat
σ_p	Hydrostatic stress	k	Heat conductivity
E	Young's modulus	H	Heat transfer coefficient
ν	Poisson's ratio	h_T	= H/k
σ_{ys}	Yield stress	$T\alpha$	Thermal expansion coefficient

1. 緒言

構造物の安全性を確保する上で、溶接部の信頼性確保は非常に重要である。溶接部における強度安全性維持における重要な問題として、低温割れが挙げられる。低温割れは溶接部冷却後に発生する残留応力と、溶接金属中に存在する水素の凝集により発現する水素脆化が原因とされている [1]。低温割れを防ぐ為に、母材を予め加熱してから溶接を行う予熱処理が施される。これは鋼中の水素拡散を促進し、溶接部の水素量を減らすことが狙いである。しかし、溶接部冷却過程における水素凝集挙動には、鋼種、応力集中、予熱温度など様々な要因が複雑に影響するため適切な予熱条件を設定するのが困難である。特に金属中の水素拡散・凝集挙動の時系列変化を把握することが重要であるが、水素拡散の様子を実験的に観察することは非常に困難であることか

ら、数値計算による予測が工学的に重要である。

著者らはこれまで、 α マルチプリケーション法[2,3] を組み入れた熱伝導-熱応力-局所応力水素拡散連成解析プログラムを開発し、y形溶接構造を対象として溶接部の冷却時における水素拡散・凝集挙動の解析を行ってきた[4~6,8]。しかし、溶接部の冷却のような急激な温度変化に起因する応力変動を伴う解析の場合、拡散方程式の一次微分項において振動解を誘起する可能性があるため、安定な数値解を得られる条件についても考慮する必要がある[6, 7]。著者の一人は、この影響を除くために $\Delta t / (\Delta L)^2 < \lambda_c$ (t :時間、 L :位置、 λ_c :収束度限界パラメータ)なる条件を導入した[2,3]。

本研究では、これまで開発してきた熱伝導-熱応力-局所応力水素拡散連成解析プログラムを用いて、様々な予熱温度におけるy形溶接構造の水素輸送挙動を解析するとともに、数値解析安定条件のために、 $\Delta t / (\Delta L)^2 < \lambda_c$ の効果を検討した。また、長時間解析に適応するため、本解析プログラムの高速化についても検討した。

2. 熱伝導-熱応力-水素拡散連成解析 [4~6,8]

溶接部における冷却時の水素拡散挙動を解析するため、著者らは熱伝導、熱応力、応力誘起水素拡散を連成した解析プログラムを開発してきた。本解析は、応力解析を有限要素法 (FEM)、熱伝導と拡散解析を有限差分法 (FDM)で行う、FEM-FDM法[2,9]を用いている。以下に解析手法を示す。まず熱伝導をFDMで計算し、その後、FEMの各節点へ温度を補間する。次に、補間された温度を用いて各節点の熱応力を計算する。その後、得られた熱応力を差分格子点へ補間し、応力誘起水素拡散解析を行う。これらの計算を連続的に繰り返すことで冷却時における水素拡散解析を実施した。本解析の流れを Fig. 1 に示す[4,5]。

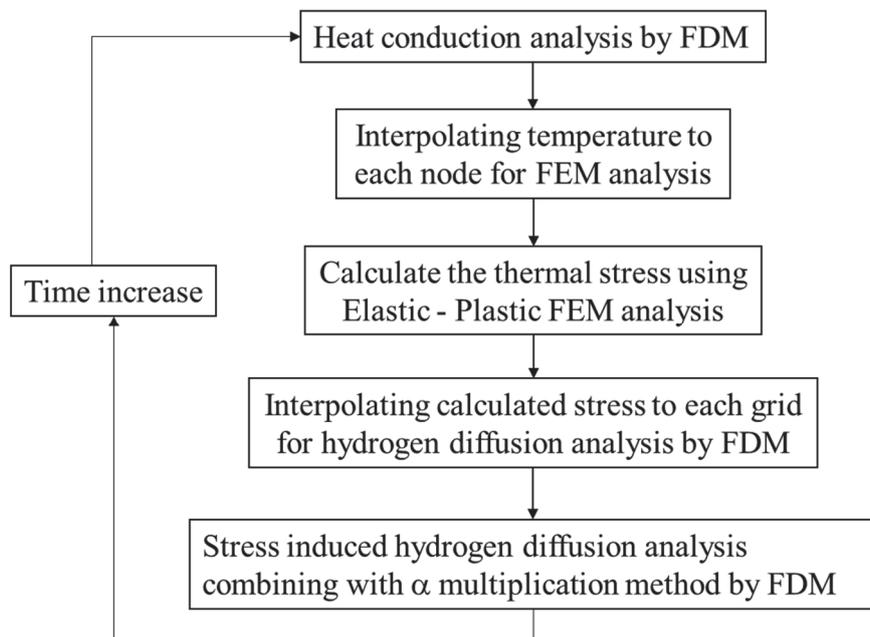


Fig. 1 Flowchart of coupled analysis of heat conduction-thermal stress-hydrogen diffusion [4,5]

2.1 解析モデルおよび境界条件

解析モデルは JIS 規格[10]に基づいて、溶金 (WM)、母材(BM)、熱影響部 (HAZ: Heat Affected Zone) から成る y形溶接構造を作成した。解析モデルを Fig. 2 に示す。本解析は 2次元解析で行い、FEMの総節点数は 6,144、総要素数は 11,713 であり、FDMの総格子点数は 1,500 である。応力解析に用いた物性値を Table 1 に示す。ヤング率および降伏応力は Fig. 3、Fig. 4 に示すように、温度に対応するようにしている [11]。高温からの冷却を考え、降伏応力はマルテンサイトの物性値を用いた。また、降伏応力は式(1)の条件にて解析を行った [12]。

$$\sigma_{ys(WM, BM)} = 0.8\sigma_{ys(HAZ)} \quad (1)$$

線膨張係数は、一般的な鉄の値を用いた。ヤング率、ポアソン比、線膨張係数は WM や BM といった組織による違いはないものとし、応力解析は平面ひずみ状態にて行った。水素拡散および熱伝導解析の境界条件は Fig. 5 に示すとおりである。

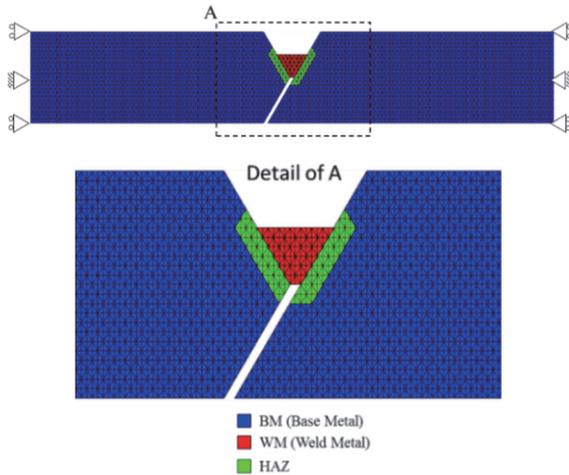


Fig. 2 Analytical model.

Table 1 Material properties for FEM analysis.

	E [GPa]	ν	σ_{ys} [MPa]	H_p [GPa]	$T\alpha$ [1/K]
WM	ref. [Fig. 3]	0.3	ref. [Fig. 4]	$0.01 \times E$	1.2E-05
HAZ					
BM					

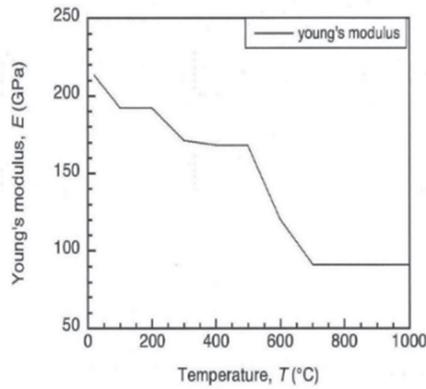


Fig. 3 Temperature dependence of Young's modulus [11].

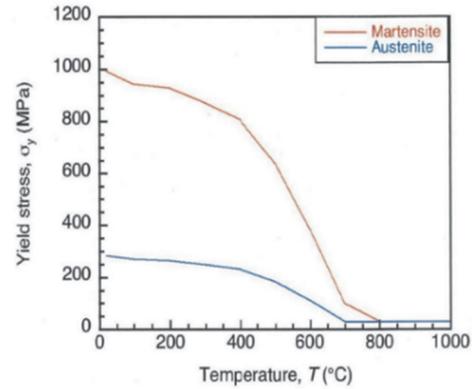
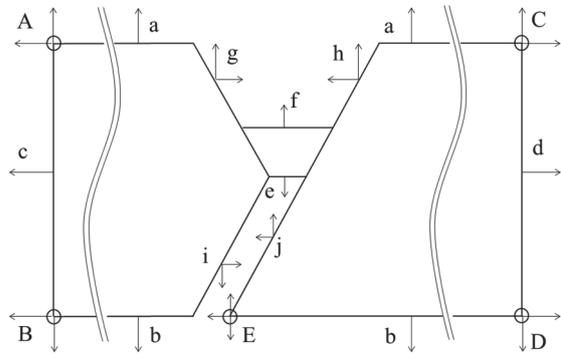


Fig. 4 Temperature dependence of yield stress [11].



$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial x} &= h(C - C_0), \quad \frac{\partial T}{\partial x} = h_r(T - T_{out}) : A, B, E, c, h, j \\ \frac{\partial C}{\partial x} &= h(C_0 - C), \quad \frac{\partial T}{\partial x} = h_r(T_{out} - T) : C, D, d, g, i \\ \frac{\partial C}{\partial y} &= h(C - C_0), \quad \frac{\partial T}{\partial y} = h_r(T - T_{out}) : B, D, b, e, i \\ \frac{\partial C}{\partial y} &= h(C_0 - C), \quad \frac{\partial T}{\partial y} = h_r(T_{out} - T) : A, C, a, f, g, h, j \\ \frac{\partial C}{\partial y}, \quad \frac{\partial T}{\partial y} &= 0 : E \end{aligned}$$

Fig. 5 Boundary conditions of heat conduction and hydrogen diffusion analysis.

2.2 熱伝導解析

熱伝導解析には式(2)を用いた。

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t_h} = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) \quad (2)$$

式(2)を Crank-Nicolson 法で離散化した後に、SOR (Successive-Over-Relaxation)法で解いた。

初期温度は、WM を 1500°C とし、予熱無しの場合、BM および HAZ は室温(20°C)とした。予熱条件では BM および HAZ を 50、75、100、125、150°C とした。本解析では WM が 1500°C からの冷却のみを模擬した解析となっている。熱伝導解析に用いた物性値を Table2 に示す[13]。

Table 2 Material properties used for heat transfer analysis [13].

k	0.054	J/(°C·mm·sec)
a	12.0	mm ² /sec
$\rho \cdot c$	4.53×10^{-3}	J/(°C·mm ³)
H	2.09×10^{-5}	J/(°C·mm ² ·sec)

2.3 応力解析

応力解析には 2 次元弾塑性有限要素法解析プログラム EPIC-I に熱応力解析のルーチンを組み入れた[4,14]。応力ひずみ則は熱伝導に伴う温度変化に対応するようにし、降伏・塑性変形は温度に対応した応力ひずみ則に従って進行するようにした。弾性域ではフックの法則に従い、塑性域では式(3)に示す加工硬化則を用いた。本解析では $m_f=1$ とする線形加工硬化則を用いている。

$$H_p = \frac{d\bar{\sigma}}{d\bar{\varepsilon}_p} = m_1 c_1 (\alpha^* + \bar{\varepsilon}_p)^{m_1 - 1} \quad (3)$$

2.4 水素拡散解析

水素拡散の基礎式 [15]を式(4)に示す。

$$\frac{\partial C}{\partial t_c} = \nabla \left(D \nabla C - DC \frac{\Delta V}{RT} \nabla \sigma_p \right) \quad (4)$$

第 1 項は濃度勾配による拡散項、第 2 項は応力勾配による拡散項をそれぞれ示す。ここで、右辺第 2 項の値は第 1 項よりも低い値となるため、濃度勾配が存在する場合は第 1 項の影響のみが発現し、第 2 項の影響が発現しないことが報告されている[2,3,9]。この場合、各項の影響が同程度となるように重み係数を導入することで、応力誘起の拡散・凝集効果が発現することが明らかとなっている。本手法は α マルチプレケーション法として提案されている[2,3,9]。式(4)を展開し、各項に重み係数 α を導入すると式(5)のようになる。

$$\frac{\partial C}{\partial t_c} = \alpha_1 D \nabla^2 C - \alpha_2 \frac{D \Delta V}{RT} \nabla C \nabla \sigma_p - \alpha_3 \frac{D \Delta V}{RT} C \nabla^2 \sigma_p \quad (5)$$

本解析では、各項の影響が同程度となるように $\alpha_1:\alpha_2:\alpha_3=1:1000:5$ とした。本解析は、温度変化を考慮した解析であるため、拡散係数や熱応力も位置(x, y)の関数となる。これを考慮し、式(5)について、式(6a)-(6e)を用いて無次元化すると式(7)のようになる。これを Crank-Nicolson 法で離散化した後に、SUR (Successive-Under-Relaxation)法を用いて数値解析を行った[2,3]。

$$x^+ = \frac{x}{l_0} \quad (6a)$$

$$y^+ = \frac{y}{l_0}, \quad (6b)$$

$$C^+ = \frac{C}{C_0}, \quad (6c)$$

$$D^+ = \frac{D}{D_0}, \quad (6d)$$

$$t_c^+ = \frac{t_c D_0}{l_0^2}. \quad (6e)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C^+}{\partial t_c^+} = & \alpha_1 \left\{ D^+ \left(\frac{\partial^2 C^+}{\partial x^{+2}} + \frac{\partial^2 C^+}{\partial y^{+2}} \right) + \left(\frac{\partial D^+}{\partial x^+} \frac{\partial C^+}{\partial x^+} + \frac{\partial D^+}{\partial y^+} \frac{\partial C^+}{\partial y^+} \right) \right\} \\ & - \frac{\Delta V}{R} \left[\alpha_2 \left\{ \frac{C^+}{T} \left(\frac{\partial D^+}{\partial x^+} \frac{\partial \sigma_p}{\partial x^+} + \frac{\partial D^+}{\partial y^+} \frac{\partial \sigma_p}{\partial y^+} \right) + \frac{D^+}{T} \left(\frac{\partial C^+}{\partial x^+} \frac{\partial \sigma_p}{\partial x^+} + \frac{\partial C^+}{\partial y^+} \frac{\partial \sigma_p}{\partial y^+} \right) \right\} \right. \\ & \left. - \frac{D^+ C^+}{T^2} \left(\frac{\partial T^+}{\partial x^+} \frac{\partial \sigma_p}{\partial x^+} + \frac{\partial T^+}{\partial y^+} \frac{\partial \sigma_p}{\partial y^+} \right) \right] + \alpha_3 \frac{D^+ C^+}{T} \left(\frac{\partial^2 \sigma_p}{\partial x^{+2}} + \frac{\partial^2 \sigma_p}{\partial y^{+2}} \right) \end{aligned} \quad (7)$$

係数 α の物理的意味については、濃度勾配および応力勾配を駆動力とする拡散過程において、その駆動ポテンシャルの相違に起因する両者の拡散係数のエントロピーの比を表すものとされている[16]。 α を考慮しない($\alpha=1$ とする)ことは、異なる駆動ポテンシャルの下での拡散過程における原子配列の相違に起因するエントロピー変化を同じと仮定していることとなる。 α はこのようなエントロピー変化を考慮した係数である。

また初期条件として、溶金内の水素濃度を $C/C_0=3.0$ とし、それ以外を $C/C_0=1.0$ とした。本解析で用いた物性値を Table 3 に示す[17,18]。

Table 3 Material properties used for hydrogen diffusion analysis[17,18].

D_0	5.54×10^{-6}	m/sec
Q	26.81×10^3	J/mol
R	8.314	J/K mol
ΔV	2.0×10^{-6}	m^3/mol

3. 解析結果

3.1 予熱を伴わない場合の冷却過程における水素凝集挙動

熱伝導-熱応力-水素拡散連成解析を用いた先行研究の結果を Fig. 6 に示す [4,5]。Fig. 6 に示すように本解析手法から得られる水素分布は、溶接底鈍角側に水素が凝集した。この結果は、Fig. 7 に示す実際の y 形溶接割れ試験で得られるき裂発生位置と良い一致を示す[19]。

次に、Fig. 8 に示す溶接底鈍角側を含む $x=62$ 、 $y=6$ 座標における静水圧応力分布の時系列変化を Figs. 9-10 にそれぞれ示す。これらの結果から、静水圧応力は時間経過とともに増加し、溶接底鈍角側において極大値を示した。このことから、水素は静水圧応力の極大値領域に凝集することが示された。

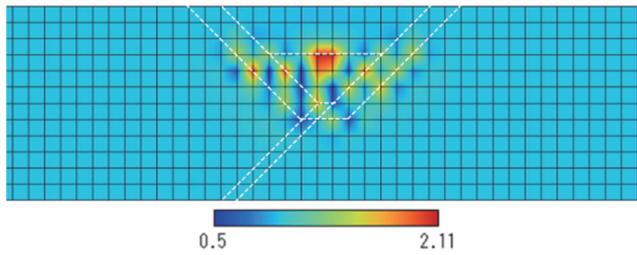


Fig. 6 Hydrogen concentration distribution after cooling obtained by analysis[4,5].

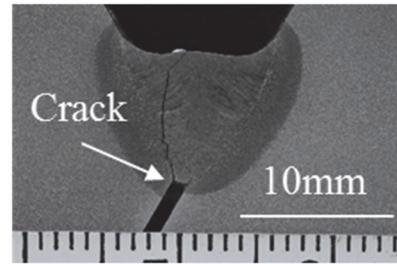


Fig. 7 Result of y-grooved weld cracking test [19].

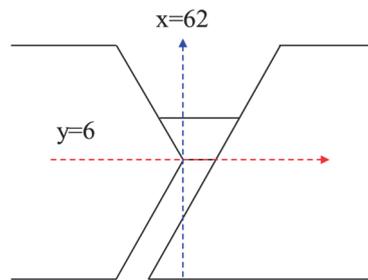


Fig. 8 Collection position of hydrogen and hydrostatic stress .

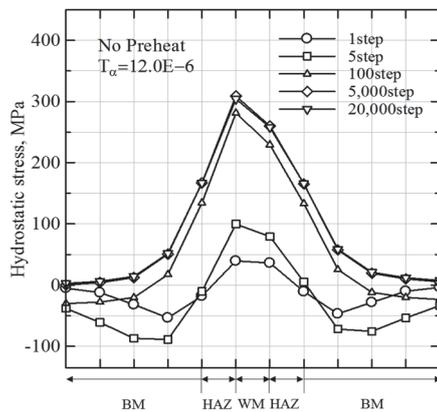


Fig. 9 Time sequential change of hydrostatic stress distributions at y=6 [4,5].

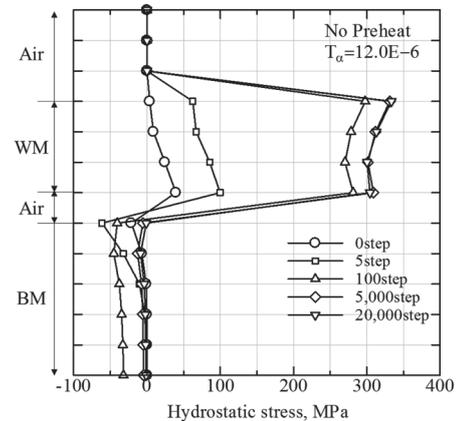


Fig. 10 Time sequential change of hydrostatic stress distribution at x=62 [4,5].

3.2 冷却時の静水圧応力の時系列変化に及ぼす予熱の効果

2.2 節で示したように溶接部冷却過程において、水素は溶接底部の鈍角側に凝集した。そこで、それぞれの予熱条件での溶接底部鈍角側における静水圧応力の時系列変化を Fig. 11 に示す。Fig. 11 より、予熱温度の上昇に伴って静水圧応力の値は低下した。また、時間経過に伴う静水圧応力の低下率は予熱温度が上昇すると大きくなることがわかった。

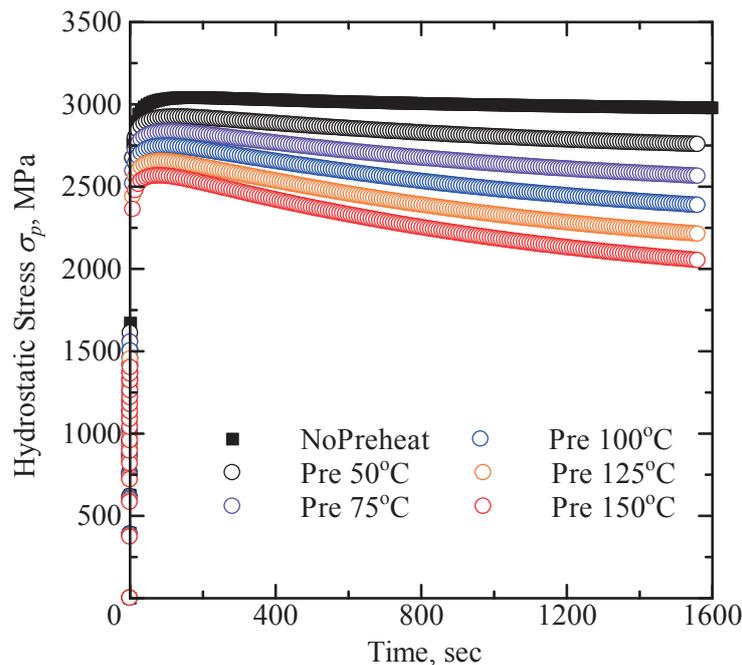


Fig. 11 Time sequential change of hydrostatic stress at the bottom of weld metal

3.3 冷却時の水素濃度の時系列変化に及ぼす予熱の効果と数値解の安定性

次に、溶接底部鈍角側におけるそれぞれの予熱温度での水素濃度の時系列変化を Fig. 12 に示す。Fig. 12 より、予熱温度の上昇に伴い、水素凝集濃度のピーク発生時間が早くなることが分かった。冷却後の水素濃度は予熱温度 100°C において最も低くなり、100°C 以上では逆に増加することがわかった。また、予熱 100°C 以上では、水素濃度の時系列変化は若干不安定な挙動を示した。この原因について、横堀らは拡散方程式の数値解の安定性（振動解の制御）について次のように述べている [2,3,20]。Clank-Nicolson 法は、位置と時間の刻み幅に関する制限はないとされているが、微分方程式の性質によっては収束するものの、Fig. 13 に示すように振動を示す場合がある。そこで、解が振動せず安定に収束する条件として、式(3) の条件を満たすことが必要であると指摘されている。ここで t^+ は無次元化時間、 r^+ は無次元化距離である。

$$\lambda = \frac{\Delta t^+}{(\Delta r^+)^2} \leq \lambda_c. \quad (3)$$

そこで、これまでの解析では $\lambda_c=0.3\sim 0.4^{(2,3)}$ として計算していたところを、 $\lambda_c=0.1$ に変更して再解析を行った。 $\lambda_c=0.1$ として水素濃度分布の時系列変化を解析したものを Fig. 14 に示す。Fig. 14 より、予熱 100°C 以上の条件にて、 $t=400\sim 800\text{sec}$ 付近で見られた不安定な挙動が改善されたことがわかる。このことから、式(3) に示す λ_c の条件を適切に考慮することで振動解を抑制し、より安定な解析結果を得ることができた。

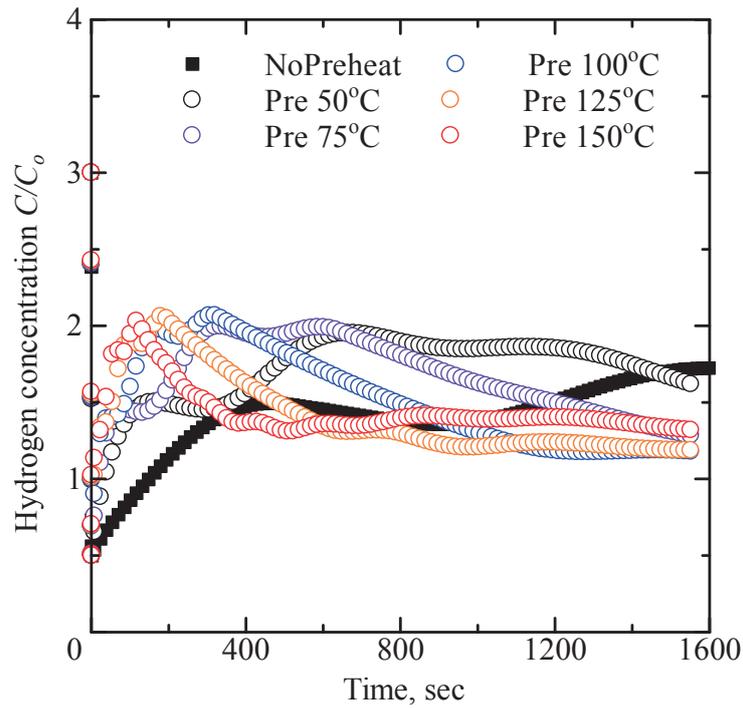
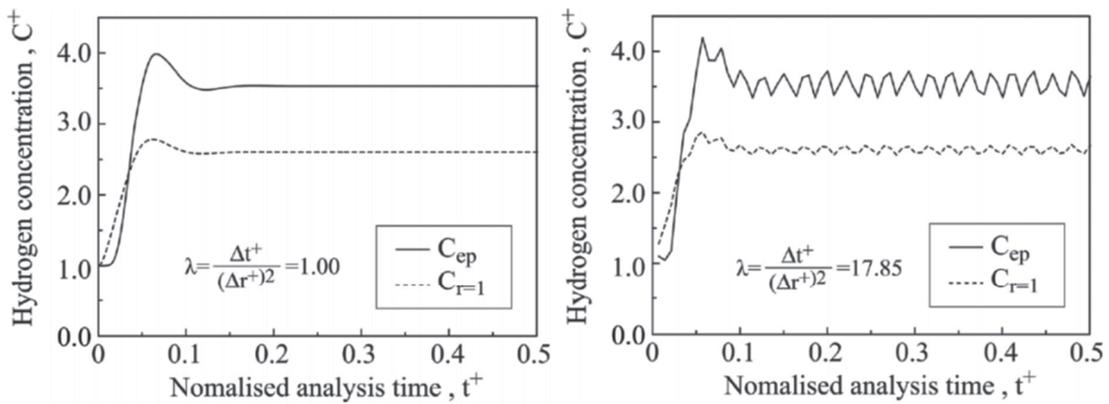


Fig. 12 Time sequential change of hydrogen concentration at the bottom of weld metal ($\lambda_c=0.3$)



(a) Numerical results under stable condition (λ is low.)

(b) Numerical results under unstable condition (λ is high.)

The time sequential characteristic of hydrogen concentration at the elastic-plastic boundary (C_{ep}) and at the crack tip ($C_{r=1}$).

Fig. 13 Example of oscillatory solution for stress induced hydrogen diffusion analysis[20]

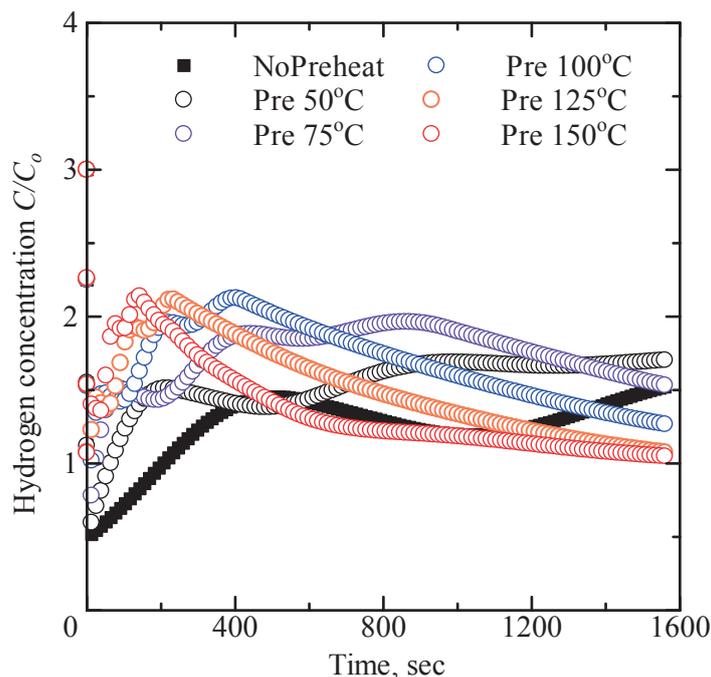


Fig. 14 Time sequential change of hydrogen concentration at the bottom of weld metal ($\lambda_c=0.1$)

4. 本プログラムによる数値解析高速化に向けて

溶接部冷却時の水素凝集挙動に及ぼす予熱の効果は、実際には 24 時間以上の経過を見る必要があることから、長時間の計算に適応するために数値解析の高速化が望まれる。

本プログラムは、1) 熱伝導解析、2) 局所応力誘起水素拡散解析、3) 有限要素法弾塑性熱応力解析の連成解析を行っている[4~6,8,21]。1) および 2) は、差分法により離散化された多元連立方程式を SUR 法で解いており、3) は共役傾斜法（反復法）で多元連立方程式を解いている。また、2) は ∇C なる 1 次微分項が含まれており、振動解を生じる可能性があるため、3.3 節で述べたように、 $\lambda < \lambda_c$ なる条件と SUR 法を用いている。本手法は差分法と有限要素法の特徴を生かして両者をハイブリッドさせたプログラムであるが、差分格子点と有限要素法の節点との間での温度および応力のデータ相互補間を行うプログラムなど複雑なアルゴリズムも内在している。また、連成解析であることから、1) と 2) および 3) ではそれぞれに同じ冷却時間での値が必要となることから、両者での時間補間も行っている。

そこで、本プログラムの各サブルーチンで消費される CPU 時間を調べた。その結果、本プログラムでの各サブルーチンでの計算時間は、ほぼ非対角行列を共役傾斜法で解く 3) の部分で費やされていることが分かった（90%以上）。有限要素熱応力解析では、行列の非零要素のみを記憶させて解析するという効率化を図って、当初から反復法である共役傾斜法を用いているが、ベクトル化が困難である。そのため、スーパーコンピュータを使用して、計算の高速化をはかり、長時間の水素凝集挙動を再現するためには、この部分を計算機が提供するライブラリの利用も含めた、ベクトル化や並列化に適したソルバーにして 3) の解析プログラムの構築を図っていくことが必要と考える。

そのためには、連立一次方程式の部分を LAPACK/BLAS に置き換え、メモリ割り当てを静的割当（スタック使用）から動的割当（ヒープ使用）に変更することにより大規模計算に対する体制を整え、高速化・並列化とより多くのメモリを利用できるように改良することが必要と考える。

5. 結言

本研究では、溶接部冷却過程における水素拡散解析を用いて、y形溶接構造の水素凝集挙動を解析し、以下の結言を得た。

1) 熱伝導解析、熱応力解析および局所応力誘起水素拡散解析を連成させるプログラムを開発して、溶接部の冷却時における水素凝集挙動時系列特性に及ぼす予熱の効果を明らかにした。

2) 水素拡散方程式には、 \sqrt{C} なる1次微分項が含まれており、振動解を生じる可能性があるために、 $\lambda < \lambda_c$ なる条件とSUR法を用いている。本手法は差分法と有限要素法の特徴を生かして両者をハイブリッドさせたプログラムであるが、差分格子点と有限要素法の節点との間での温度および応力のデータ相互補間を行うプログラムなど複雑なアルゴリズムも内在している。計算時間の大半は非対角行列を共役傾斜法で解く有限要素熱応力解析の部分で費やされており、この部分の改善により計算の高速化が期待できる。

謝辞

本研究は、東北大学サイバーサイエンスセンターとの共同研究「マルチマテリアルにおける水素拡散行数挙動に及ぼすポテンシャル誘起駆動力特定解析プログラムの開発」の一環として実施されました。また、本研究は、総合科学技術・イノベーション会議のSIP（戦略的イノベーション創造プログラム）「革新的構造材料」（管理法人：JST）によって実施されました。

参考文献

- [1] N. Yurioka and T. Kasuya, *Quarterly Journal of Japan Welding Society*, Vol. 13, No. 3, pp.347-357 (1995).
- [2] A. T. Yokobori, Jr., T. Nemoto, K. Satoh and T. Yamada, *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 55, No. 1, pp. 47-60 (1996).
- [3] A. T. Yokobori, Jr., T. Ohmi, T. Murakawa, T. Nemoto, T. Uesugi and R. Sugiura, *Strength, Fracture and Complexity*, Vol. 7, No. 2, pp. 215-233 (2011).
- [4] G. Ozeki, A. T. Yokobori, Jr., T. Ohmi, T. Kasuya, N. Ishikawa, S. Minamoto and M. Enoki, *Proceedings of the ASME 2018 Pressure Vessels and Piping Conference*, PVP2018-84178.
- [5] G. Ozeki, A. T. Yokobori, Jr., T. Ohmi, T. Kasuya, N. Ishikawa, S. Minamoto and M. Enoki, *Advanced Materials Letters*, Vol. 9, No. 10, pp.677-683 (2018).
- [6] A. T. Yokobori, Jr., G. Ozeki, T. Ohmi, T. Kasuya, N. Ishikawa, S. Minamoto and M. Enoki, *Materials Transactions*, 60,2(2019),pp.222-229.
- [7] S.V. Patankar, Numerical heat transfer and fluid flow, Trans:Y. Mizutani and M. Katsuki, p. 70, Morikita Pub. (1985), in Japanese.
- [8] 尾関郷, 横堀壽光, 大見敏仁, 糟谷正, 石川信行, 源聡, 榎学, 日本材料強度学会学術講演会講演論文集, pp.19-28 (2019).
- [9] T. Ohmi, A. T. Yokobori, Jr. and K. Takei, *Defect and Diffusion Forum*, Vol. 326-328 (2012), pp.626-631.
- [10] JIS Z 3158, Method of y-groove weld cracking test (2016).
- [11] Y. Mikami, N. Kawabe, N. Ishikawa and M. Mochizuki, *Quarterly Journal of the Japan Welding Society*, Vol. 34, No. 2, pp.67-80 (2016), (in Japanese).
- [12] K. Satoh, T. Terasaki and Y. Yamashita, *J. of the Japan Welding Society*, Vol. 48, No. 7(1979), pp.504-509 (1979), (in Japanese).
- [13] T. Kasuya, N. Yurioka, *Welding Journal*, Vol.72, No.2, p.107 (1993).
- [14] Y. Yamada, Sosei - Nendansei, pp. 180-219, Baifu-kan Pub. (1980), (in Japanese).
- [15] Oriani, R. A., Stress Corrosion Cracking and Hydrogen Embrittlement of Iron Base Alloys, NACE-5, pp. 351-358 (1973).
- [16] A. T. Yokobori Jr. and T. Ohmi, *Strength, Fracture and Complexity*, Vol. 8, No. 2, pp.117-124 (2014).
- [17] T. Kasuya, Y. Hashiba, H. Inoue, S. Nakamura, T. Takai, *Welding in the world*, Vol.57, No.4, p.581 (2013).
- [18] Van Leewen, H. P., *Corrosion*, Vol. 31, No. 2, pp. 42-50 (1975).
- [19] N. Ishikawa, SIP meeting at the University of Tokyo, Dec. 2017.
- [20] 横堀壽光, 大見敏仁, 根本剛直, 上杉智治, SENAC 東北大学大型計算機センター広報, Vol.42, No. 4, pp.27-35 (2009).
- [21] A. T. Yokobori, Jr., G. Ozeki, T. Ohmi, T. Kasuya, N. Ishikawa, S. Minamoto and M. Enoki, *Proceeding of the ICF14*, CDrom (2017)

[大規模科学計算システム]

鍵ペアの作成とログイン方法

情報部情報基盤課 共同研究支援係 共同利用支援係

1. はじめに

本センターのシステムは、セキュリティ対策として、公開鍵認証方式によるSSH接続を採用しています。また、フロントエンドサーバは、ログインサーバを経由しなければログインできない構成としています。

本稿では、公開鍵認証方式で使用する鍵ペアの作成と各サーバのログイン方法についてご紹介します。解説では以下のターミナルソフトを使用する例をご紹介します。

(Windows の場合) Windows PowerShell
(macOS/Linux の場合) ターミナル

本センターのシステムをはじめて利用する方は、以下の手続きが必要です。

- (1) 利用者番号の取得（利用申請：<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/apply-for-use/>）
- (2) 鍵ペアの作成（4章）

以前のシステムを利用していた方は、(1)(2)の手続きは不要です。以前使用していた利用者番号および鍵ペアをそのままご利用いただけます。5章からお読みください。

2. ログイン認証方式

表 1 に、各サーバのログイン認証方式を示します。

表 1 各サーバのログイン認証方式

サーバ名	用途	ログインホスト名	認証方式
ログインサーバ	フロントエンドサーバの入口 (踏み台サーバ)	login.cc.tohoku.ac.jp	公開鍵
フロントエンドサーバ	計算機の利用 (コンパイル、ジョブ実行、等)	(※1)	公開鍵またはパスワード
データ転送サーバ	ストレージシステムとの大容量のデータ転送	file.cc.tohoku.ac.jp	公開鍵
HPCI 用ログインノード	HPCI、HPCI-JHPCN ユーザ専用ログインノード	hpcif.cc.tohoku.ac.jp	公開鍵
-	センター内施設の利用(※2)	-	パスワード

(※1) フロントエンドサーバは、ログインサーバからしかログインできません。本稿では多段 SSH による接続方法を解説します。

(※2) 本センター内の施設（大判カラープリンタ、利用者端末、講習会端末）はパスワード認証でご利用いただけます。利用にあたり、秘密鍵を持参する必要はありません。

3. 鍵ペアの作成からログインまでの流れ

図 1 に、鍵ペア作成からログインまでの流れを示します。①は 4 章、②③は 5 章で詳しく解説します。

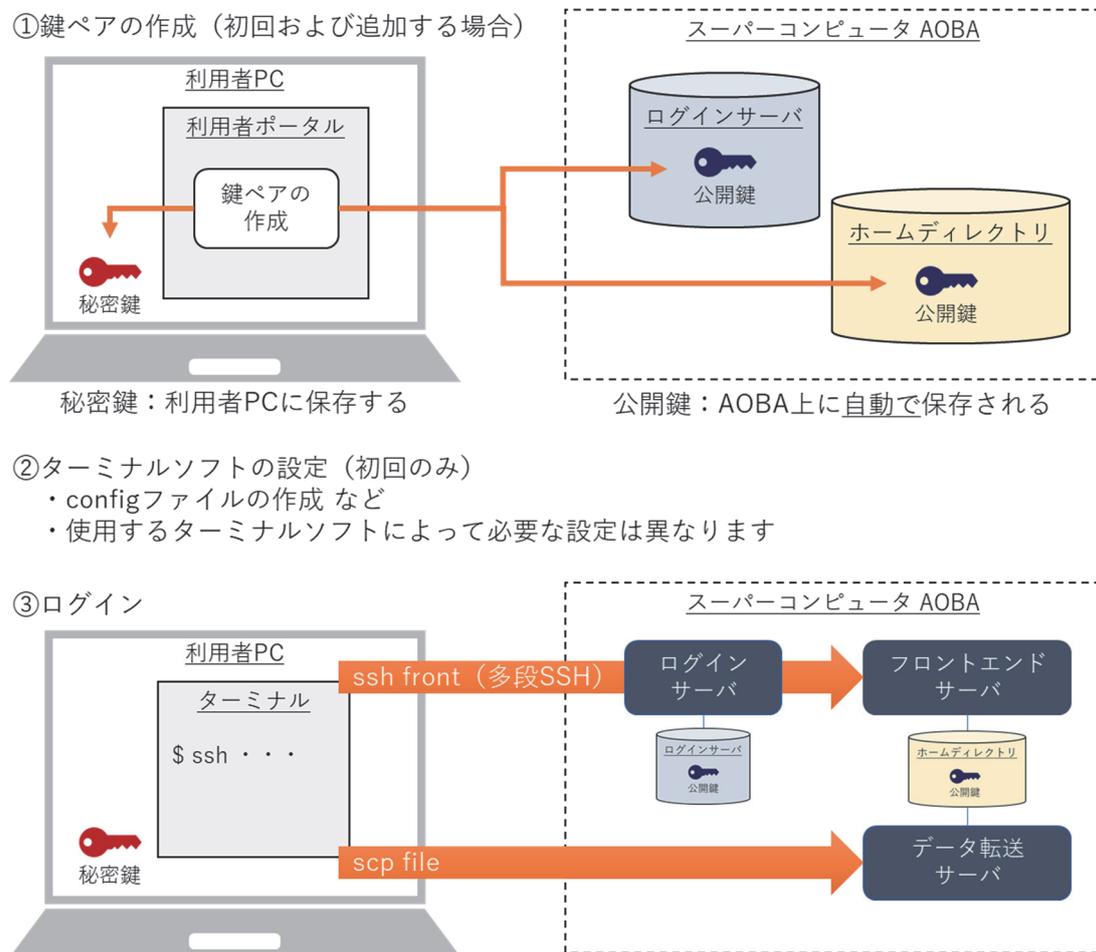


図 1 鍵ペア作成からログインまでの流れ

① 鍵ペアの作成（初回ログイン時、および、ログイン端末を追加する場合）

利用者ポータルで鍵ペアを作成します。作成された秘密鍵は、利用者のローカル PC に保存します。公開鍵は、スーパーコンピュータ AOBA のホームディレクトリ上に自動で保存されます。

② ターミナルソフトの設定（初回ログイン時）

各サーバにログインするための設定を行います。使用するターミナルソフトによって必要な設定は異なります。

③ ログイン

利用者のローカル PC に保存した秘密鍵を使ってログインします。フロントエンドサーバは、ログインサーバを経由して多段 SSH でログインします。

4. 公開鍵認証方式で使用する鍵ペアの作成

4.1. 公開鍵認証方式を使用する上での注意事項

以下の注意事項を必ず守ってください。守らない場合、不正アクセス（不正ログイン、クライアントのなりすまし、暗号化された通信の暴露、他サーバへの攻撃、等）のリスクが非常に高まり、大変危険です。ご注意ください。

- ・ パスフレーズなしの秘密鍵を使用しないこと
- ・ 秘密鍵、パスフレーズを使いまわさないこと
- ・ 秘密鍵を持ち出さないこと（メールに添付しない、USB メモリ等に保存しない）
- ・ 秘密鍵をスーパーコンピュータ AOBA のホームディレクトリに保存しないこと
- ・ 公開鍵と秘密鍵の鍵ペアを同一ノード上に保存しないこと

4.2. 鍵ペアの作成（初回ログイン時、および、ログイン端末を追加する場合）

○初回ログイン時

鍵ペアの作成は、利用者ポータルで行います。

(1) 以下の URL 先から利用者ポータルを開きます。

利用者ポータルには、利用者番号とパスワード（※）でログインします。

利用者ポータル：<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/portal/>

(2) 「SSH 公開鍵登録」ボタンをクリックします。

(3) 利用者ポータルの画面の説明に従い、鍵ペアを作成します。

（パスフレーズを設定し、鍵生成・登録ボタンをクリック）

(4) 作成された秘密鍵を利用者のローカル PC に保存します。保存先は以下を推奨します。

フォルダがない場合は新規作成します。

（Windows の場合） C:¥Users¥ユーザ¥.ssh

（macOS/Linux の場合） ~/.ssh

公開鍵は、ホームディレクトリ（~/ssh/authorized_keys）に自動で保存されます。

※利用者ポータルで使用するパスワードの変更方法は、6 章を参照してください。

○別の PC からログインする場合（ログイン端末を追加する場合）

既存の秘密鍵を使いまわすのではなく、ログイン端末ごとに鍵ペアを作成してください。初回ログイン時と同じ手順で、新しい鍵ペアを追加します。

5. 各サーバのログイン方法

5.1. ターミナルソフトの設定（初回ログイン時）

利用者のローカル PC 上で、ターミナルソフトの設定を行います。

以降の解説は、次のフォルダを「.ssh フォルダ」と呼び、秘密鍵を「id_rsa_cc」というファイル名で.ssh フォルダに保存した場合とします。

(Windows の場合) C:¥Users¥ユーザ¥.ssh

(macOS/Linux の場合) ~/.ssh

各ログインホストのホスト名は、次の文字列で設定するものとして解説します。ホスト名には任意の文字列を設定することができます（他の設定との重複は不可）。他の文字列を設定した場合は、以降の解説におけるホスト名を読み替えてください。

(ログインサーバ) login

(フロントエンドサーバ) front

(データ転送サーバ) file

(HPCI 用ログインノード) hpcif

(1) macOS/Linux の場合は、秘密鍵のパーミッションの変更（600 に設定）が必要です。ターミナルソフトを起動し、以下のコマンドを実行します。

```
$ chmod 600 ~/.ssh/id_rsa_cc
```

以降は Windows、macOS/Linux 共通です。

(2) .ssh フォルダの「config」というファイルをテキストエディタで開きます。ファイルがない場合は新規作成します。拡張子はつけません。

（フォルダの設定を「拡張子を表示しない」にしている場合、意識せずに拡張子付きのファイルを作成している可能性があります。config ファイルに拡張子がついていると、ログインできません。ご注意ください）

(3) config ファイルに以下の設定を記述します。太字下線の部分は、ご自身の環境に合わせて読み替えてください。

○フロントエンドサーバを利用するための設定 (※)

```
# ログインサーバの設定 (ホスト名を”login”とする場合)
Host login                                # ホスト名を指定
HostName login.cc.tohoku.ac.jp           # ログインホスト名を指定
User 利用者番号                          # 利用者番号を指定
IdentityFile ~/.ssh/id_rsa_cc           # 秘密鍵の保存場所とファイル名を指定

# フロントエンドサーバの設定 (ホスト名を”front”とする場合)
Host front
HostName front.cc.tohoku.ac.jp
User 利用者番号
ProxyCommand ssh -CW %h:%p login      # login 経由で多段 SSH する設定
IdentityFile ~/.ssh/id_rsa_cc
```

○データ転送サーバを利用するための設定

```
# データ転送サーバの設定 (ホスト名を”file”とする場合)
Host file
HostName file.cc.tohoku.ac.jp
User 利用者番号
IdentityFile ~/.ssh/id_rsa_cc
```

○HPCI 用ログインノードを利用するための設定

```
# HPCI 用ログインノードの設定 (ホスト名を”hpcif”とする場合)
Host hpcif
HostName hpcif.cc.tohoku.ac.jp
User 利用者番号
IdentityFile ~/.ssh/id_rsa_cc
```

(※) Windows の場合、フロントエンドサーバへのログイン時に以下のようなエラーが出る場合があります。

```
$ ssh front
CreateProcessW failed error:2
posix_spawn: No such file or directory
```

エラーが出た場合は次の要領で **config** ファイルを書き換えてください。

[1] ターミナルソフトを起動し、以下のコマンドで **ssh** の絶対パスを調べる。

```
$ gcm ssh
CommandType  Name  Version  Source
-----
Application  ssh.exe  x.x.x    C:¥WINDOWS¥System32¥OpenSSH¥ssh.exe
```

[2] **config** ファイルの「ProxyCommand ssh …」の行の「ssh」の部分、絶対パス ([1] で「Source」に表示された文字列) に書き換える。

```
# 修正前
ProxyCommand ssh -CW %h:%p login
# 修正後
ProxyCommand C:¥WINDOWS¥System32¥OpenSSH¥ssh.exe -CW %h:%p login
```

5.2. フロントエンドサーバのログイン方法

ターミナルソフトを起動し、以下のコマンドを実行するとログインします。ホスト名を別の文字列で設定している場合は「front」の部分を読み替えてください。

```
$ ssh front
```

フロントエンドサーバは冗長構成になっており、自動的に **front1** または **front2** が選択されます。どちらにログインしても、動作は変わりません。

なお、フロントエンドサーバでは一定時間以上のプロセスは実行できません。また、大容量のデータ転送はシステムに高い負荷がかかります。大容量のデータ転送を行う場合は、データ転送サーバをご利用ください。

5.3. データ転送サーバの利用方法

データ転送サーバは、ログインして利用するのではなく、利用者のローカル PC 上から **scp** コマンドや **sftp** コマンドで利用します。詳しくは以下をご参照ください。

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

5.4. HPCI 用ログインノードのログイン方法

ターミナルソフトを起動し、以下のコマンドを実行するとログインします。ホスト名を別の文字列で設定した場合は「hpcif」の部分を読み替えてください。

```
$ ssh hpcif
```

5.5. ログインシェルの確認と変更

ログインシェルは、デフォルトでは `csch` が設定されています。設定の確認および変更は以下の手順で行います。ログインシェルの変更がシステム全体に反映されるまで、15 分程度かかります。

- (1) フロントエンドサーバにログインする。
- (2) 以下のコマンドを実行する。

○ログインシェルの確認

```
front1 $ fchsh (ログインシェルの確認)
Enter Password: (パスワードを入力)
loginShell: /bin/tcsh (現在のログインシェルが表示される)
```

○ログインシェルの変更

```
front1 $ fchsh /bin/bash (ログインシェルを/bin/bashに変更)
Enter Password: (パスワードを入力)
Changed loginShell to /bin/bash (ログインシェルが変更された)
```

6. パスワードの変更

利用者ポータルなどで使用するパスワードの変更は、以下の手順で行います。

- (1) 以下の URL 先から利用者ポータルを開きます。

利用者ポータルには、利用者番号とパスワードでログインします。

利用者ポータル : <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/portal/>

- (2) 「パスワード変更」 ボタンをクリックします。
- (3) 利用者ポータルの画面の説明に従い、新しいパスワードを設定します。
- (4) 以下で使用するパスワードが変更されます。
 - ・利用者ポータルへのログインパスワード
 - ・大判カラープリンタのプリンタサーバへのログイン
 - ・ログインシェルの変更時のパスワード

7. おわりに

本稿では、鍵ペアの作成とログイン方法についてご紹介しました。センターのシステムを安全にご利用いただければ幸いです。ご不明な点、ご質問等ございましたら、お気軽にセンター（利用相談）までお問い合わせください。

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

また、センターからのお知らせは、ウェブサイトにてご確認ください。

センターウェブサイト : <https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/>

[大規模科学計算システム]

ストレージシステムの利用法

情報部情報基盤課 共同研究支援係 共同利用支援係

1 はじめに

本稿では、スーパーコンピュータ AOBA のストレージシステムの利用法について紹介します。ストレージ環境にあるホームディレクトリと課題領域の容量確認方法と実行した結果ファイル等のデータ(ストレージ環境)をローカル PC へ転送する方法およびローカル PC からストレージ環境へ転送する方法について説明します。

2 ストレージ環境

2.1 ホームディレクトリ (uhome)

プログラムファイル等を置く自分専用のホームディレクトリになり、ScaTeFS マウントし、AOBA-A と AOBA-B の両方に共有しています。

ディレクトリ名： /uhome/利用者番号
クォータ (容量) 制限： 5TB

クォータ制限を超過した場合、新規の書き込みができなくなりますのでご注意ください。クォータ制限を下回るように容量を削減すれば再度書き込みが可能になります。

- ホームディレクトリの容量確認コマンド

```
front$ uquota
```

表示例

```
Disk quotas for user 利用者番号
Filesystem          used(KB)    quota(TB)
/uhome/利用者番号      4           5
```

ホームディレクトリの容量追加申請については、2.3 章をご参照ください。

2.2 課題領域 (/short/プロジェクトコード)

課題領域は事前申請となり、同一プロジェクトコードの利用者間で大規模なデータ容量を利用される領域になります。申請を希望される際は、ストレージ資源の兼ね合いもありますので、「利用相談」(<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/consultation/>) から事前にご連絡をお願いします。

容量については、申請されたディスク容量 (quota 値) になります。ホームディレクトリ同様に AOBA-A と AOBA-B の両方に共有しています。

課題領域の容量については、以下のコマンドの quota(TB) 部分をご確認お願いします。

- 課題領域の容量確認コマンド

```
front$ uquota -A プロジェクトコード
```

表示例

```
Disk quotas for project プロジェクトコード
```

Filesystem	used(KB)	quota(TB)
/short/プロジェクトコード	10	20

- 利用方法

- 同一プロジェクトコードの利用者間でデータを共有する。
- 対象ディレクトリ内で利用者がそれぞれの専用サブディレクトリ (パーミッション：700) を作成し使用する。

利用方法の一例

プロジェクトコード：xx200001 の場合

コマンド例①) プロジェクトコードの利用者間で share を作成しデータを共有

```
front$ cp ホームディレクトリデータ /short/xx200001/share/
```

コマンド例②) 利用者の専用サブディレクトリを作成し使用

```
front$ mkdir /short/xx200001/利用者番号
```

```
front$ chmod 700 /short/xx200001/利用者番号
```

```
front$ cp ホームディレクトリデータ /short/xx200001/利用者番号/
```

【留意事項】

- ファイル同期コマンド (rsync コマンド)、コピーコマンド (cp コマンド) を使用する際は、グループ権限を保持するオプションは設定せずにご利用ください。オプションを付けた場合、同一プロジェクトコード間のグループによる容量制限で正しく管理できなくなる恐れがあります。また、移動コマンド (mv コマンド) によるファイルの移動を行った場合、元のファイルのグループ権限が保持されてしまいますので、rsync コマンド、cp コマンドを利用するようにしてください。
- 課題領域を当年度までのご利用の際、翌年度はデータ保管を行っていません。猶予期間後、対象課題領域を削除しますので、ローカル PC のディスクへ移行を速やかに進めてください。

2.3 ストレージ申請

ファイル容量の追加は 1TB 単位から申請可能です。ホームディレクトリ、課題領域ともに利用負担金が発生しますので、詳しくは「利用負担金」(<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/charge/>) をご参照ください。

申請用紙は、「ストレージ容量申請書」(<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/application-form/>) を使い申請をお願いします。

3 データ転送方法

データ転送サーバへログインし、SSH による暗号化を行う scp(Secure CoPy), SFTP(Ssh File Transfer Protocol) を利用します。接続方法については「利用申請からログインまで」(<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/first-use/>) をご参照ください。

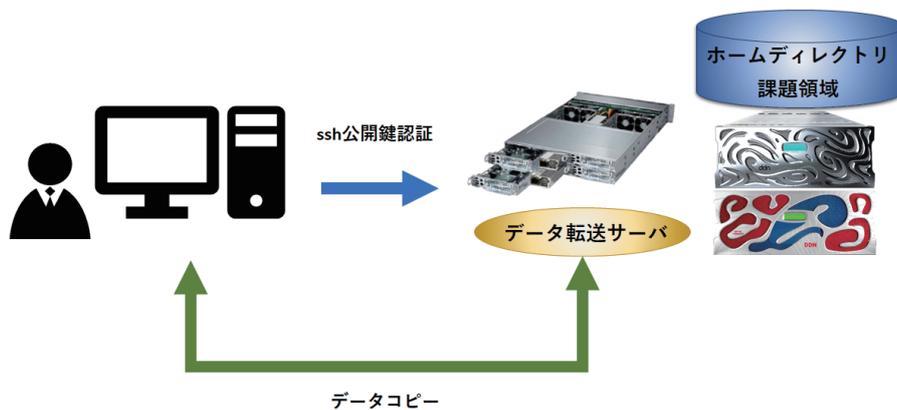


図1 アクセスイメージ

3.1 Powershell(Windows)・MAC・Linux

標準で SSH クライアントがインストールされています。インストールされている各 Terminal ソフトでデータ転送サーバへログインします。

• scp コマンド

SSH 利用し、ネットワーク・ホスト間でファイルを安全にコピーするためのコマンドです。

ローカル PC からリモート (ストレージ環境) に転送

```
$ scp ローカル PC の保存先パス 利用者番号@file.cc.tohoku.ac.jp:保存先パス
```

scp コマンドの実行例

(ローカル PC 上にある sample.txt ファイルをホームディレクトリへ転送)

```
$ scp sample.txt 利用者番号@file.cc.tohoku.ac.jp:sample.txt
```

パスフレーズを聞かれますので入力します。

リモート (ストレージ環境) からローカル PC に転送

```
$ scp 利用者番号@file.cc.tohoku.ac.jp:ファイル名 ローカル PC の保存先パス
```

scp コマンドの実行例

(ホームディレクトリ上にある sample.txt をローカル PC へ転送)

```
$ scp 利用者番号@file.cc.tohoku.ac.jp:sample.txt ./
```

詳しい用例については man コマンドを利用し、scp コマンドのマニュアル閲覧をお願いします。

```
$ man scp
```

• sftp コマンド

SSH 利用し、対話的なファイル転送を行うことができるコマンドです。

ローカル PC からリモート (ストレージ環境) に転送

```
$ sftp 利用者番号@file.cc.tohoku.ac.jp
```

パスフレーズを聞かれますので入力します。

sftp> と表示されたら成功です。

```
sftp> put ファイル名 保存先フォルダ
```

sftp コマンドの実行例

(ローカル PC 上にある sample.txt ファイルをホームディレクトリへ転送)

```
sftp> put パス名/sample.txt ./
```

リモート (ストレージ環境) からローカル PC に転送

```
$ sftp 利用者番号@file.cc.tohoku.ac.jp
```

パスフレーズを聞かれますので入力します。

sftp> と表示されたら成功です。

```
sftp> get ファイル名 保存先フォルダ
```

sftp コマンドの実行例

(ホームディレクトリ上にある sample.txt をローカル PC へ転送)

```
sftp> get ./sample.txt ./
```

詳しい用例については man コマンドを利用し、sftp コマンドのマニュアル閲覧をお願いします。

```
$ man sftp
```

3.2 WinSCP(Windows ソフト)

標準で scp, sftp に対応したソフトウェアがインストールされていないため、はじめにインストールする必要があります。

ここでは、代表的なソフトウェアである WinSCP を利用したファイル転送方法を説明します。

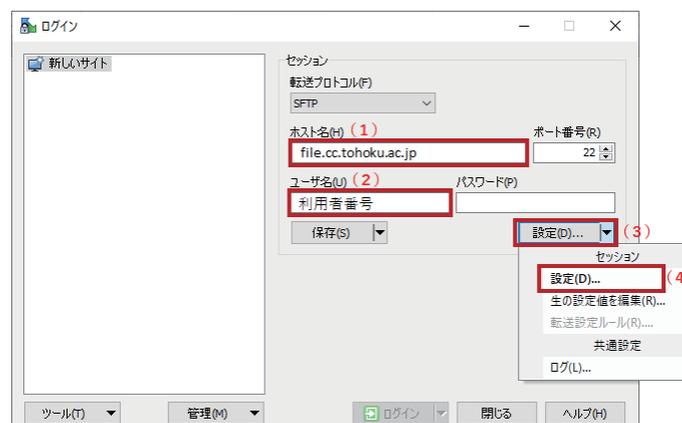


図 2 WinSCP 設定画面

1. WinSCP を起動します。
2. ホスト名（上図（1））に file.cc.tohoku.ac.jp と入力します。
3. ユーザ名（上図（2））に利用者番号を入力します。
4. 設定（上図（3））のプルダウンメニューから設定（上図（4））をクリックします。

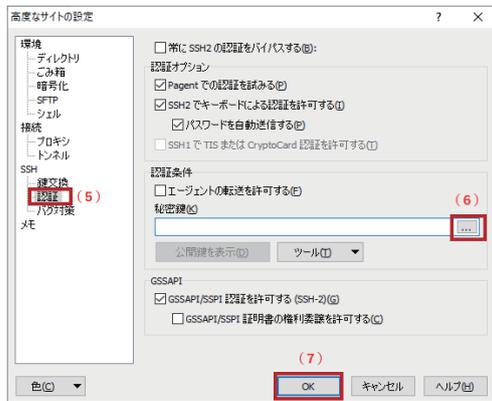


図3 WinSCP 鍵認証設定画面

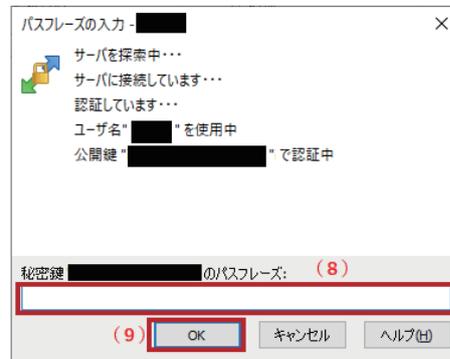


図4 WinSCP 鍵認証画面

5. 左側ナビゲーションメニューの認証（上図（5））を選択します。
6. 秘密鍵のプルダウンメニュー（上図（6））をクリックし、ログインに使用する秘密鍵を指定します。秘密鍵 (.ppk ファイル) を未生成の場合、3.2.1 章をご参照ください。
7. OK（上図（7））をクリックし、鍵の設定を保存します。
8. 元の画面に遷移しますので、ログインをクリックしてください。
9. パスフレーズの入力画面が出ますので、パスフレーズを入力（下図（8））した上で、OK（下図（9））をクリックしてください。成功しますと WinSCP の画面が表示されファイル転送が可能になります。

3.2.1 WinSCP 用の鍵生成手順

1. WinSCP を起動した後、「ツール」をクリックし、「PuTTYgen を実行」を選択します。
2. PuTTYgen を起動すると、「PuTTY Key Generator」ダイアログボックスが表示されますので、「Load」をクリックします。

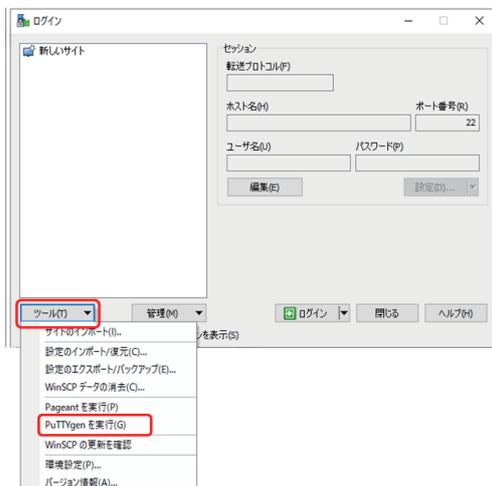


図5 WinSCP 初期設定画面

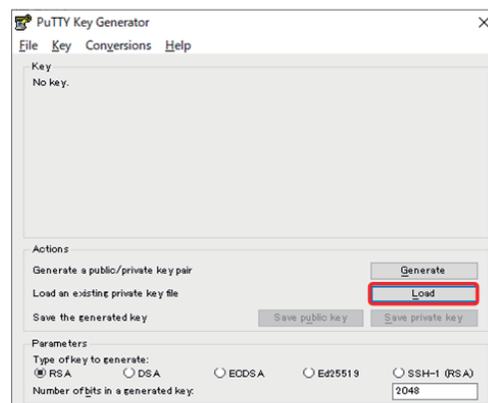


図6 PuTTY Key Generator 画面

3. ファイルの選択画面が表示されますので、ポータルサイトで作成した秘密鍵「id_rsa_cc」を選択すると、パスフレーズの入力を求められます。
4. パスフレーズの内容が一致すると Notice(情報) メッセージが表示されるので、OK をクリックします。
5. 「Save private key」をクリックし、ファイル名を設定します。
6. 設定が完了しましたら、「PuTTY Key Generator」の画面は閉じてください。

4 おわりに

本稿では、ストレージシステムの利用法を紹介しました。ご不明な点、ご質問等ございましたら、お気軽にセンターまでお問い合わせください。問い合わせ先については「利用相談」(<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/consultation/>)をご参照下さい。

[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)

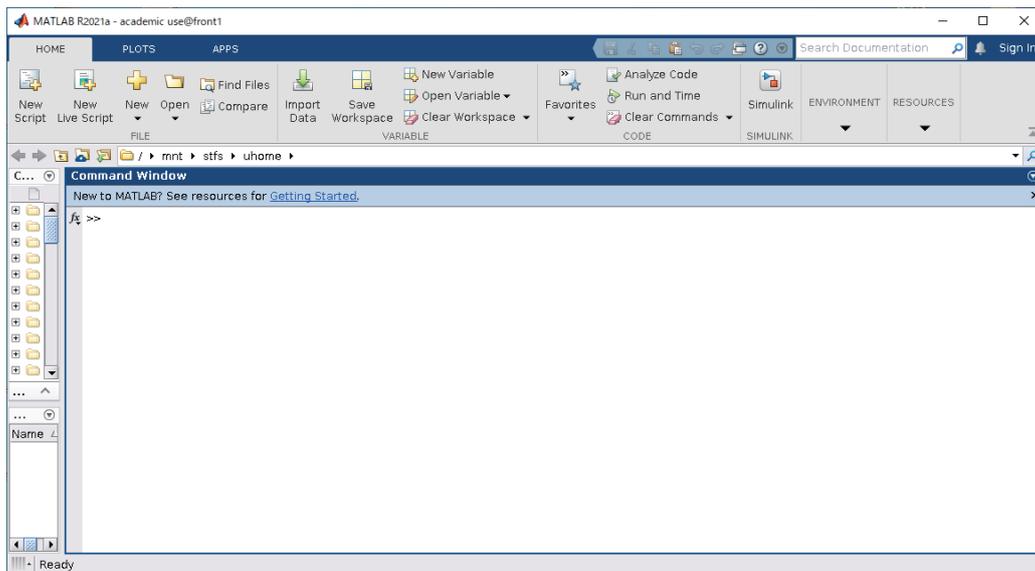


図 2 GUI 版 MATLAB の起動画面

■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/>

[お知らせ]

令和3年度 サイバーサイエンスセンター講習会計画

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、以下の講習会の開催を予定しています（zoomによるオンライン開催）。多くの皆様のご参加をお待ちしております。申し込み方法等、詳しくは以下をご覧ください。

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

No.	講習会名	開催日時	募集人数	講師	内容
1	はじめてのLinux	5月26日(水) 13:30-15:30	15	小野 (情報部情報基盤課)	<ul style="list-style-type: none"> Linuxシステムの基本的な使い方 エディタの使い方
2	はじめてのスパコン	5月28日(金) 13:30-15:30	15	山下 (情報部情報基盤課)	<ul style="list-style-type: none"> スーパーコンピュータの紹介と利用法入門
3	はじめての並列化	6月2日(水) 13:30-15:30	15	小松 (サイバーサイエンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> 並列プログラミングの概要
4	ネットワークとセキュリティ入門	8月3日(火) 13:30-16:00	上限なし	水木 (サイバーサイエンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> ネットワークの基本的な仕組み ネットワークの危険性と安全対策
5	Fortran 入門	9月上旬 13:30-16:30	15	田口 (日本原子力研究開発機構)	<ul style="list-style-type: none"> Fortran の入門編
6	MATLAB 入門	9月上旬 13:30-16:30	15	陳 (秋田県立大学)	<ul style="list-style-type: none"> MATLAB の基本的な使い方
7	Gaussian 入門	9月上旬 13:30-16:30	15	岸本 (理学研究科)	<ul style="list-style-type: none"> Gaussian の基本的な使い方
8	Mathematica 入門	9月上旬 13:30-16:30	15	横井 (尚絅学院大学)	<ul style="list-style-type: none"> Mathematica の基本的な使い方
9	はじめてのLinux	9月下旬 13:30-15:30	15	大泉 (情報部情報基盤課)	<ul style="list-style-type: none"> Linuxシステムの基本的な使い方 エディタの使い方
10	はじめてのスパコン	9月下旬 13:30-15:30	15	佐々木 (情報部情報基盤課)	<ul style="list-style-type: none"> スーパーコンピュータの紹介と利用法入門
11	SX-Aurora Tsubasa の性能分析・高速化	9月下旬 13:30-16:30	15	江川 (サイバーサイエンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> スーパーコンピュータでの性能解析から最適化まで
12	並列プログラミング入門 I (OpenMP)	9月下旬 13:30-16:30	15	小松 (サイバーサイエンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> 並列プログラミングの概要 OpenMP による並列プログラミングの基礎 利用法
13	並列プログラミング入門 II (MPI)	9月下旬 13:30-16:30	15	小松 (サイバーサイエンスセンター)	<ul style="list-style-type: none"> MPI による並列プログラミングの基礎 利用法

[解説]

スーパーコンピュータ AOBA での MATLAB の並列処理

— MATLAB の並列処理を大規模にスケールアウト —

齊藤 甲次郎 加藤 順之

MathWorks Japan

1. はじめに

東北大学サイバーサイエンスセンター様が提供するスーパーコンピュータ AOBA では、サブシステム AOBA-B において MATLAB®のデスクトップ環境(MATLAB、Parallel Computing Toolbox™など)やクラスター環境(MATLAB Parallel Server™)が用意されています。MATLAB の並列処理を AOBA のリソースを活用して大規模にスケールアウトすることができます。

2. AOBA-B での MATLAB の並列処理のワークフロー

AOBA-B で MATLAB の並列処理を実行するためのワークフローは以下のとおりです。

まず AOBA-B のログインサーバに SSH でログインし、フロントエンドサーバ(front1 または front2)に SSH ログインします。フロントエンドサーバで MATLAB を起動し、並列処理を実行します。並列処理の設定や処理内容に応じて、NEC Networking Queueing System V (NQS)と連携を行うスクリプトが qsub などのコマンドを自動生成します。NQS でジョブの割当がされると計算サーバで MATLAB Parallel Server のワーカーが起動し、MATLAB の並列処理を実行します。並列処理の結果は NQS の出力ファイルとして保存され、フロントエンドサーバの MATLAB から変数の読み取りを行うと結果が MATLAB のワークスペースへと転送されます。

これを図示したものが図 1 です。

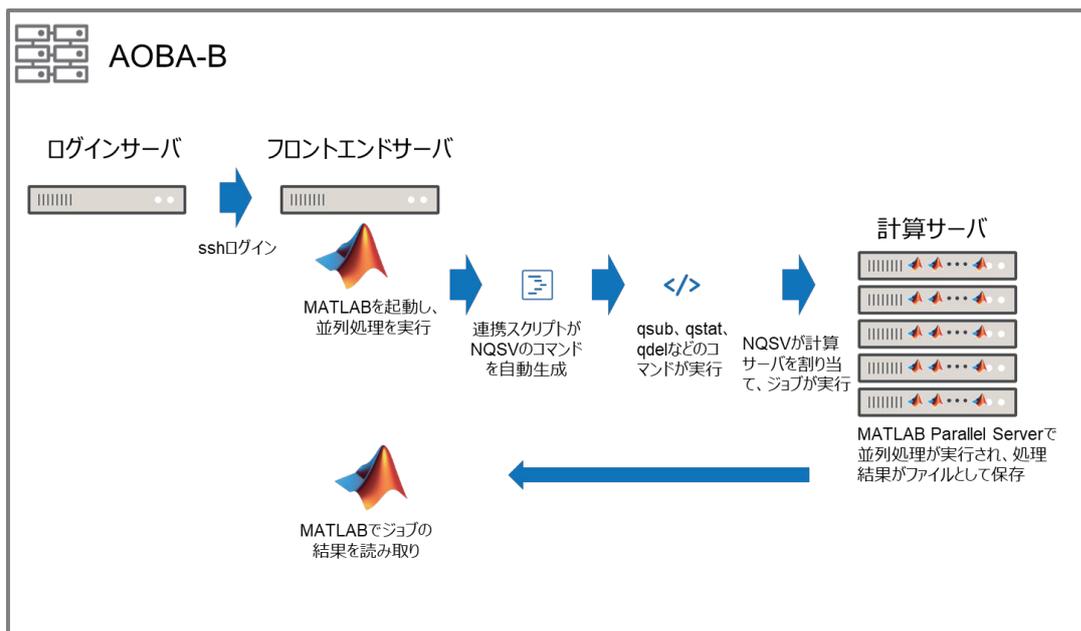


図 1 AOBA-B での MATLAB の並列処理ワークフロー

3. MATLAB Parallel Server と NQSV の連携

3.1 連携の概要

ここでは MATLAB および MATLAB Parallel Server と NQSV との連携について説明します。MATLAB と NQSV は連携スクリプトとクラスタープロファイルによって連携されています。それぞれの役割については表 1 のとおりです。

表 1 MATLAB と NQSV の連携

用語	役割
クラスタープロファイル	MATLAB の並列処理をどの環境で実行させるかの設定を定義します。
連携スクリプト	MATLAB の並列処理のコマンド実行時に、クラスタープロファイルの設定や要求するタスクに応じて、NQSV のコマンドを動的に生成します。

連携スクリプトの詳細は図 2 のとおりです。

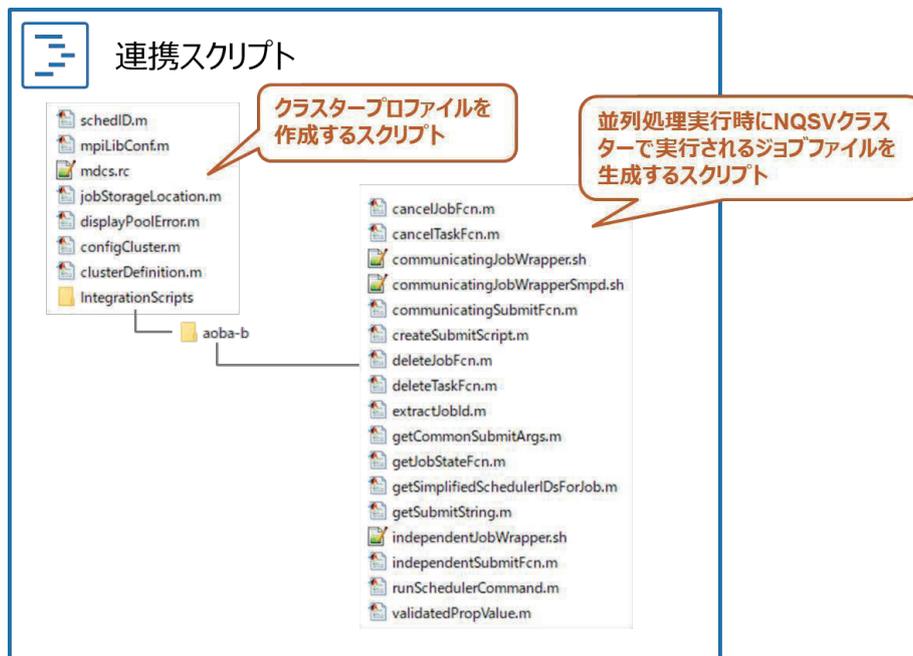


図 2 NQSV との連携スクリプト

3.2 連携スクリプトの使い方

3.2.1 連携スクリプトのコピー

サイバーサイエンスセンター様にて、連携スクリプトのマスターを管理しています。
/mnt/stfs/ap/aoba-b_shared のディレクトリを任意の場所にコピーしてください。

3.2.2 設定ファイルの編集

フロントエンドサーバにログインし、テキストエディタを使って連携スクリプトの設定ファイル(mdcs.rc)を編集します。設定ファイルのそれぞれの項目は表 2 のとおりです。

表 2 連携スクリプトの設定ファイル(mdcs.rc)

項目	デフォルト値	備考
Type	local	AOBA-B ではフロントエンドサーバの MATLAB のマシンから直接 NQS のコマンドを実行しますので、デフォルトの「local」にします。
NumWorkers	128	使用する MATLAB Parallel Server の最大ワーカー数
ClusterMatlabRoot	R2020b:/mnt/stfs/ap/MATLAB, R2020a:/mnt/stfs/ap/MATLAB. R2020a	MATLAB Parallel Server がインストールされたディレクトリのパス。複数バージョンがある場合は、「<バージョン名>:インストールディレクトリ」をカンマでつなげます。
ClusterHost	無し	AOBA-B の場合、使用しません。
LocalJobStorageLocation	無し	MATLAB クライアントのジョブを格納するパスです。デフォルトの空のままにします。
RemoteJobStorageLocation	/uhome/	MATLAB から投げられたジョブやデータのファイルを格納するクラスター側のパスです。ユーザーusera がクライアントホスト front1 からジョブを実行した場合、RemoteJobStorageLocation = /uhome/と設定すると、 /uhome/usera/MdcsDataLocation/aoba-b/front1/R2020b/local にジョブファイルなどが作成されます。
JobStorageLocationOnPC	無し	AOBA-B の場合、使用しません。

3.2.3 連携スクリプトの設定

フロントエンドサーバで MATLAB を起動し、連携スクリプトを MATLAB のカレントフォルダまたはパスが通っているところに置きます。例えば、連携スクリプトを/uhome/user1/matlab のディレクトリに置いた場合、MATLAB から以下のコマンドでパスを追加できます。

```
>> addpath('/uhome/user1/matlab')
```

MATLAB から以下のコマンドを実行して連携スクリプトを設定します。

```
>> configCluster
```

これにより AOBA-B 用のクラスタープロファイルが作成されます。

3.2.4 クラスタプロファイルの確認

次に、設定されたクラスタプロファイルの確認を行います。MATLAB の「並列」メニューから「クラスタプロファイルの作成と管理」をクリックします。



図 3 クラスタプロファイルの作成と管理をクリック

クラスタプロファイルの一覧に AOBA-B 用のクラスタプロファイル(例 : aoba-b local R2020b)が既定として設定されていることを確認します。もし既定になっていなかったら「プロファイルの管理」から「既定の値として設定」をクリックします。



図 4 クラスタプロファイルを確認

3.2.5 クラスタプロファイルの変更

必要に応じてクラスタプロファイルの設定値を変更します。

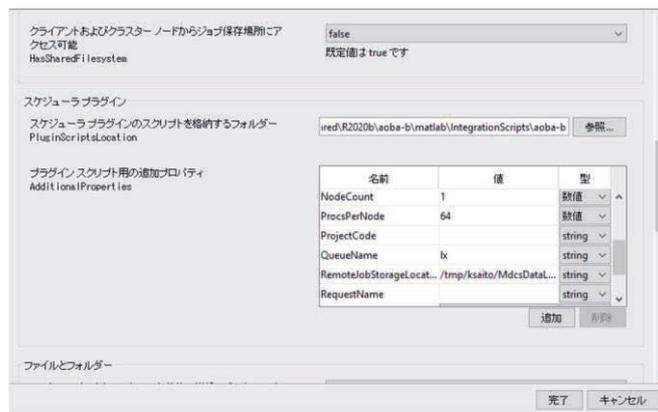


図 5 必要に応じてクラスタプロファイルの設定を変更

クラスタープロファイルの項目と対応する NQSV のオプションについては表 3 及び表 4 のとおりです。

表 3 クラスタープロファイルの項目と対応する NQSV のオプション

プロパティ名	説明	対応する NQSV のオプション	デフォルト値
JobStorageLocation	クライアントでジョブデータを保存するディレクトリ	—	/uhome/ユーザー名 /MdcDataLocation/aoba-b /ホスト名/R2020b/local
NumWorkers	クラスターで使用可能なワーカーの数	—	128
NumThreads	1 ワーカーあたりのスレッド数	—	1 (推奨は 1 です)
ClusterMatlabRoot	MATLAB Parallel Server がインストールされているディレクトリ	—	R2020b の場合： /mnt/stfs/ap/MATLAB R2020a の場合： /mnt/stfs/ap/MATLAB. R2020a
LicenceNumber	MATLAB Parallel Server オンラインライセンスを使用する場合のライセンス番号	—	無し (オンラインライセンスを使用しないため)
RequiresOnlineLicensing	MATLAB Parallel Server のオンラインライセンスを使用するかどうか	—	False (オンラインライセンスを使用しないため)
OperatingSystem	クラスター計算ノードの OS	—	unix
HasSharedFilesystem	MATLAB クライアントのマシンとクラスターの計算ノードとでファイル共有サーバがあるかどうか	—	true
PluginScriptsLocation	連携スクリプトを格納しているディレクトリ	—	configCluster.m がある IntegratonScripts のディレクトリ
AdditionalProperties	クラスターに渡す追加のプロパティ	—	—
AdditionalSubmitArguments	追加で渡す qsub の引数	—	—
DebugMessagesTurnedOn	デバッグ用フラグ	—	false
EmailAddress	ジョブ投入時、終了時にメール通知をする場合のメール受信先	-M <メールアドレス> -m b -m e	無し
IdentityFile	SSH の鍵ファイルのパス。鍵ファイルを使用する場合は UseIdentityFile を true にしてください。	—	無し

表 4 クラスタプロフィールの項目と対応する NQSV のオプション (続き)

プロパティ名	説明	対応する NQSV のオプション	デフォルト値
MaxElapseTime	最大経過時間	-l elapstim_req	24:00:00
NodeCount	ノード数	-b	1
ProcsPerNode	1 ノードあたりのプロセス数	(-b のノード数算出に使用)	128
QueueName	キュー名	-q	lx
RequestName	リクエスト名	-N	無し
RequestRerun	リクエストのリランの有無	-r y / -r n	false
UseIdentityFile	SSH をパスワードではなく鍵ファイルでログインするオプション。true にした場合は IdentityFile にファイルパスを指定します。	—	false
AutoAttachFiles	MATLAB Parallel Server のクラスターに依存関係のあるファイルを自動的に送信するかの設定	—	true
AttachedFiles	MATLAB Parallel Server のクラスターに送信するファイルまたはディレクトリ	—	無し
AdditionalPaths	ワーカーの検索パスに追加するフォルダ	—	無し
NumWorkerRange	ジョブを実行するワーカー数の範囲	—	[1 inf]
CaptureDiary	コマンドウィンドウへ出力を返す設定	—	false
EnvironmentVariables	MATLAB クライアントから MATLAB Parallel Server のワーカーにコピーする環境変数	—	無し

また、MATLAB Parallel Server を AOBA-B で実行する際の、その他の NQSV オプションは以下のとおりです。

表 5 その他の NQSV のオプション

NQSV のオプション	備考
-T intmpi	複数ノードをまたぐ処理の場合、MPI の実行環境を Intel MPI に指定しています。

3.2.6 MATLAB の並列処理の設定の変更

次に、MATLAB の並列処理の設定変更を行います。MATLAB のメニュー画面から「基本設定」をクリックします。

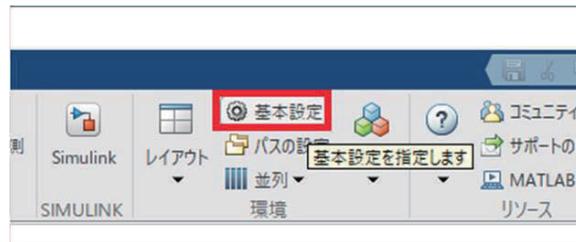


図 6 MATLAB の「基本設定」をクリック

複数ノードで並列処理できるようにするため、「Parallel Computing Toolbox」のメニューで推奨される並列プールでのワーカー数を、デフォルトの 12 から、200 などの大きな値に変更します。

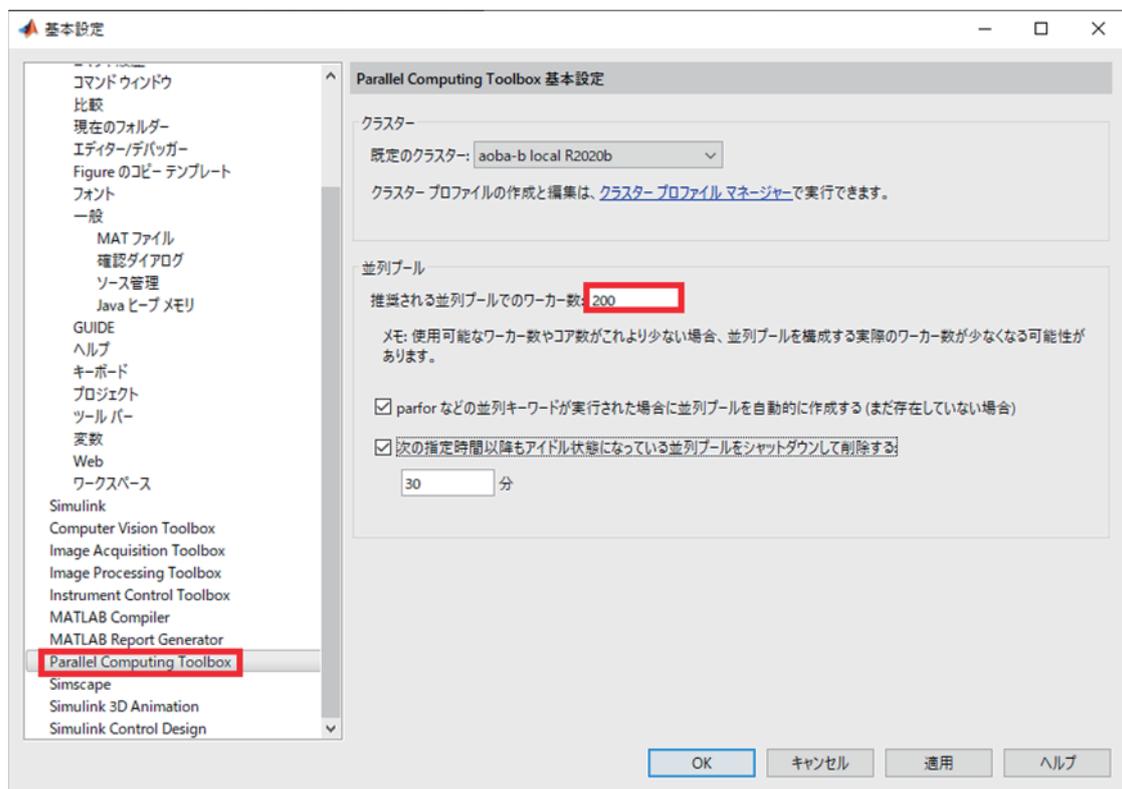


図 7 推奨される並列プールでのワーカー数を変更

4. MATLAB での動作確認

4.1 クラスタプロフィールの検証

設定したクラスタプロフィールの検証を行います。AOBA-B のクラスタプロフィールを選択していることを確認し、検証項目 5 つ目の「並列プールテスト」だけチェックを外します。そして右下の「検証」ボタンをクリックして検証を実行します。

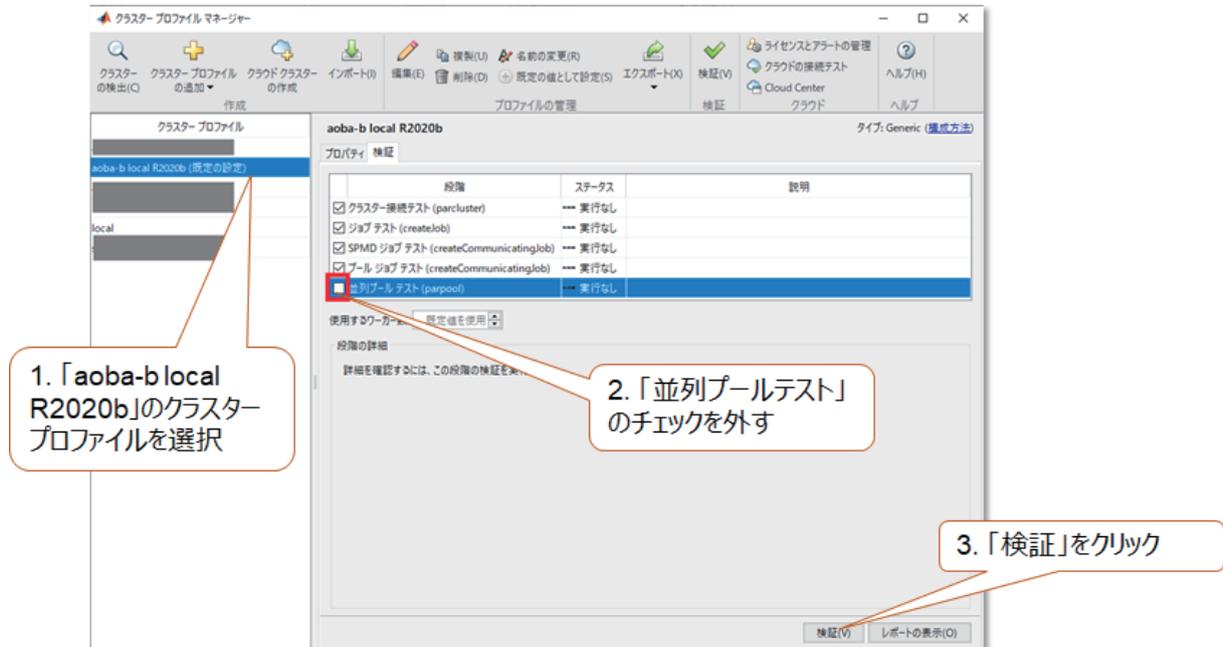


図 8 クラスタプロフィールの検証を実行

「プールジョブテスト」までの 4 つの検証をパスすれば問題ありません。

4.2 オフロードジョブのテスト

次に batch でのオフロード処理をテストします。parallelServerSample.m というファイルを作り、以下のコードを記載します。

parallelServerSample.m

```
n = 200;
A = 500;
a = zeros(n);
parfor i = 1:n
    a(i) = max(abs(eig(rand(A))));
end
```

MATLAB のコマンドウィンドウから、batch コマンドを使用してジョブを実行します。Pool オプションに使用するワーカー数から 1 を引いた値を入れます。

```
>> job1 = batch('parallelServerSample', 'Pool', 3,  
'AutoAddClientPath', false);
```

ジョブ投入後、MATLAB の「並列」メニューから「ジョブの監視」をクリックします。

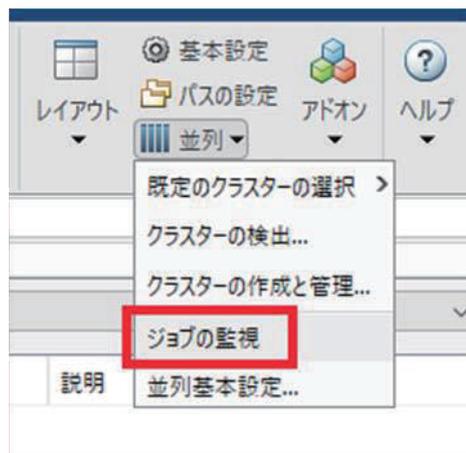


図 9 ジョブの監視をクリック

クラスターサーバに投入したジョブの一覧が表示されます。処理が進むに連れ「状態」欄が「queued」、「running」、「finished」と遷移します。

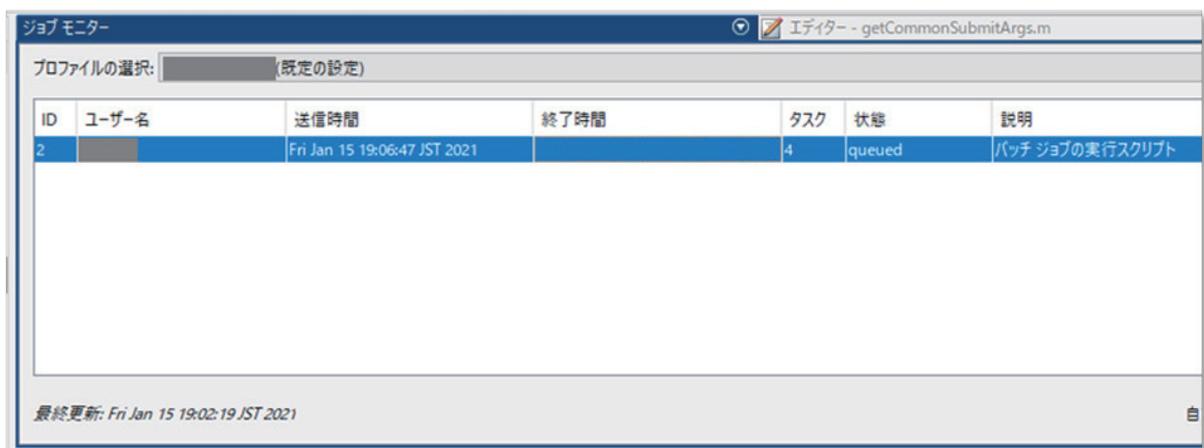


図 10 ジョブの一覧とステータス表示

ステータスが finished になったら、ジョブモニターで右クリック「変数の読み込み」をクリックすることでクラスターサーバに投げた処理結果を取得できます。または、以下のコマンドで処

理結果を取得することもできます。

```
>> wait(job1);
>> fetchOutputs(job1);
```

5. 参考情報

5.1 用語の説明

このドキュメントの用語の意味は以下のとおりです。

表 6 用語集

用語	意味
ワーカー	MATLAB Parallel Server の並列処理を実行する MATLAB プロセスのこと。
インタラクティブジョブ	MATLAB の並列処理のうち、MATLAB クライアントとワーカーとの間に通信を張って処理を行う並列処理のこと。処理中は MATLAB クライアントを起動したままにする必要があります。
オフロードジョブ	MATLAB の並列処理のうち、MATLAB クライアントとワーカーとの間で通信を張らずに処理を行う並列処理のこと。ジョブ投入後は MATLAB クライアントを停止させてもワーカー内で処理が継続されます。

5.2 Web ページ

参考になる Web ページのリンクは以下のとおりです。

- ・ MATLAB および Simulink による並列計算
<https://jp.mathworks.com/solutions/parallel-computing.html>
- ・ Parallel Computing Toolbox について
<https://jp.mathworks.com/products/parallel-computing.html>
- ・ MATLAB Parallel Server について
<https://jp.mathworks.com/products/matlab-parallel-server.html>
- ・ Parallel Computing Toolbox 入門
<https://jp.mathworks.com/help/parallel-computing/getting-started-with-parallel-computing-toolbox.html>

- MATLAB のバッチ処理のサンプル

<https://jp.mathworks.com/help/parallel-computing/batch-processing.html>

5.3 問い合わせ窓口

AOBA-B での MATLAB および MATLAB Parallel Server についての問い合わせ先は以下のとおりです。

- 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/>

[報 告]

令和2年度サイバーサイエンスセンター講習会報告*

No.	名 称	開催月日	受講者数	講 師	内 容
1	新スーパーコンピュータ AOBA の紹介と利用説明会	11月5日(木)	43	滝沢 寛之 山下 毅	<ul style="list-style-type: none"> ・新スーパーコンピュータ AOBA の紹介 ・利用方法、利用負担金について
2	SX-Aurora TSUBASA への 移植に関するハンズオン セミナー	11月20日(金)	8	NEC	<ul style="list-style-type: none"> ・SX-ACE との違いの紹介 ・移植ツール、移植方法について
3	はじめてのLinux	11月25日(水)	6	小野 敏	<ul style="list-style-type: none"> ・Linux システムの基本的な使い方 ・エディタの使い方
4	はじめてのスパコン	11月27日(金)	5	山下 毅	<ul style="list-style-type: none"> ・スーパーコンピュータの紹介と 利用法入門
5	はじめての高速化	12月1日(火)	7	江川 隆輔 (東京電機大学)	<ul style="list-style-type: none"> ・スーパーコンピュータの高速化に ついて
6	並列プログラミング 入門 I (OpenMP)	12月9日(水)	10	小松 一彦	<ul style="list-style-type: none"> ・並列プログラミングの概要 ・OpenMP による並列プログラミング の基礎 ・利用法
7	並列プログラミング 入門 II (MPI)	12月11日(金)	11	小松 一彦	<ul style="list-style-type: none"> ・MPI による並列プログラミングの 基礎 ・利用法
8	Gaussian 入門	1月18日(月)	4	岸本 直樹 (理学研究科)	<ul style="list-style-type: none"> ・Gaussian の基本的な使い方
9	MATLAB 入門	1月21日(水)	2	陳 国躍 (秋田県立大学)	<ul style="list-style-type: none"> ・MATLAB の基本的な使い方
10	Fortran 入門	1月27日(水)	6	田口 俊弘 (日本原子力研究 開発機構)	<ul style="list-style-type: none"> ・Fortran の入門編
参加者合計			102		

*令和2年度講習会はすべてオンラインで開催しました。

[報 告]

第 31 回高性能シミュレーションに関するワークショップ(WSSP)を開催しました

スーパーコンピューティング研究部 滝沢寛之

東北大学サイバーサイエンスセンターは、ドイツのシュトゥットガルト大学高性能計算センター(HLRS)、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)および NEC のご協力を得て、2021年3月16日(火)～19日(金)に高性能計算に関する国際ワークショップ「第31回 Workshop on Sustained Simulation Performance (WSSP)」を開催しました。本ワークショップは、国際的に活躍している計算科学の研究者及びスーパーコンピュータ設計者を招いて、高性能・高効率大規模科学計算に関する最新の研究成果の情報交換を行うとともに、今後のスーパーコンピュータの研究開発のあり方を議論することを目的としています。

コロナ感染拡大防止の観点から、今回の WSSP はオンライン開催となりました。ヨーロッパとの時差を考えて、双方の参加者が比較的参加しやすい時間帯に講演時間を設定しました。日本標準時での開催時間は以下の通りであり、例年は2日間のワークショップなのですが、今回は4日間にわたって開催されました。

3/16(火) 17:15 - 20:15

3/17(水) 16:30 - 20:20

3/18(木) 16:30 - 20:20

3/19(金) 16:30 - 21:00

本ワークショップは、恒例どおり HLRS のセンター長である Michael Resch 教授の開会の挨拶で始まり、技術講演として全体で26件の発表があり、日本、ドイツ、ロシア、アメリカの研究者により、HPC 技術動向、HPC システム評価、アプリケーション開発の幅広い分野のトピックの講演がありました。今回は特に NEC SX-Aurora TSUBASA に関する技術紹介や性能評価結果が多数報告されました。例えば、WSSP 最終日最後の講演であるアメリカ海軍調査研究所(United States Naval Research Laboratory)の Keith Obenschain 氏の講演では、同研究所で長い間使われている数値流体シミュレーションコードを SX-Aurora TSUBASA に移植して性能評価した結果が報告されました。講演では、ベクトルレジスタに配置するデータを明示的に指定することによってメモリアクセス回数を大幅に減らすプログラム最適化技術などが紹介されていました。SX-Aurora TSUBASA の登場以降、それまでの SX シリーズと比較しても広く利用され、活用事例が蓄積されていることが分かる内容でした。

日本側からは、核融合研の石黒氏、神戸大学の横川氏、大阪大学の伊達氏、兵庫県立大学の兼安氏、科学計算総合研究所の菱沼氏に加えて、多数の NEC の技術者が講演を行いました。さらに、主催である東北大学サイバーサイエンスセンターからも、合計3件の技術講演を行いました。

ワークショップの各講演は WebEx を用いて行われましたが、休憩時間には Wonder Meeting というウェブサービスで雑談を楽しむことができました。コロナ禍で国際会議やワークショップ

プのオンライン開催が増えていますが、そうした状況でも違和感なく会話を楽しめるように、様々な技術が試行錯誤されていることを実感しました。

第31回 WSSP に関するその他の詳細は、以下のページをご覧ください。

<https://www.teraflop-workbench.de/htm/events/31thWorkshop.htm>

WSSP

Scope Program Committee Registration Travel & Locations

Home
Overview
Projects
Platforms
News/Events
Intranet
Contact

HLRS
NEC

Agenda

Due to the corona pandemic, the workshop was hold online. All times are given in Central European Time (CET)

Tuesday, March 16th, 2021

9:15 - 9:30	<i>Welcome & Introduction</i> Michael Resch , HLRS, University of Stuttgart
9:30 - 10:00	The New Era of Hybrid-Computing on and with SX-Aurora TSUBASA: Vector-Scalar to Vector-Digital Annealing, to Vector-Quantum Annealing Hiroaki Kobayashi , Cyberscience Center, Tohoku University Abstract
10:00 - 10:30	HPC in the Next Decade Michael Resch , HLRS, University of Stuttgart Abstract
10:30 - 11:00	<i>Software Methods for Product Virtualization</i> Sabine Roller , DLR (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V.) Abstract
11:00 - 11:15	<i>Break</i>
11:15 - 11:45	SX-Aurora TSUBASA VE Design Hiroki Asano , NEC Tokyo Abstract
11:45 - 12:15	Fostering HPC Competences in Europe to Support Academia and Industry Bastian Koller , HLRS Abstract
12:15	<i>Open Meeting</i>

Wednesday, March 17th, 2021

8:30 - 8:35	<i>Introduction of Chair</i>
8:35 - 9:05	Exploiting Hybrid Parallelism in LRM Implementation, Muzuki

[退職のご挨拶]

退職のご挨拶

曾根 秀昭

このほど定年退職となり、記事の依頼がありました機会に、ご挨拶申し上げます。

東北大学サイバーサイエンスセンターの前身となる大型計算機センターには 1992 年に工学部から移りました。申し訳ないことにコンピュータもネットワークも私の研究分野ではなく素人でしたが、振り返ってみるとその数年前から本誌 SENAC に利用事例報告などを書いておりました。もともとラジオ少年に発してそちらへの課外活動的な興味はあり、大型計算機センターのプログラム相談員や (TOPIC の前身となった) 第二地区計算機利用協議会連絡会、あるいは TAINS 利用研究会を通して、大型計算機センターの教職員や学内外の幅広い利用者の方々とはつながりをいただいております。大学入学の前に、国内のコンピューターメーカーを 3 グループに整理して大学の大型計算機センターと組み合わせるということを新聞記事で読んだり、コンピュータが通信するようになって海外ともネットワークがつながるがネットワーク制御や運用を研究しなければならないと東北大学の先生から高校の講演会で聞いたりした覚えがありますが、自分が職として係わることはもちろん想像しておりませんでした。

大型計算機センターから情報シナジーセンターへの改組を経てサイバーサイエンスセンターまで、いろいろな情報環境のシステムとサービス運用の業務に携わる経験をしながら、多くのご支援を得て様々な困難と克服を含めて楽しませていただきました。インターネット技術の拡大期には、学外のネットワーク研究グループから地域ネットワークや広域広帯域ネットワークなどの実践的共同研究にお誘いをいただき、あるいは大学協同の認証基盤やサイバーセキュリティ対策への取組みのなかで、他大学や産・官あるいは国外にも広く知り合いを得ることができました。さらには地元や全国協働の情報技術人材育成にもお声がけをいただき、学内外で貴重な経験をさせていただきました。反面、これらの取組みを継承していただけるような引継ぎが至らなかったことは申し訳なく悔やんでおります。

これまでお世話になり支えていただいた方々は数多く、失礼ながら誌面をお借りしてまとめてお礼申し上げますとともに、皆様のますますのご発展もご期待申し上げます。

[退職のご挨拶]

退職にあたって

東北大学サイバーサイエンスセンター先端情報技術研究部 吉澤 誠

新型コロナウイルス感染症は、世界中の人々の心身の健康に非常に大きな脅威を与えています。この原稿を書いているときも、専門家の見解では第4波が始まったのではないかという報道がありました。

ふつう、長年勤めてきた職場で無事定年退職を迎えられることは大変喜ばしいことなのですが、昨年退職された方々に引き続き、今回もまたコロナのために、お祝い事はことごとく中止になってしまいました。

私以上に残念な思いをしたのは、研究室で指導してきた学生たちでしょう。卒業・修了に際してのさまざまな式やイベントはもちろん、楽しみにしていた卒業旅行などもできず、大変不遇な年に遭遇してしまい、不憫でなりません。

10年前の東日本大震災でも、同じようなことが起きました。夥しい数の方々が亡くなり、原発事故で東日本が壊滅するのではないかという強い不安に苛まれた当時と比べると、あの時と同様に世界中で多くの人々が亡くなっているのですが、身近で目に見える形でのダメージはあまり感じられません。

しかし、震災後で多用された「絆」という言葉の代わりに、「ソーシャル・ディスタンス」が叫ばれて、行き交う他人がすべてウィルスまみれのゾンビのように見えるようになっていきます。大学では新入生のための寝食ともにするような新歓イベントもなくなり、新しい人間関係構築の機会が減っています。

このような、これまで人間が自然に求めてきた、唾を浴び口臭が匂うくらいまで人と人とが物理的に近接し、肌が触れ合うような社会的交流の機会が失われたことの影響は、コロナが明けた後も、かなり長くじんわりと根強く続くような気がします。もしかすると、ここ数年は人口統計には表れないような精神的な「丙午」の年となるかもしれません。

大震災の後は、「復興」が社会全体と大学の目標でした。当時、壊れたインフラを修復することが、まず第一であり、連休明けまで大学は実質的に休みでした。崩壊寸前だった建物の中にあった私の研究室も、一旦、サイバーサイエンスセンターに避難し、その後、仮設プレハブ棟に移り、さらに新築していただいた建物に引っ越して、ようやく元の研究環境が整いました。とにかく元に戻すことが重要でした。

一方コロナ禍では、元の環境に戻すことではなく、オンラインで教育・研究・業務が実質的に実行できる代替環境を、できるだけ早く新たに構築することが目標となりました。このために多大な労力と貴重な時間を費やしてご努力された情報シナジー機構やサイバーサイエンスセンターの関係者には深く感謝し、敬意を表します。

これは震災前とは異なり、スマートフォンが震災後に急速に普及したような高度な情報通信環境の進展がなければ実現できなかったことだと思います。私も、定年退職の年になって初めて、オンライン講義のコンテンツ作りに忙殺されました。ようやく動画やアニメーションで工夫をこらしたコンテンツができて、講義の初めのころは講義する教員側も受講する学生側も不慣れなため、なかなかうまく行きませんでした。

さらに厄介だったのは、オンラインで試験ができるかどうかということでした。対面での試験を一切行わず、すべてをレポートで評価することとしてしまえば、これほど簡単で安直なことはありません。しかし、大学教育者としての沽券にかけて、何かと様々な工夫をすることによって前期科目のオンライン試験を4クラス並行して実施しました。ただし結論から言うと、不正行為が100%ないオンライン試験は不可能だということもわかりました。これについては、「オンライン試験なんて本当にできるの？ —システム制御工学Aの場合」（第2回東北大学オンライン授業シンポジウム，2020年9月17日，<https://drive.google.com/file/d/19ui6PDVwM9iu06yPTWkgLC5U7hfL0zxf/view?usp=sharing>）で発表しています。

普通このような原稿の場合、定年退職にあたってこれまで奉職してきた38年間で振り返り、その間の様々なことを述べるべきだったとは思いますが、定年退職の年の災禍が少なからず精神的にシビアだったため、ほとんどこの1年余りの出来事で感じたことを述べてしまいました。本当は頭の中でぐるぐる回る走馬灯の内容でも、もう少しお話したかったのですが、立ち去る者が美しく見えるように、ここで筆を置きます。

これまでお世話になりましたすべての皆様に感謝いたしつつ、コロナに負けないで健やかに過ごして下さるようお祈り申し上げます。

執筆者所属は2021年3月までの名称を記載しました。

現職：東北大学産学連携機構 イノベーション戦略推進センター 特任教授・名誉教授

[退職のご挨拶]

退職にあたって

東北大学情報部情報基盤課共同利用支援係 齊藤 くみ子

定年を無事迎えることができました。今まで出会った教職員、利用者他すべてのみなさま 1 人 1 人に感謝申し上げます。

せっかくなので、私がセンター（当時は大型計算機センター）に就職した昭和 50 年台前半のひとつまを少しだけ書きたいと思います。当時の計算機処理の主流はパンチした紙のカードの束を、センター窓口に計算依頼（バッチ処理）して、約半日後にその結果を専用ボックスで受けとるというシステムでした。夜間受付もあり朝から夜遅くまで、多くの白衣姿の教官や学生さんが、カードの入ったジュラルミンケースや段ボール箱を抱えて現れ、次々と計算を依頼し、結果を受け取りに来るといった毎日でした。ラインプリンタで出力された計算結果が厚い束のときはいいのですが、エラーで終了しているとその紙は数枚でまた間違いを探しやり直すという様子でした。当時、片平にあったセンターの 1 階は板張廊下で一部傾斜があり、スリッパで滑るようにして面白がって私も利用者も移動していました。勢いあまってバランスを崩し、順番に並べてあったプログラムカードやデータカードの束を廊下にぶちまけるという事件も時々ありました。カードを拾い集めるまではお手伝いしましたが、「あとは自分で並べ直します。」とみなさん肩をおとして帰っていかれました（このことがわかる方は 60 代以降の方かと…）。

センターでの最初の所属は業務掛（現在の共同利用支援係）で、初めて担当した仕事のひとつが広報誌 SENAC の配布リストを手書きで作ることでした。当時はワープロもありませんでした。3 年ほどで研究開発部に異動し、しばらく広報等の仕事から離れましたが、その後また事務部に戻り 2006 年より SENAC に縁があったのか編集を担当することになりました。歴代の係長や大先輩の職員が担当していた仕事で、正直自分に担当が廻ってくるとは思っていませんでした。引き受けたからには自分なりに工夫もして作業しましたが、そもそも抜けているところも多い上に、複雑な作業も多く、執筆者とのやり取りは緊張することもあり、今もあまり適性はないように思っています。しかし、15 年も続けてこられたのは、執筆者、編集部会のメンバー、センターの教職員、そして各印刷業者の担当者の方々、みなさんに暖かく適切な対応で助けていただいたおかげです。そんな中文章をチェックするコツが少しだけつかめました。1 回目は文字を追って文節番号や図番号もチェックします。2 回目は文章として読んでみます。3 回目は少し時間をあけて全体を読み直しますが、意外と 3 回目にも修正点を発見できたりします。しかし自分の書くものは今でもミスが多いです。SENAC 以外にも、特に講習会や利用相談（旧プログラム相談）の仕事は長い期間関わらせていただきました。こちらの方も関係した講習会講師や相談員の皆様に大変お世話になりご協力をいただきました。

長い在職期間、職員親睦会（びっと会）のスポーツ大会・旅行・忘年会、全国 7 センター間の野球大会、職員有志、プログラム相談員、研究室の学生さん、それぞれのメンバーでのお花見、芋煮会、スキー旅行、飲み会等大小たくさんのイベントがありました。近年、私自身も含めそのようなイベントを少し面倒に感じる風潮もありましたが、今となってはいろいろな行事で楽しませていただいたと思います。コロナが収まったらまたみなさんとそういうことも少しはしてみたい気持ちです。

4 月以降も引き続き、センターで共同利用支援のお仕事をさせていただけることになりました。皆様の足をあまりひっぱることがないよう頑張りますので、よろしく願いいたします。

[スーパーコンピュータ A0BA のお知らせより]

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ウェブサイトに掲載されたお知らせの一部を転載しています。

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

令和3年度利用負担金について

令和3年度の利用負担金についてお知らせします。詳細は以下をご覧ください。

別表1 基本利用負担金【大学・学術利用】

区分	項目	利用形態	負担額及び課金対象時間
演算負担経費	スーパーコンピュータ	共有(無料)	利用 VE 数 1(実行数、実行時間の制限有) 無料
		共有(従量)	課金対象時間 = (利用 VE 数 ÷ 8 を切上げた数) × 経過時間(秒) 課金対象時間 1 時間につき 125 円
		共有(定額)	負担額 10 万円につき課金対象時間 800 時間分使用可能
		占有	利用 VE 数 8 利用期間 3 ヶ月につき 270,000 円
	並列コンピュータ	共有(従量)	課金対象時間 = 利用ノード数 × 経過時間(秒) 課金対象時間 1 時間につき 22 円
		共有(定額)	負担額 10 万円につき課金対象時間 4,600 時間分使用可能
		占有	利用ノード数 1 利用期間 3 ヶ月につき 47,000 円
		ファイル負担経費	
		占有	10TB まで無料、追加容量 1TB につき年額 3,000 円
出力負担経費	大判プリンタによるカラープリント		フォト光沢用紙 1 枚につき 600 円
			クロス 1 枚につき 1,200 円

備考

- 負担額が無料となるのは専用のキューで実行されたものとし、制限時間を超えた場合は強制終了する。
- 演算負担経費の課金対象時間については半期毎(4月から9月及び10月から3月)に合計し、1時間未滿を切上げて負担金を請求する。
- 演算負担経費について定額制を選択した場合はスーパーコンピュータ及び並列コンピュータを課金対象時間の範囲内で共用できる。
- 占有利用期間は年度を超えないものとし、期間中に障害、メンテナンス作業が発生した場合においても、原則利用期間の延長はしない。
- ファイル負担経費については申請日から当該年度末までの料金とする。運用期間が1年に満たない場合は、月割りをもって計算した額とする。

別表2 基本利用負担金【民間機関利用（成果公開型）】

区分	項目	利用形態	負担額及び課金対象時間
演算負担経費	スーパーコンピュータ	共有(無料)	利用 VE 数 1(実行数、実行時間の制限有) 無料
		共有(従量)	課金対象時間 = (利用 VE 数 ÷ 8 を切上げた数) × 経過時間(秒) 課金対象時間 1 時間につき 250 円
		共有(定額)	負担額 20 万円につき課金対象時間 800 時間分使用可能
		占有	利用 VE 数 8 利用期間 3 ヶ月につき 540,000 円
	並列コンピュータ	共有(従量)	課金対象時間 = 利用ノード数 × 経過時間(秒) 課金対象時間 1 時間につき 44 円
		共有(定額)	負担額 20 万円につき課金対象時間 4,600 時間分使用可能
		占有	利用ノード数 1 利用期間 3 ヶ月につき 94,000 円
ファイル負担経費	共有	5TB まで無料、追加容量 1TB につき年額 6,000 円	
	占有	10TB まで無料、追加容量 1TB につき年額 6,000 円	
出力負担経費	大判プリンタによるカラープリント	フォト光沢用紙 1 枚につき	1,200 円
		クロス 1 枚につき	2,400 円

備考

- 1 負担額が無料となるのは専用のキューで実行されたものとし、制限時間を超えた場合は強制終了する。
- 2 演算負担経費の課金対象時間については半期毎(4 月から 9 月及び 10 月から 3 月)に合計し、1 時間未滿を切上げて負担金を請求する。
- 3 演算負担経費について定額制を選択した場合はスーパーコンピュータ及び並列コンピュータを課金対象時間の範囲内で共用できる。
- 4 占有利用期間は年度を超えないものとし、期間中に障害、メンテナンス作業が発生した場合においても、原則利用期間の延長はしない。
- 5 ファイル負担経費については申請日から当該年度末までの料金とする。運用期間が 1 年に満たない場合は、月割りをもって計算した額とする。

別表3 基本利用負担金【民間機関利用（成果非公開型）】

区分	項目	利用形態	負担額及び課金対象時間
演算負担経費	スーパーコンピュータ	共有(無料)	利用 VE 数 1(実行数、実行時間の制限有) 無料
		共有(従量)	課金対象時間 = (利用 VE 数 ÷ 8 を切上げた数) × 経過時間(秒) 課金対象時間 1 時間につき 500 円
		共有(定額)	負担額 40 万円につき課金対象時間 800 時間分使用可能
		占有	利用 VE 数 8 利用期間 3 ヶ月につき 1,080,000 円
	並列コンピュータ	共有(従量)	課金対象時間 = 利用ノード数 × 経過時間(秒) 課金対象時間 1 時間につき 88 円
		共有(定額)	負担額 40 万円につき課金対象時間 4,600 時間分使用可能
		占有	利用ノード数 1 利用期間 3 ヶ月につき 188,000 円
ファイル負担経費	共有	5TB まで無料、追加容量 1TB につき年額 12,000 円	
	占有	10TB まで無料、追加容量 1TB につき年額 12,000 円	
出力負担経費	大判プリンタによるカラープリント	フォト光沢用紙 1 枚につき	2,400 円
		クロス 1 枚につき	4,800 円

備考

- 1 負担額が無料となるのは専用のキューで実行されたものとし、制限時間を超えた場合は強制終了する。
- 2 演算負担経費の課金対象時間については半期毎(4 月から 9 月及び 10 月から 3 月)に合計し、1 時間未滿を切上げて負担金を請求する。
- 3 演算負担経費について定額制を選択した場合はスーパーコンピュータ及び並列コンピュータを課金対象時間の範囲内で共用できる。
- 4 占有利用期間は年度を超えないものとし、期間中に障害、メンテナンス作業が発生した場合においても、原則利用期間の延長はしない。
- 5 ファイル負担経費については申請日から当該年度末までの料金とする。運用期間が 1 年に満たない場合は、月割りをもって計算した額とする。

(共同利用支援係)

コンパイラのバージョンアップについて

2021年4月6日にAOBAのコンパイラをバージョンアップいたします。

対象システム	コンパイラ名	旧バージョン	新バージョン
AOBA-A	Fortran Compiler	3.0.8	3.2.0
	C/C++ Compiler	3.0.8	3.2.0
	MPI	2.10.0	2.15.0
AOBA-B	AOCC Compiler	2.2	3.0
	Intel Compiler	Parallel Studio XE 2020 Update2	oneAPI 2021

コンパイラの詳細については以下をご覧ください。

SX-AT : <https://www.hpc.nec/documentation>

AOCC Compiler: <https://developer.amd.com/amd-aocc/>

Intel Compiler: <https://www.xlsoft.com/jp/products/intel/oneapi/index.html>

(共同利用支援係, 共同研究支援係)

商用アプリケーションのバージョンアップについて

数式処理システム「Mathematica」および、数値解析ソフトウェア「MATLAB」のバージョンアップを行いますのでお知らせいたします。

新機能の概要、機能の詳細については開発元 Web サイトをご参照ください。

Mathematica

- バージョン : 12.2
- バージョンアップ日 : 2021年4月6日
- サービスホスト : フロントエンドサーバ
- 起動コマンド : (GUI版) mathematica (テキスト版) math
- 開発元 Web サイト : <https://www.wolfram.com/mathematica/new-in-12/>

MATLAB

- バージョン : 2021a
- バージョンアップ日 : 2021年4月6日
- サービスホスト : フロントエンドサーバ、AOBA-B
- 起動コマンド : (GUI版) matlab (テキスト版) matlab -nojvm -nosplash -nodesktop -nodisplay
- 開発元 Web サイト : https://jp.mathworks.com/products/new_products/latest_features.html?s_tid=hp_release_2021a

(共同利用支援係)

令和3年度共同研究について

本センターでは、大規模科学計算システムの利用者と共同でプログラムやアルゴリズムを開発する共同研究を行っています。今年度の募集に応募されたものについて共同研究専門部会で審査の結果、以下の10件が採択されましたのでお知らせします。

[A] 若手・女性研究者支援課題

No.	申請者	所属	研究課題
A-1	松川 嘉也	東北大学 大学院工学研究科	熱分解反応場における温度の変動が化学反応速度に及ぼす影響の解明

[B] 萌芽型課題

No.	申請者	所属	研究課題
B-1	有馬 卓司	東京農工大学 大学院工学研究院	大規模電磁界解析を可能とする複数領域 FDTD 法の開発に関する研究
B-2	佐々木 大輔 高橋 俊	金沢工業大学 工学部 東海大学 工学部	直交格子法による移動境界問題の解法に関する研究
B-3	松岡 浩	技術士事務所 AI コンピューティングラボ	リカレント型ビット演算による縦渦挙動のマルチスケール創発解析
B-4	山本 義暢	山梨大学 大学院総合研究部	乱流大規模直接数値計算コードの SX-Aurora TSUBASA 上での性能評価

[C] 一般課題

No.	申請者	所属	研究課題
C-1	伊藤 純至	東北大学 大学院理学研究科	アンサンブルカルマンフィルタと非静力学数値モデルを用いた日本領域の気象の長期再解析
C-2	越村 俊一	東北大学 災害科学国際研究所	SX-Aurora TSUBASA の津波のリアルタイム予測計算の性能評価
C-3	陳 強	東北大学 大学院工学研究科	先進的な電磁界数値解析法の構築とその応用に関する研究
C-4	塚原 隆裕	東京理科大学 理工学部	層流-乱流が共存する亜臨界遷移流れを対象とした大規模計算領域による直接数値解析
C-5	藤井 孝藏	東京理科大学 工学部	プラズマアクチュエータの新たな利用推進と関連課題解決に関する研究その3

(スーパーコンピューティング研究部、共同研究支援係)

計算科学・計算機科学人材育成のための スーパーコンピュータ無償提供制度について

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、計算科学・計算機科学分野での教育貢献・人材育成を目的として、無料で大規模科学計算システムを利用できる制度を用意しております。提供の対象は、大学院・学部での講義実習等の教育目的(卒業論文、修士論文、博士論文での利用を除く)に限ります。利用を希望される場合は以下の情報を添えて、講義開始の2週間前までに edu-prog@cc.tohoku.ac.jp 宛お申し込みください。

- ・講義担当者氏名
- ・同所属
- ・同連絡先（住所，電話，電子メール）
- ・講義名
- ・講義実施日時（1セメスターの中で実習を予定している回数）
- ・センター端末機室等での実習利用希望の有無（必要であれば予定日時）
- ・講師派遣の希望の有無
- ・講義シラバス
- ・講義ウェブ（もし用意されていれば）
- ・受講者数（予定）
- ・必要とする理由（利用目的：例えば、数値シミュレーションの研修を行うなど）
- ・期待できる教育効果
- ・居住性チェックリストの提出（受講者に外国人が居る場合）
参照：<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/apply-for-use/#toc3>
- ・その他（センターへの要望等）

なお、講義終了後、報告書（広報誌 SENAC へ掲載）の提出をお願いいたします。
たくさんのお申し込みをお待ちしております。不明な点は、edu-prog@cc.tohoku.ac.jp までお問い合わせください。

（スーパーコンピューティング研究部，共同利用支援係）

民間企業利用サービスについて

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、社会貢献の一環として大学で開発された応用ソフトウェアとスーパーコンピュータを、民間企業の方が無償または有償にてご利用頂ける制度を用意しております。本サービスにおける利用課題区分は以下の2つとなります。

- ・大規模計算利用（有償利用）
- ・トライアルユース（無償利用）

詳細については以下を参照し、利用を希望される場合は共同利用支援係までお申し込みください。

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

【問い合わせ先】

共同利用支援係（uketuke@cc.tohoku.ac.jp）

（共同利用支援係）

大規模科学計算システムの機関（部局）単位での利用について

東北大学サイバーサイエンスセンターでは、大規模科学計算システムをご利用いただくにあたり、利用負担金を利用者単位のほか、機関（部局）単位で年間定額をお支払いいただくことで利用できるサービスも提供しております。このサービスは、機関（部局）単位でお申し込みいただくことにより、その構成員であれば、各研究室が個別に利用負担金を支払うことなく、下記システムを利用できる仕組みとなっております。

これまで計算機を利用する機会がなかった研究者による新たなニーズへの対応や研究室の計算機では実行できなかった大規模シミュレーションが実行可能であり、また自前で計算機を導入するためのコストや運用コストも削減可能です。すでにご利用いただいている機関（部局）からは、当初の予想を上回るご利用をいただき、ご好評をいただいております。

占有利用・共有利用については必要に応じて取り混ぜながら、ご予算に合わせて、年間定額により利用することが可能となっておりますので、ぜひご相談ください。

記

【利用可能なシステム】

- ・サブシステム AOBA-A
- ・サブシステム AOBA-B
- ・ストレージシステム
- ・大判カラープリンター（光沢紙、ソフトクロス紙）

【問い合わせ先】

共同利用支援係 (uketuke@cc. tohoku. ac. jp)

(共同研究支援係, 共同利用支援係)

— SENAC 執筆要項 —

1. お寄せいただきたい投稿内容

サイバーサイエンスセンターでは、研究者・技術者・学生等の方々からの原稿を募集しております。以下の内容で募集しておりますので、皆さまのご投稿をお待ちしております。なお、一般投稿いただいた方には、謝礼として負担金の一部を免除いたします。

- ・一般利用者の方々が関心をもたれる事項に関する論説
- ・センターの計算機を利用して行った研究論文の概要
- ・プログラミングの実例と解説
- ・センターに対する意見、要望
- ・利用者相互の情報交換

2. 執筆にあたってご注意いただく事項

- (1)原稿は横書きです。
- (2)術語以外は、「常用漢字」を用い、かなは「現代かなづかい」を用いるものとします。
- (3)学術あるいは技術に関する原稿の場合、200字～400字程度のアブストラクトをつけてください。
- (4)参考文献は通し番号を付し末尾に一括記載し、本文中の該当箇所に引用番号を記入ください。
 - ・雑誌：著者, タイトル, 雑誌名, 巻, 号, ページ, 発行年
 - ・書籍：著者, 書名, ページ, 発行所, 発行年

3. 原稿の提出方法

原稿のファイル形式はWordを標準としますが、PDFでの提出も可能です。サイズ*は以下を参照してください。ファイルは電子メールで提出してください。

—Wordの場合—

- ・サイズ：A4
- ・余白：上=30mm 下=25mm 左右=25mm 綴じ代=0
- ・標準の文字数（45文字47行）

<文字サイズ等の目安>

- ・表題=ゴシック体 14pt 中央
- ・副題=明朝体 12pt 中央
- ・氏名=明朝体 10.5pt 中央
- ・所属=明朝体 10.5pt 中央
- ・本文=明朝体 10.5pt
- ・章・見出し番号=ゴシック体 11pt～12pt

*余白サイズ、文字数、文字サイズは目安とお考えください。

4. その他

- (1)一般投稿を頂いた方には謝礼として、負担金の一部を免除いたします。免除額は概ね1ページ1万円を目安とします。詳細は共同利用支援係までお問い合わせください。
- (2)投稿予定の原稿が15ページを超える場合は共同利用支援係まで前もってご連絡ください。
- (3)初回の校正は、執筆者が行って、誤植の防止をはかるものとします。
- (4)原稿の提出先は次のとおりです。

東北大学サイバーサイエンスセンター内 情報部情報基盤課共同利用支援係

e-mail uketuke@cc.tohoku.ac.jp

TEL 022-795-3406

スタッフ便り

新型コロナウイルスの流行から一年以上が経過し、生活様式がずいぶん様変わりしました。with コロナ生活が始まったばかりのころは、外食がなくなってしばらく体重が減りましたが、最近はいわゆるコロナ太りで体重が増える一方です。起きている間は、パソコンに向かって仕事をしているか、動画配信サービスで昔のテレビドラマや映画を見ているか、寝っ転がってスマホをいじっているか、くらししか行動パターンがない生活を続けているので、それはまあ、運動不足になりますよね。分かっちゃいるけどやめられないです。つい先日、高1の娘に教えてもらいながら、世界的に流行っている K-POP のダンスに挑戦してみました。自分が思っている以上に体が全然動きませんでした。マルマルモリモリやら AKB やら逃げ恥のころは、上手に踊ることはもちろんできないにしても、まだそれっぽく真似することくらいはできたような気がするんですけど・・・もともといわゆる運動音痴な部類の人間ですし、挑戦したダンスの難易度もやたら高かったですし、年齢のせいもあるのですが、とにかく体が重いのを痛感しました。健康診断や人間ドックで血液検査の結果を見るのが怖いので、そろそろ何とかしなければと思っている今日この頃です。

みなさまも健康に留意して、この困難な時期を乗り越えましょう！(H.T)

暖かくなってきたので趣味の車のオイル交換をしました。昔は日産の高出力ターボ車に乗っていたので、5w-50のオイルを使用していましたが、最近の車はターボエンジンと言ってもダウンサイジングターボのため、エンジン自体にそれほど負荷がかからない(といっても0.7キロくらいは過給されてる)こともあり、5w-30程度の比較的安いオイルを入れています。ちなみにメーカー指定では0w-20という低粘度が指定されていますが、大丈夫とはわかっているのですがなんとなく怖いので入れられません。オイルを抜く際は下抜きをした方が良いのですが、実際に抜けた量を比較すると上抜きでもほぼ変わらないことから、最近では上抜きで抜いています。ジャッキアップする必要がないので腰に優しいです(笑)。上抜きで抜く場合は、バキュームポンプを使用しています。これは真空にしてオイルを引っ張る仕組みですが、夏場ならそのままでも大丈夫ですけど、冬場はオイルが硬いためになかなか抜けてきません。その為、多少暖気をしてオイルの温度を40度くらいに上げてから抜くと早く抜けます。なお、スバル車の水平対向エンジンは、オイルがオイルパンに戻るのに時間がかかるので、暖めてすぐに抜くよりも、普通に走ってエンジンを止めて1時間程度待ってから抜くと温度も下がって丁度いい感じとなります。慣れと抜いて入れ終わるまで20分程度で終わる作業ですが、寒い日だとやはり面倒だと感じてしまいます。これが電気自動車になりインホイールモーター駆動となれば、オイルが必要なエンジンやミッション、デフがなくなり、オイル交換の作業自体しなくて済むようになるのでしょうか。趣味のオイル交換作業がなくなるのは寂しいですが、次の世代の車がどんなものかと楽しみなのは、やはり車好きなせいですかね。(770)

サイバーサイエンスセンター・情報部情報基盤課スタッフ退職者と異動のお知らせ

2021. 3. 31 付け

[退職]

曾根 秀昭 教授(定年退職、情報シナジーマシナリー特任教授へ)
吉澤 誠 教授(定年退職、産学連携機構イノベーション戦略推進センター特任教授へ)
斉藤 くみ子 共同利用支援係(定年退職、時間雇用職員へ)

2021. 4. 1 付け

[転出]

石谷 由岐子 総務係主任(宮城教育大学経営企画課人事係主任へ)
山口 貴大 会計係員(共通事務センター川内南キャンパス事務センター支援総括係へ)
山口 博史 情報セキュリティ係長(オンライン業務推進課情報セキュリティ係長へ)
佐藤 充 情報セキュリティ係主任(オンライン業務推進課情報セキュリティ係主任へ)
北澤 秀倫 情報セキュリティ係技術職員(オンライン業務推進課情報セキュリティ係へ)
ムルヤ・アグン スーパーコンピューティング研究部学術研究員(就職)

[転入]

下村 陽一 特任准教授(NECソリューションイノベータ東北支社から)
神田 裕子 総務係主任(総務企画部総務課総務第二係主任から)
佐々木明里 会計係主任(医学系研究科経理課財務係から)



SENAC 編集部会

滝沢寛之 水木敬明 後藤英昭 伊藤昭彦
早坂和勝 大泉健治 小野 敏 斉藤くみ子

令和3年4月発行
編集・発行 東北大学
サイバーサイエンスセンター
仙台市青葉区荒巻字青葉6-3
郵便番号 980-8578
PDF作成 株式会社 東誠社

スーパーコンピュータ AOBA システム一覧

計算機システム	機種
サブシステム AOBA-A	SX-Aurora Tsubasa
サブシステム AOBA-B	LX 406Rz-2

サーバとホスト名

ログインサーバ	login.cc.tohoku.ac.jp
データ転送サーバ	file.cc.tohoku.ac.jp

サービス時間

利用システム名等	利用時間帯
サブシステム AOBA-A	連続運転
サブシステム AOBA-B	連続運転
サーバ	連続運転
館内利用	平日 8:30~21:00

サブシステム AOBA-A の利用形態と制限値

利用形態	キュー名	VE 数※	実行形態	最大経過時間 既定値/最大値	メモリサイズ
無料	sxf	1	1VE	1 時間/1 時間	48GB×VE 数
共有	sx	1	1VE	72 時間/720 時間	
		2~256	8VE 単位で確保 (VH を共用しない)		
sxmix	2~8	1VE 単位で確保 (VH を共用する)			
占有	個別設定				

※ 2VE以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

サブシステム AOBA-B の利用形態と制限値

利用形態	キュー名	ノード数※	最大経過時間 既定値/最大値	メモリサイズ
共有	lx	1~16	72 時間/720 時間	256GB×ノード数
占有	個別設定			

※ 2ノード以上を利用した並列実行にはMPIの利用が必用

目次

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広報 Vol.54 No.2 2021-4

[共同研究成果]

- 数値解の安定条件を考慮した y 形溶接構造の冷却過程における
水素凝集挙動解析および本解析プログラムによる数値解析
高速化へ向けての考察尾関 郷・横堀 壽光・大見 敏仁
小川 道夫・糟谷 正 1

[大規模科学計算システム]

- 鍵ペアの作成とログイン方法 11
ストレージシステムの利用法 18
アプリケーションサービスの紹介 24

[お知らせ]

- 令和3年度サイバーサイエンスセンター講習会計画 36

[解説]

- スーパーコンピュータ AOBA での MATLAB の並列処理
.....齊藤甲次朗・加藤 順之 37

[報告]

- 令和2年度サイバーサイエンスセンター講習会報告 48
第31回高性能シミュレーションに関するワークショップ (WSSP) を開催しました
.....滝沢 寛之 49

[退職のご挨拶]

- 退職のご挨拶曾根 秀昭 51
退職にあたって吉澤 誠 52
退職にあたって齊藤くみ子 54

[スーパーコンピュータ AOBA のお知らせより]

- 令和3年度利用負担金について 55
コンパイラのバージョンアップについて 58
商用アプリケーションのバージョンアップについて 58
令和3年度共同研究について 59
計算科学・計算機科学人材育成のための
スーパーコンピュータ無償提供制度について 59
民間企業利用サービスについて 60
大規模科学計算システムの機関 (部局) 単位での利用について 61

- 執筆要項 62

- スタッフ便り 63