

東北大学金属材料研究所
並列計算・インフォマティクスサーバ
マニュアル

2023年9月27日

東北大学金属材料研究所
計算材料学センター

目次

1	並列計算・インフォマティクスサーバ概要	1-3
1.1	構成・スペック	1-4
1.2	サーバ構成	1-4
2	ログイン方法	2-5
2.1	可視化サーバへのログイン方法	2-6
2.2	プライベートインフォマティクスサーバ(仮想サーバ)へのログイン方法	2-6
2.2.1	予約ポータルから仮想サーバの予約	2-6
2.2.2	仮想サーバへのログイン方法	2-7
3	ストレージの構成と使用方法	3-8
3.1	ストレージの構成と使用方法	3-9
4	アプリケーション使用方法	4-11
4.1	可視化サーバ	4-13
4.1.1	GaussView	4-15
4.1.2	ADF-GUI	4-17
4.1.3	Mathematica	4-19
4.1.4	AVS/Express	4-20
4.1.5	QuantumATK NanoLab	4-21
4.1.6	Molekel	4-23
4.1.7	MOLDEN	4-23
4.1.8	XCrySDen	4-24
4.1.9	ANSYS Mechanical CFD	4-25
4.1.10	VESTA	4-26
4.2	プライベートインフォマティクスサーバ(仮想サーバ)	4-27
4.2.1	Gaussian16	4-29
4.2.2	GaussView	4-30
4.2.3	Mathematica	4-31
4.2.4	ANSYS Mechanical CFD	4-32
4.2.5	MATLAB	4-33
4.2.6	CRYSTAL	4-34
4.2.7	VASP	4-34
4.2.8	WIEN2k	4-35
4.2.9	SIESTA	4-35
4.2.10	ABINIT	4-36
4.2.11	CPMD	4-36

4.2.12 QUANTUM ESPRESSO.....	4-36
4.2.13 LAMMPS	4-37

1

1 並列計算・インフォマティクスサーバ概要

[1.1 構成・スペック](#)

[1.2 サーバ構成](#)

1.1 構成・スペック

並列計算・インフォマティクスサーバのスペック

サーバ名	プライベートインフォマティクスサーバ(仮想サーバ)	可視化サーバ
機種名	HPE ProLiant DL360 Gen10	HPE ProLiant DL380 Gen10
サーバ台数	29 台(17 台は計算サーバ)	5 台
CPU	Intel Xeon Gold 6154 ・周波数 :3.0 GHz ・CPU コア数:18 Core ・搭載数 :2 基/サーバ	Intel Xeon Gold 6140 ・周波数 :2.3GHz ・CPU コア数 :18Core ・搭載数 :2 基/サーバ
アクセラレータ	-	-
主記憶容量	576 GiB/サーバ	576 GiB/サーバ

1.2 サーバ構成

並列計算・インフォマティクスサーバの構成

サーバ種別	用途	台数	設置場所
プライベートインフォマティクスサーバ(仮想サーバ)	仮想マシン用	12 台ノード	計算材料学センター 101 室
可視化サーバ	可視化を行うサーバ	5 台	計算材料学センター 101 室

2

2 ログイン方法

[2.1 可視化サーバへのログイン方法](#)

[2.2 プライベートインフォマティクスサーバ\(仮想サーバ\)への
ログイン方法](#)

2.1 可視化サーバへのログイン方法

ssh リレーサーバ cms-ssh.sc.imr.tohoku.ac.jp にログインします。

```
$ ssh -l username cms-ssh.sc.imr.tohoku.ac.jp
```

可視化サーバである vis へログインします。

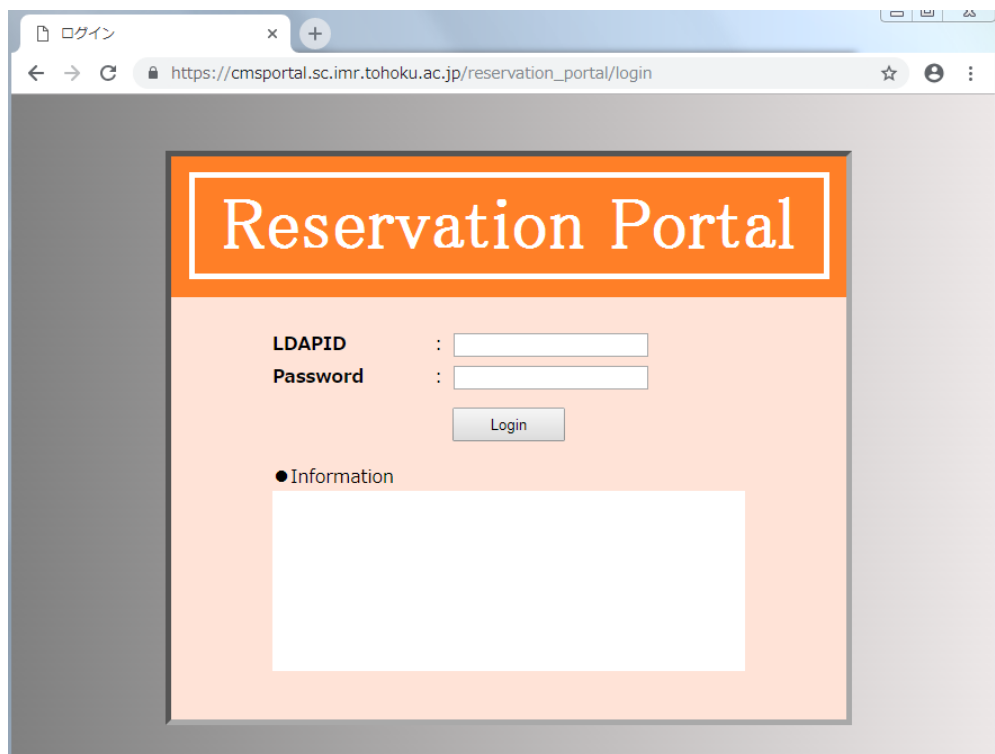
```
$ ssh vis
```

2.2 プライベートインフォマティクスサーバ(仮想サーバ)への ログイン方法

2.2.1 予約ポータルから仮想サーバの予約

以下の URL を指定し、予約ポータルへログインします。Firefox または Chrome でご利用ください。
Microsoft Edge および Internet Explorer ではご利用できません。

```
https://cmsportal.sc.imr.tohoku.ac.jp/reservation\_portal/login
```



ログインの際にはスーパーコンピューティングシステムの ID、パスワードが必要です。

仮想サーバの予約方法の詳細は予約管理ポータル機能利用者マニュアルをご参照ください。

仮想ホストが利用可能になりましたら、入力頂いたメールアドレスへ以下のご案内が送信されます。

通知メール例：

【予約管理ポータル】仮想マシン利用開始のお知らせ

username 様

ご予約頂いておりました仮想マシンが本日より利用可能となりました。

ご利用期間は

2018-06-18 ~ 2018-06-29

となります。

以下の仮想マシンがご利用になれます。

先頭マシンが SSH 接続可能となっております。

2台目以降は先頭マシンを踏み台として接続してください。

Name : RESERVE-16-000

IP : XXX.XXX.XXX.XXX

User : username

PW : QyWWZAGX

初期パスワードは利用開始後に変更してください。

2.2.2 仮想サーバへのログイン方法

ssh リレーサーバ cms-ssh.sc.imr.tohoku.ac.jp にログインします。

```
$ ssh -l username cms-ssh.sc.imr.tohoku.ac.jp
```

通知メールに記載されているユーザー名、IP アドレスを指定します。

```
$ ssh -l username XXX.XXX.XXX.XXX
```

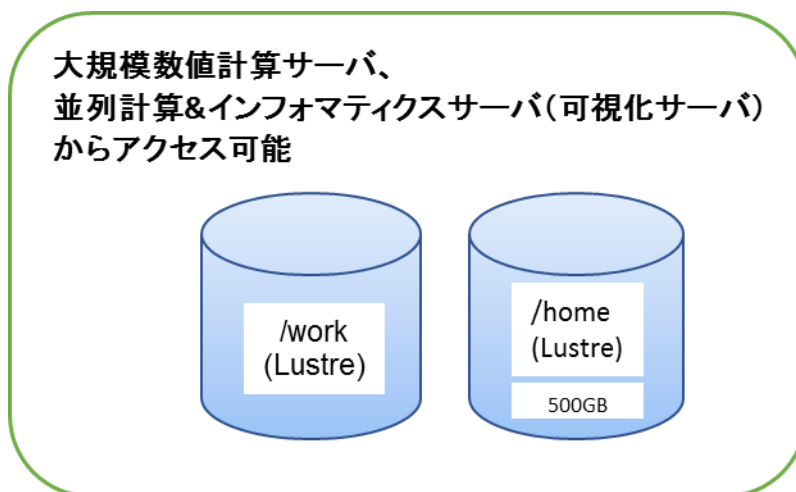
3

3 ストレージの構成と使用方法

[3.1 ストレージの構成と使用方法](#)

3.1 ストレージの構成と使用方法

スーパーコンピューティングシステムのストレージ構成を示します。



ストレージの構成と使用方法

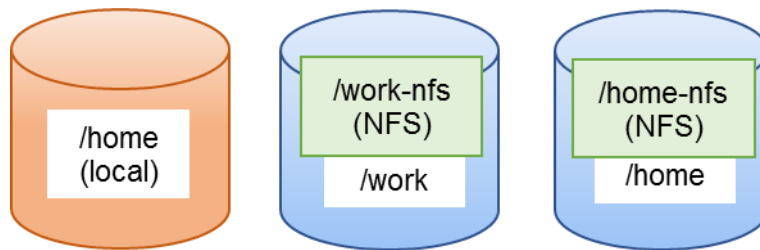
アクセス可能なマシン	領域名	quota	説明
①大規模並列計算サーバ ②アクセラレータサーバ ③並列計算&インフォマティクスサーバ	/home/UID	500GB	ユーザーのホームディレクトリ。スパコンシステムのデータ全般を保存します。
①大規模並列計算サーバ ②アクセラレータサーバ	/work/xxx	なし	高速な Lustre 領域です。出力ファイルの合計が 500GB 以上となる場合は scratch を利用してください。データは home 領域に移し、不要なデータは削除するようにしてください。
③並列計算・インフォマティクスサーバ	/work/ scratch/ xxx	なし	Lustre 領域です。Gaussian などの強烈な IO が発生する一時ファイルを保存するための領域です。1ヶ月間アクセスがないファイルは自動的に削除されます。

(*)UID: ユーザーアカウント名

xxx: ユーザーが作成した任意のディレクトリまたはファイル名

(*)/work 以下の scratch 領域は 1ヶ月間アクセスがないファイルは自動的に削除されます。

仮想サーバのストレージ構成を以下に示します。



ストレージの構成と使用方法

領域名	quota	説明
/home/UID	なし	ユーザーのホームディレクトリ。仮想サーバのローカル領域であり、容量が小さく、仮想サーバ利用期間終了後は削除されます。そのため、/home-nfs、/work-nfs をご利用ください。
/home-nfs/UID	500GB	大規模並列計算サーバの home 領域を NFS マウントしています。
/work-nfs	なし	大規模並列計算サーバの work 領域を NFS マウントしています。

(*)UID: ユーザーアカウント名

4

4 アプリケーション使用方法

4.1 可視化サーバ

4.1.1 GaussView6

4.1.2 ADF-GUI

4.1.3 Mathematica

4.1.4 AVS/Express

4.1.5 QuantumATK NanoLab

4.1.6 Molekel

4.1.7 MOLEDEN

4.1.8 XCrySDen

4.1.9 ANSYS Mechanical CFD

4.1.10 VESTA

4.2 プライベートインフォマティクスサーバ(仮想サーバ)

4.2.1 Gaussian16

4.2.2 GaussView6

4.2.3 Mathematica

4.2.4 ANSYS Mechanical CFD

4.2.5 MATLAB

4.2.6 CRYSTAL

4.2.7 VASP

4.2.8 WIEN2k

4.2.9 SIESTA

4.2.10 ABINIT

4.2.11 CPMD

4.2.12 QUANTUM ESPRESSO

4.2.13 LAMMPS

4.1 可視化サーバ

可視化サーバ以下のアプリケーションが利用可能です。
詳細は各アプリケーションの利用方法を参照してください。

#	アプリケーション名称	バージョン	動作種別
1	GaussView 6	6.0.16 6.1.1	GUI
2	ADF-GUI	2017.113 2018.105 2019.102 2019.304 2020.101 2021.102 2021.106 2022.103 2023.103	GUI
3	Mathematica	13.2.1	GUI
4	AVS/Express	8.5	GUI
5	QuantumATK NanoLab	2019.03 2019.12 2020.09 2021.06 2021.06-SP2 2022.03 2022.12-SP1	GUI
6	Molekel	5.4.0	GUI
7	MOLDEN	5.8	GUI
8	XCrySDen	1.5.60	GUI
9	ANSYS Mechanical CFD	2020R1 2021R1 2021R2 2022R2	GUI
10	VESTA	3.4.6	GUI

GUI アプリケーションを Windows から使用する場合は、SSH クライアントソフトウェアと X サーバソフトウェアが必要です。Macintosh から使用する場合は、X サーバソフトウェア (XQuartz など) が必要です。X 転送を有効にして可視化サーバ(vis.sc.imr.tohoku.ac.jp)にログインしてください。

(例)

```
$ ssh -X -l username cms-ssh.sc.imr.tohoku.ac.jp  
> ssh -l username vis.sc.imr.tohoku.ac.jp
```

4.1.1 GaussView

以下のコマンドを実行します。

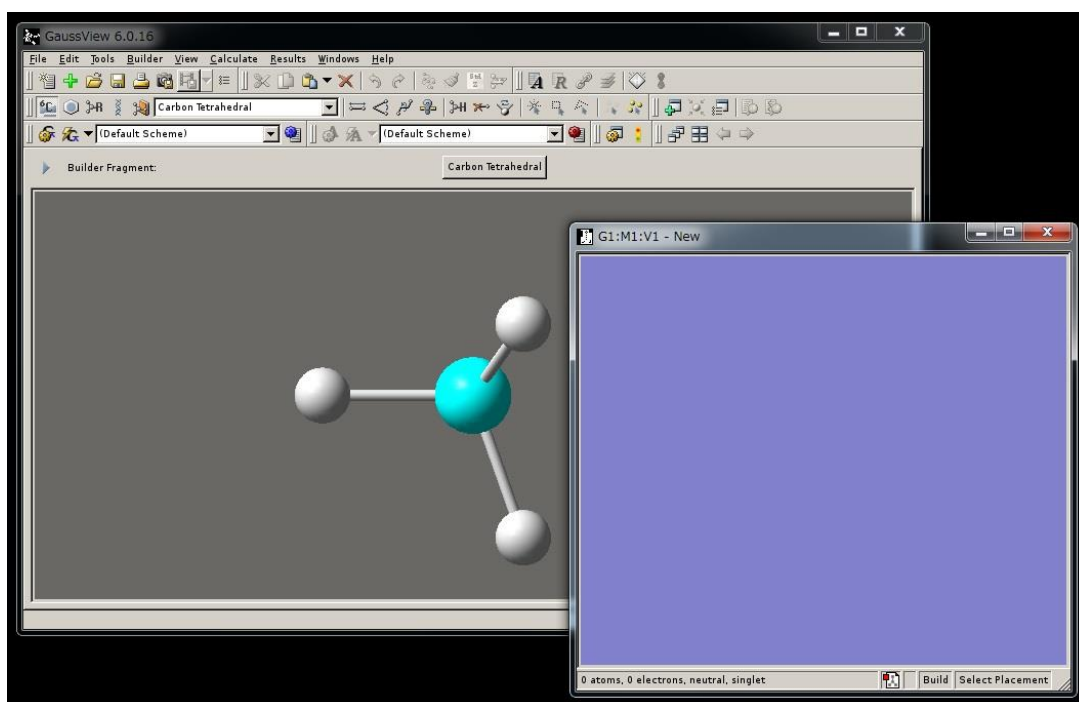
•6.0.16

```
$ gview
```

•6.1.1

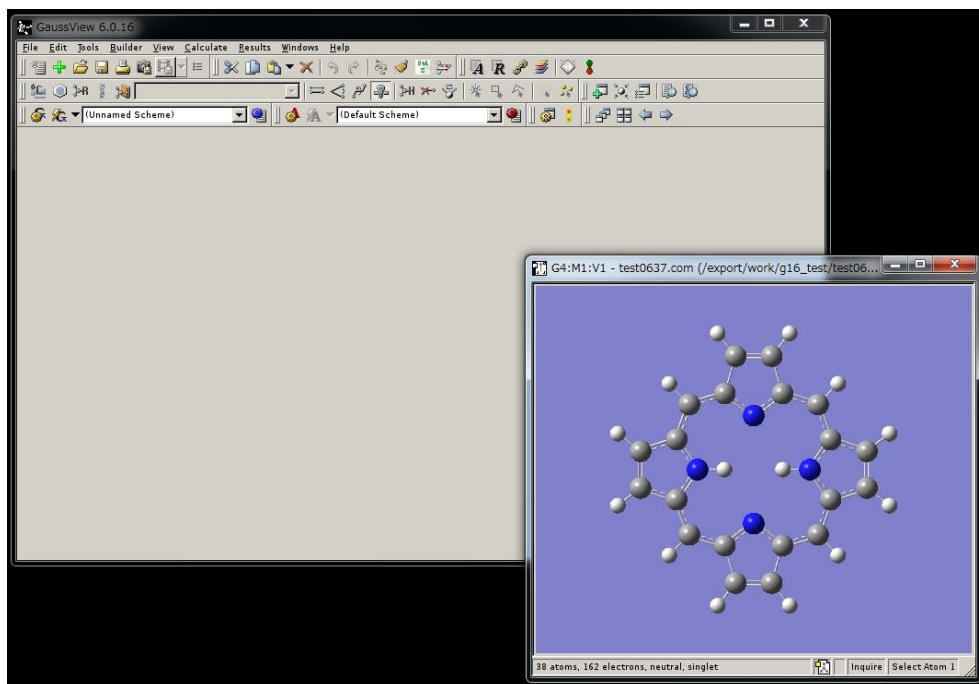
```
$ gview-611
```

以下の画面が起動します。



(例)

以下のように、Gaussian の入力ファイルを読み込むことが可能です。



4.1.2 ADF-GUI

ADF を使用するためには、当センターで利用を許可している必要があります。
ADF の利用を希望される場合は、[こちら](#)までご連絡ください。

ADF-GUI は vis1.sc.imr.tohoku.ac.jp にログインしてご利用下さい。

(例)

```
$ ssh -X -l username cms-ssh.sc.imr.tohoku.ac.jp  
> ssh -l username vis1.sc.imr.tohoku.ac.jp
```

以下のコマンドを実行します。

・ADF 2023.103

```
$ amsinput
```

・ADF 2022.103

```
$ amsinput2022.103
```

・ADF 2021.106

```
$ amsinput2021.106
```

・ADF 2021.102

```
$ amsinput2021.102
```

・ADF 2020.101

```
$ amsinput2020.101
```

・ADF 2019.304

```
$ adfinput
```

・ADF 2019.102

```
$ adfinput2019.102
```

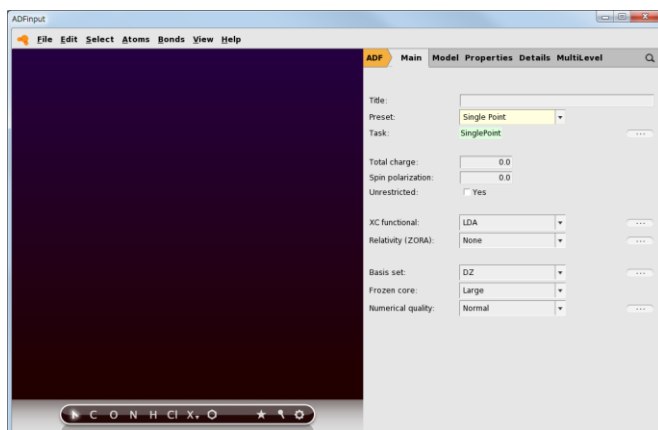
・ADF 2018.105

```
$ adfinput2018.105
```

・ADF 2017.113

```
$ adfinput2017.113
```

以下の画面が起動します。



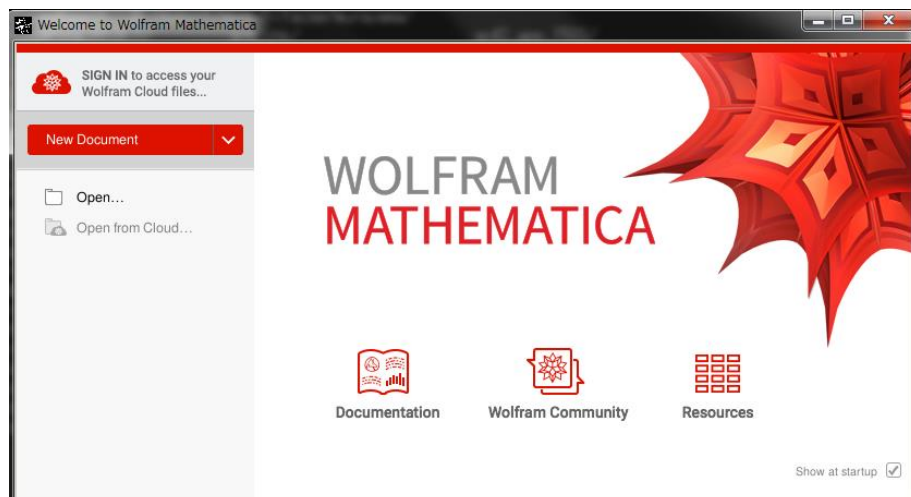
4.1.3 Mathematica

各自の PC にインストールして使用することができます。使用したい方は[こちら](#)までご連絡ください。

以下のコマンドを実行します。

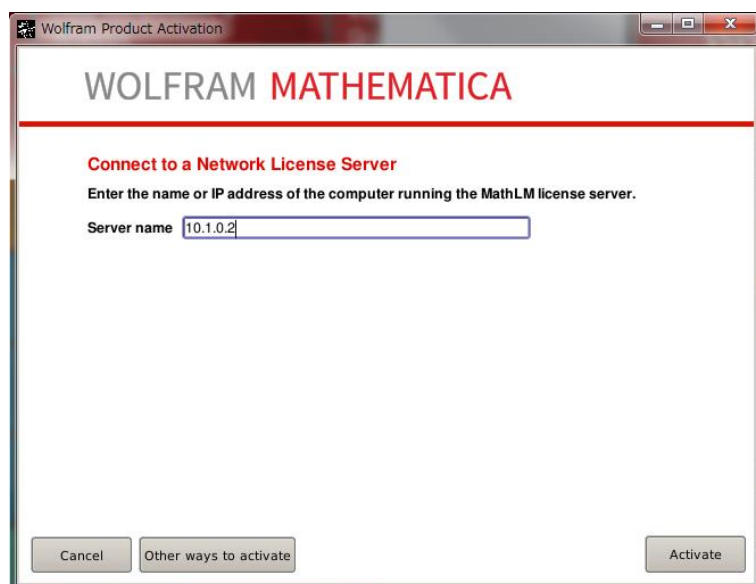
```
$ Mathematica
```

以下の画面が起動します。



注意

最初の起動に限りライセンスのアクチベーション画面が表示されることがあります。



ライセンスサーバの IP アドレス 10.1.0.2 を入力し Activate ボタンを押して認証します。

もし IP アドレスが入力できない場合は other ways to activate ボタンを押し、認証方法として network license を選んでからライセンスサーバの IP アドレスを入力します。

4.1.4 AVS/Express

各自の PC にインストールして使用することができます。使用したい方は[こちら](#)までご連絡ください。

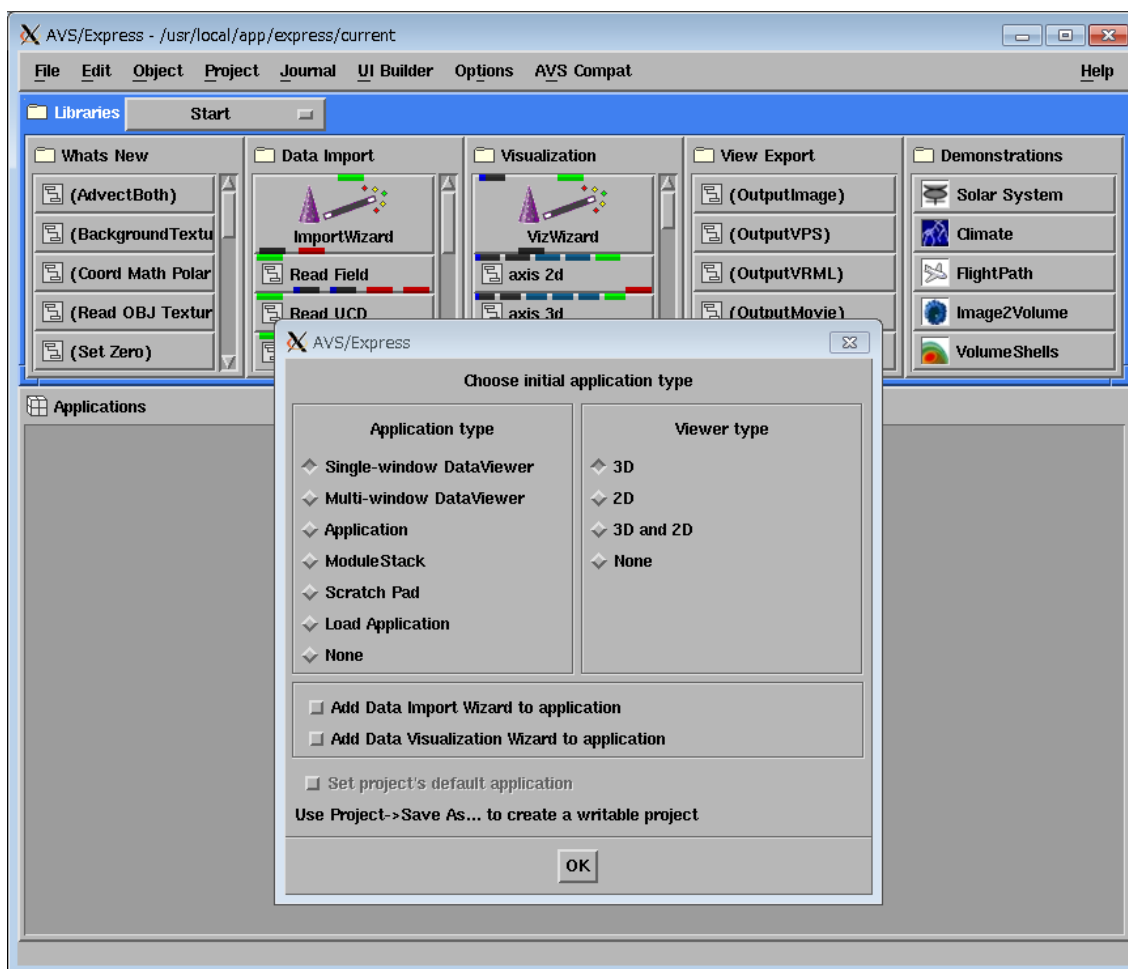
AVS で開発を行う場合は以下のコマンドを実行します。

```
$ express -mavs -nohw
```

AVS で開発を行わず、表示のみを行う場合は以下のコマンドを実行します。

```
$ express.static -mavs -nohw
```

以下の画面が起動します。



4.1.5 QuantumATK NanoLab

各自の Windows PC にインストールして使用することができます。使用したい方は[こちら](#)までご連絡ください。

以下のコマンドを実行します。

•2022.12-SP1

```
$ quantumatk
```

•2022.03

```
$ /usr/local/app/QuantumATK/QuantumATK-T-2022.03/bin/quantumatk
```

•2021.06-SP2

```
$ /usr/local/app/QuantumATK/QuantumATK-S-2021.06-SP2/bin/quantumatk
```

•2021.06

```
$ /usr/local/app/QuantumATK/QuantumATK-S-2021.06/bin/quantumatk
```

•2020.09

```
$ /usr/local/app/QuantumATK/QuantumATK-R-2020.09/bin/quantumatk
```

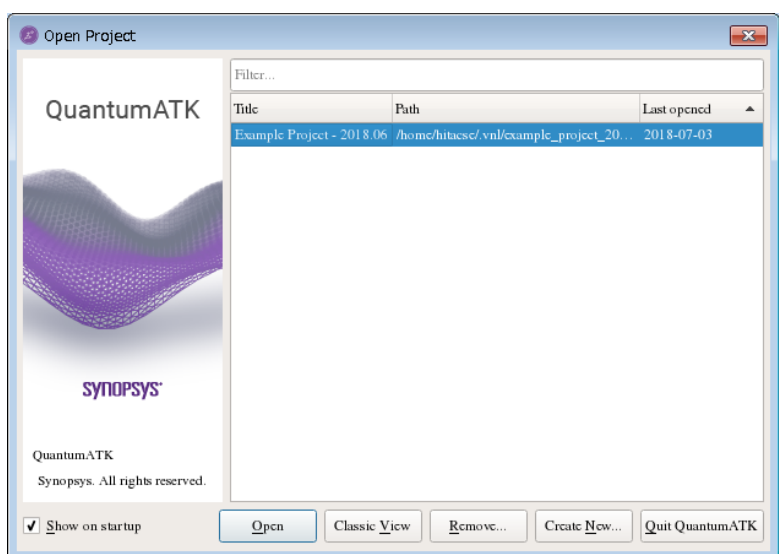
•2019.12

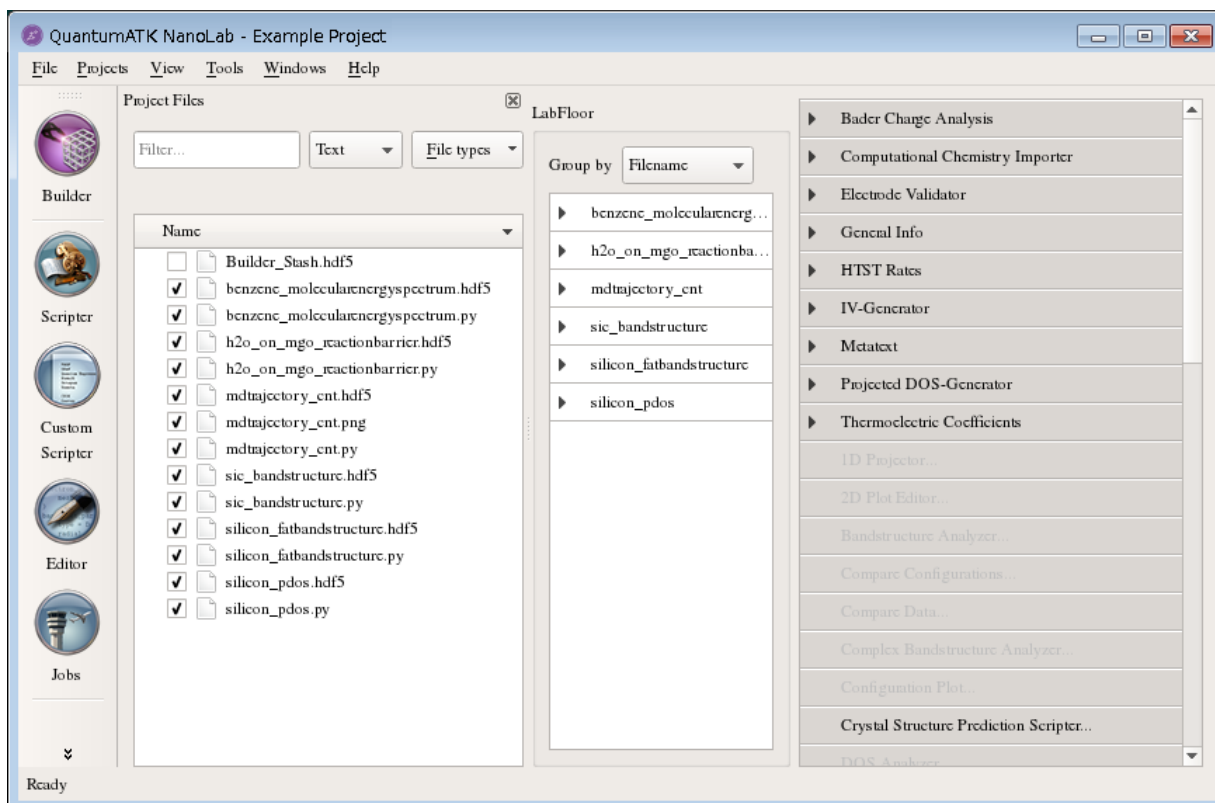
```
$ /usr/local/app/QuantumATK/QuantumATK-Q-2019.12/bin/quantumatk
```

•2019.03

```
$ /usr/local/app/QuantumATK/QuantumATK-P-2019.03/bin/quantumatk
```

以下の画面が起動します。



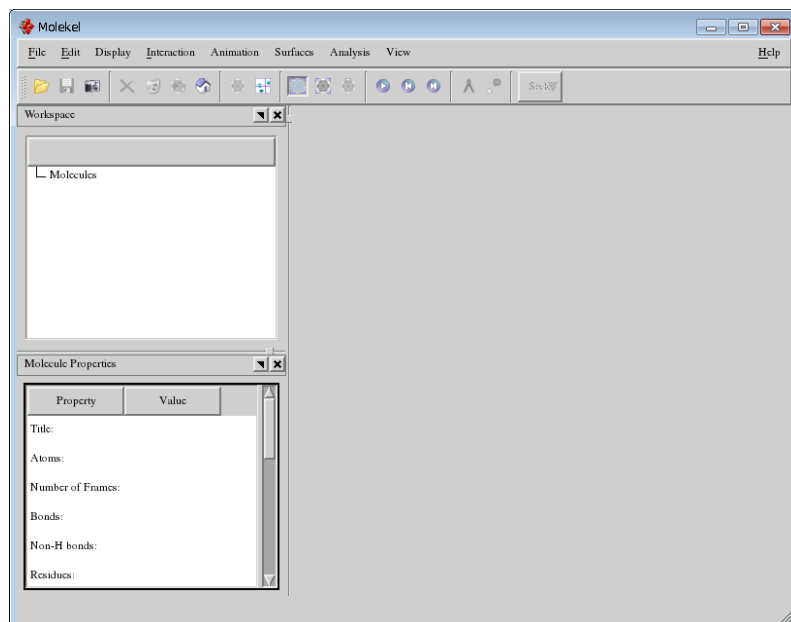


4.1.6 Molekel

下のコマンドを実行します。

```
$ molekel
```

以下の画面が起動します。

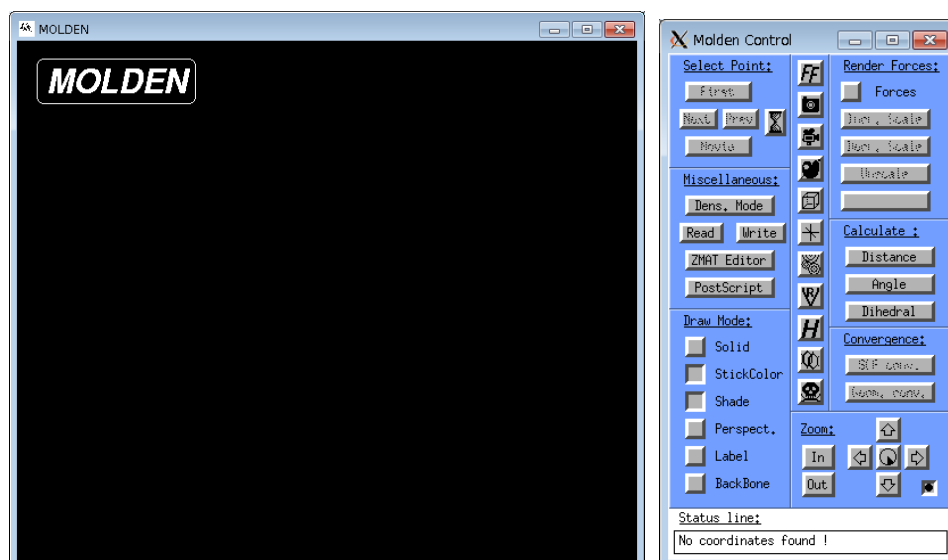


4.1.7 MOLDEN

以下のコマンドを実行します。

```
$ molder
```

以下の画面が起動します。

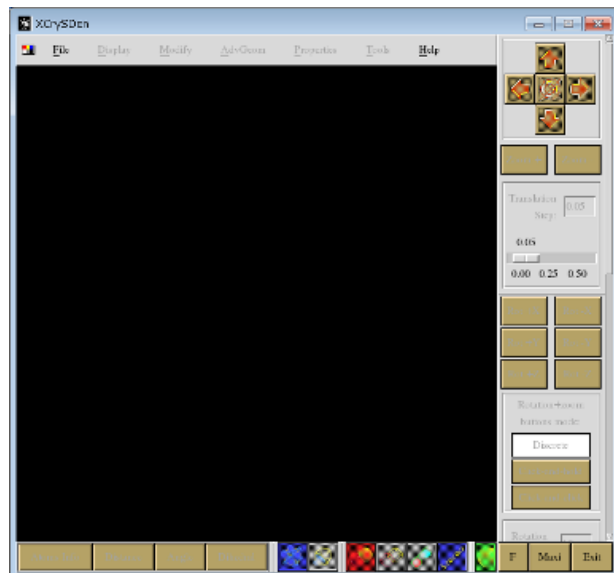


4.1.8 XCrySDen

以下のコマンドを実行します。

```
$ xcrysdn
```

以下の画面が起動します。



4.1.9 ANSYS Mechanical CFD

各自の PC にインストールして使用することができます。使用したい方は[こちら](#)までご連絡ください。

以下のコマンドを実行します。

・2022R2

```
$ /usr/local/app/ansys/v222/ansys/bin/launcher
```

・2021R2

```
$ launcher
```

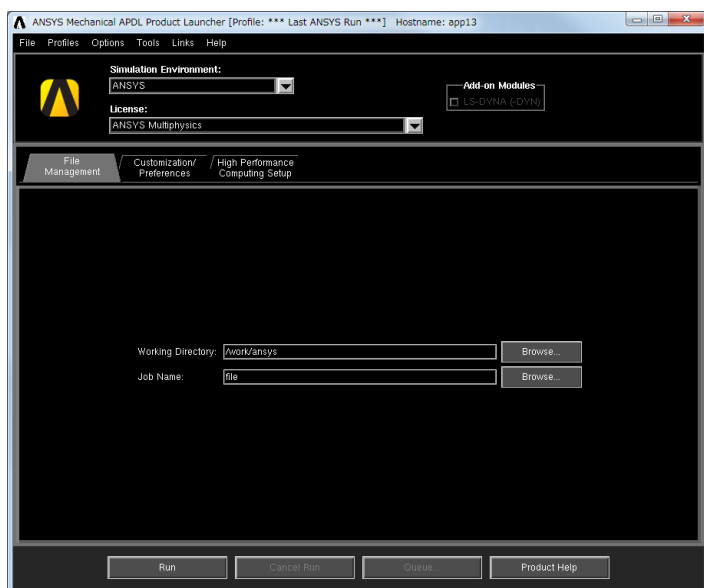
・2021R1

```
$ /usr/local/app/ansys/v211/ansys/bin/launcher
```

・2020R1

```
$ /usr/local/app/ansys/v201/ansys/bin/launcher
```

以下の画面が起動します。

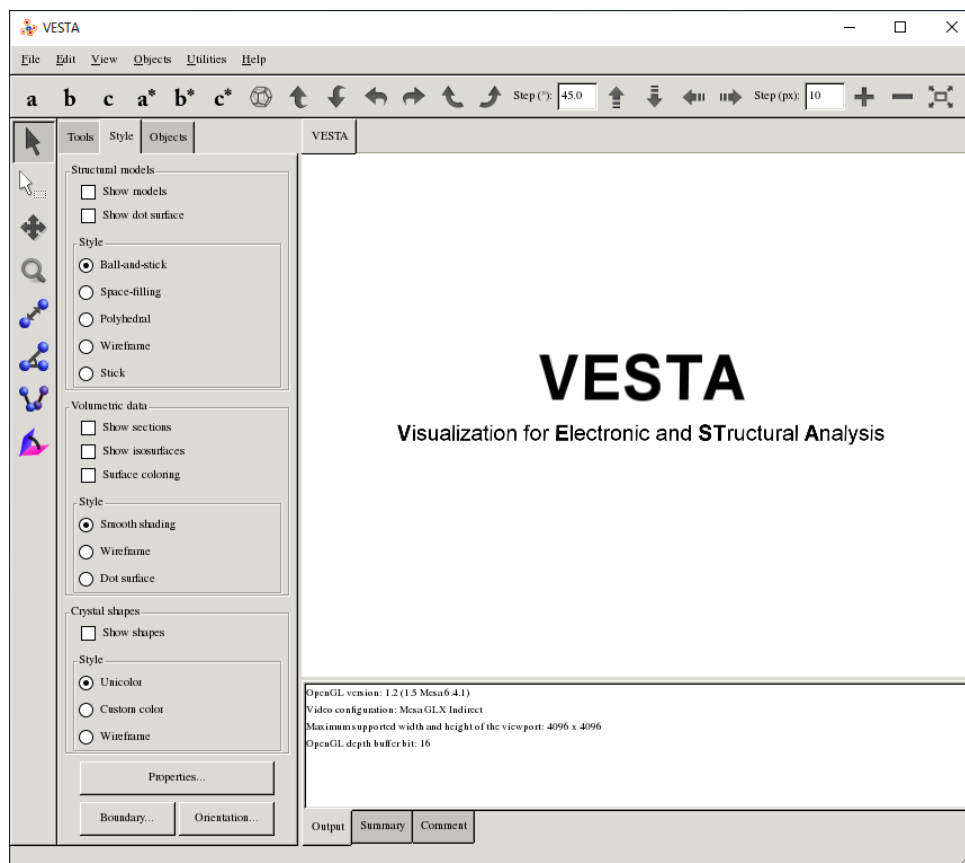


4.1.10 VESTA

以下のコマンドを実行します。

```
$ VESTA-gui
```

以下の画面が起動します。



4.2 プライベートインフォマティクスサーバ(仮想サーバ)

プライベートインフォマティクスサーバ(仮想サーバ)では以下のアプリケーションが利用可能です。

#	アプリケーション名称	バージョン	動作種別
1	Gaussian 16	Rev B.01 Rev C.01	SMP
2	GaussView 6	6.0.16	GUI
3	Mathematica	13.2.1	GUI
4	ANSYS Mechanical CFD	2022R2	GUI
5	MATLAB	R2020a R2021a	GUI
6	Crystal	17	MPI SMP
7	VASP	4.6 5.4 6.2.1	MPI
8	WIEN2k	17.1 19.1	SMP
9	SIESTA	4.0 4.1.5	MPI
10	ABINIT	8.8.2 8.10.3	MPI
11	CPMD	4.1 4.3	MPI
12	QUANTUM ESPRESSO	6.2.1 6.4.1	MPI
13	LAMMPS	31 Mar 2017 5 Jun 2019	MPI

GUI アプリケーションを Windows から使用する場合は、SSH クライアントソフトウェアと X サーバソフトウェアが必要です。Macintosh から使用する場合は、X サーバソフトウェア (XQuartz など) が必要です。

X 転送を有効にして仮想サーバにログインしてください。

(例)

```
$ ssh -X -l username cms-ssh.sc.imr.tohoku.ac.jp  
> ssh -l username XX.XX.XX.XX
```

※ XX.XX.XX.XX 仮想サーバの IP アドレス

4.2.1 Gaussian16

以下のバージョンが利用可能です。

バージョン	環境設定方法
B.01	source /usr/local/app/Gaussian/g16.profile
C.01	source /usr/local/app/Gaussian/C.01/g16.profile

Gaussian 16 の入力ファイル(***.com)を準備します。

ヘキサカルボニルクロニウムの構造最適化を行なう入力ファイルが以下にありますので、ご覧ください。この入力ファイルでは Hartree-Fock 法を用い、3-21G 基底で構造最適化計算を行います。

(例)

```
$ ls -l /usr/local/app/Gaussian/example.com
-rw-r--r-- 1 root root 420 Jul 12 16:33 /usr/local/app/Gaussian/example.com
```

・並列数の指定

並列処理を行うためには、入力ファイルに'CPU=0-N'を指定してください。

(例)%CPU=0-31

'NProc=N'では正常に並列処理が行われません。

以下のコマンドで実行します。

```
source /usr/local/app/Gaussian/g16.profile
g16 入力ファイル
```

(例)

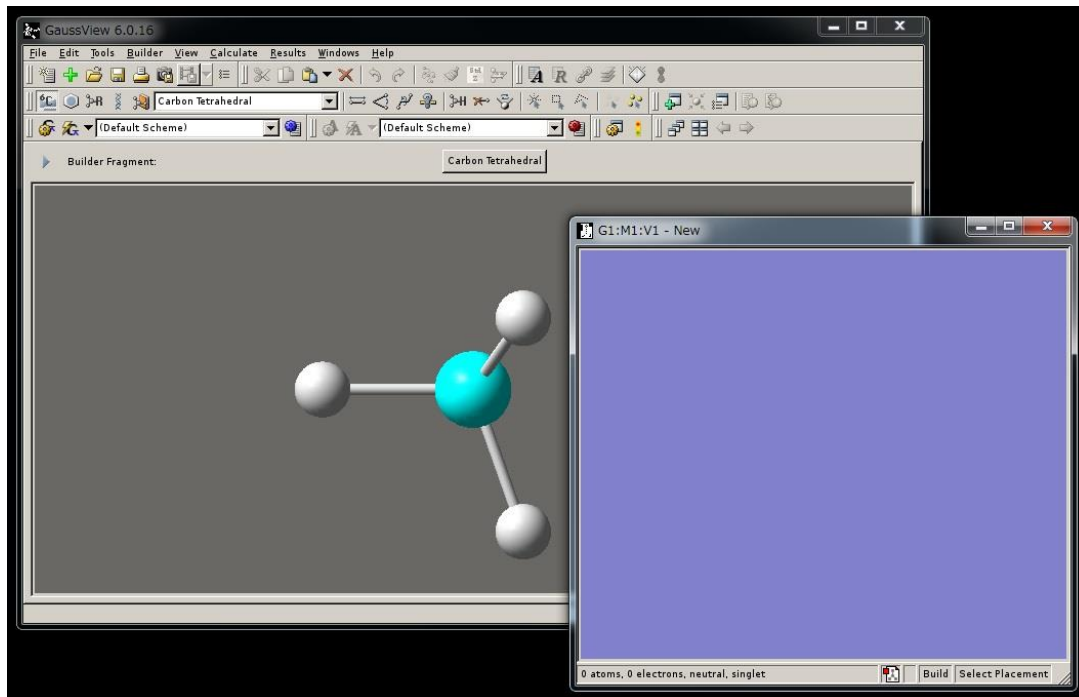
```
g16 test0000.com
```

4.2.2 GaussView

以下のコマンドを実行します。

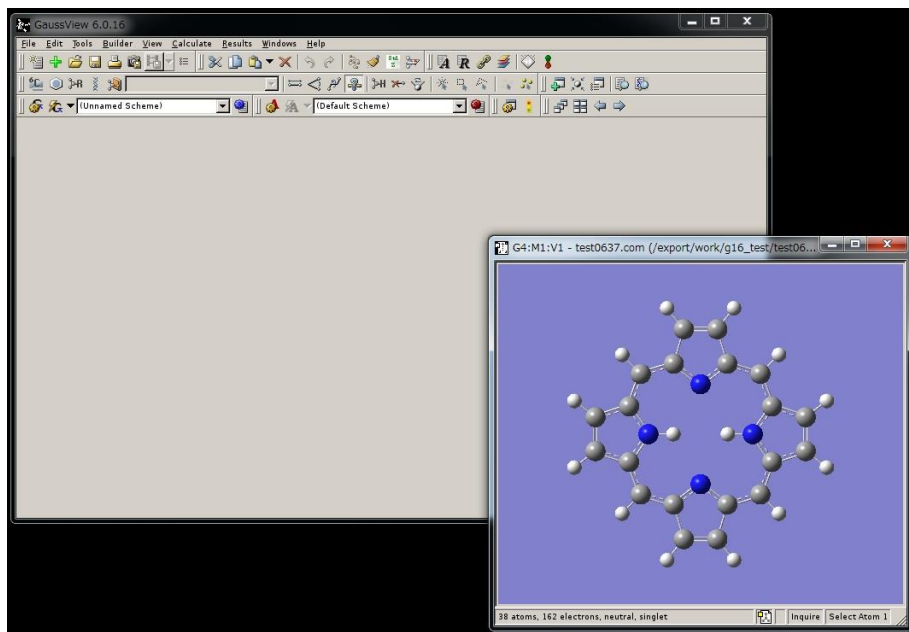
```
$ gview
```

以下の画面が起動します。



(例)

以下のように、Gaussianの入力ファイルを読み込むことが可能です。



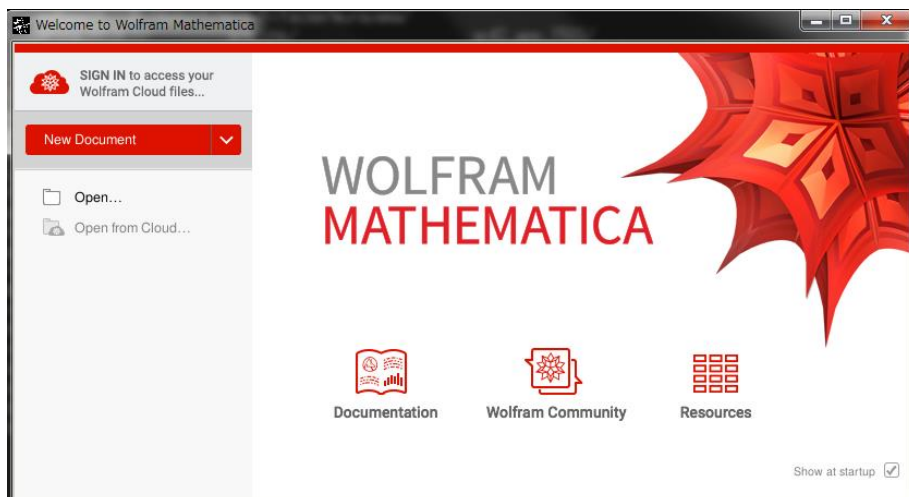
4.2.3 Mathematica

各自の PC にインストールして使用することができます。使用したい方は[こちら](#)までご連絡ください。

以下のコマンドを実行します。

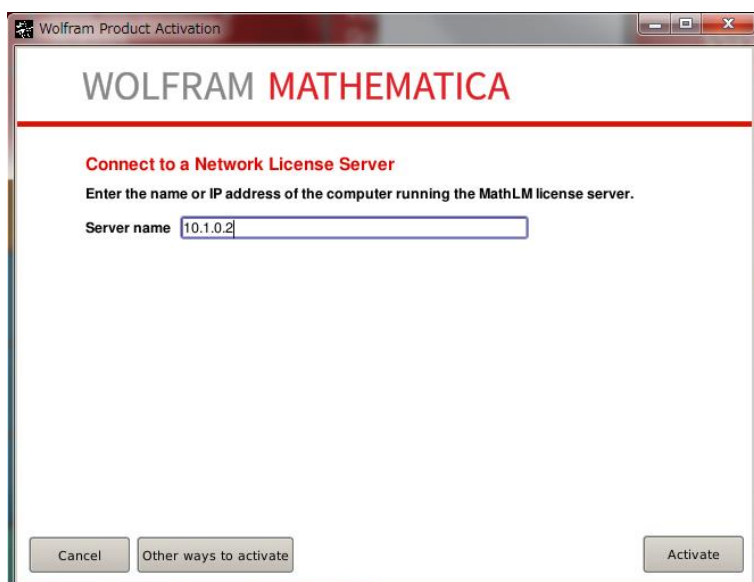
```
$ Mathematica
```

以下の画面が起動します。



注意

最初の起動に限りライセンスのアクチベーション画面が表示されることがあります。



ライセンスサーバの IP アドレス 10.1.0.2 を入力し Activate ボタンを押して認証します。

もし IP アドレスが入力できない場合は other ways to activate ボタンを押し、認証方法として network license を選んでからライセンスサーバの IP アドレスを入力します。

4.2.4 ANSYS Mechanical CFD

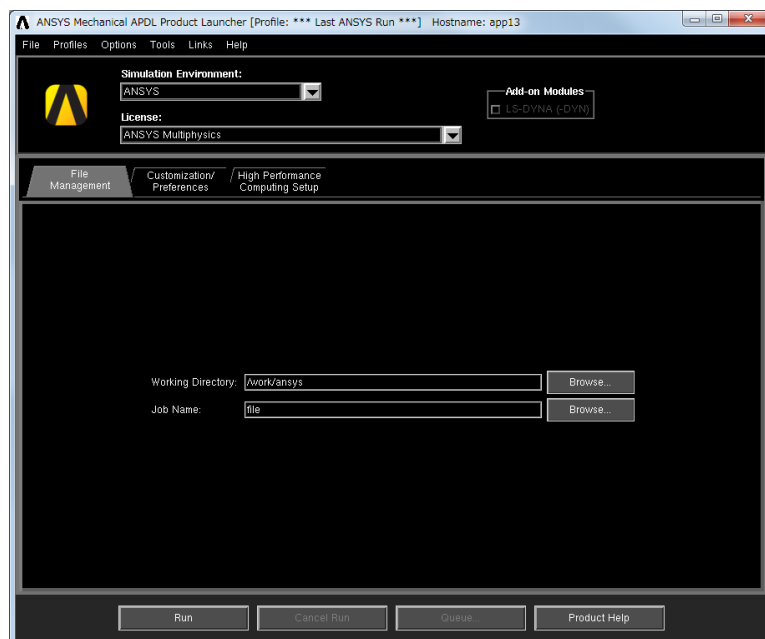
各自の PC にインストールして使用することができます。使用したい方は[こちら](#)までご連絡ください。

以下のコマンドを実行します。

・2022R2

```
$ launcher
```

以下の画面が起動します。



4.2.5 MATLAB

各自の PC にインストールして使用することができます。使用したい方は[こちら](#)までご連絡ください。

以下のコマンドを実行します。

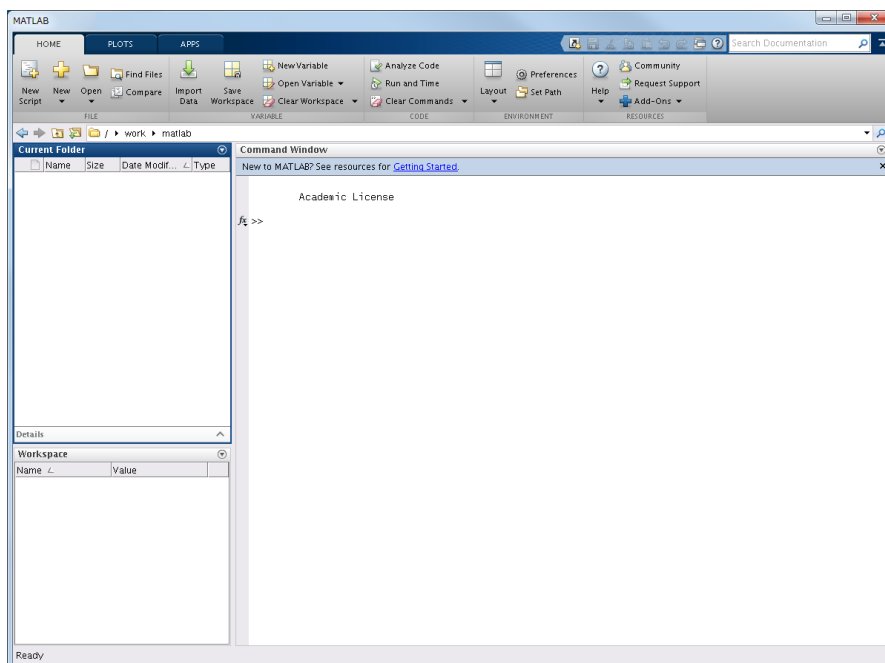
・R2021a

```
$ matlab
```

・R2020a

```
$ /usr/local/app/matlab/R2020a/bin/matlab
```

以下の画面が起動します。



4.2.6 CRYSTAL

以下のコマンドを実行します。

```
source /usr/local/app/Crystal/current/utils17/cry17.bashrc  
runmpi17 並列数 入力ファイル
```

例)

```
source /usr/local/app/Crystal/current/utils17/cry17.bashrc  
runmpi17 2 test11
```

4.2.7 VASP

VASP はライセンスをお持ちでない方は利用できません。利用希望者は[こちら](#)までその旨お問合せ下さい。ライセンスを当センターにて確認させて頂いた後利用可能となります。

以下のバージョンが利用可能です。

実行モジュールの種類	実行モジュールのパス
VASP4.6.36	/usr/local/app/VASP4/current/vasp
VASP4.6.36 Gamma 点版	/usr/local/app/VASP4/vasp.4.6_gamma/vasp
VASP5.4.4 Standard 版	/usr/local/app/VASP5/current/bin/vasp_std
VASP5.4.4 Gamma 点版	/usr/local/app/VASP5/current/bin/vasp_gam
VASP5.4.4 non-collinear 版	/usr/local/app/VASP5/current/bin/vasp_ncl
VASP6.2.1 Standard 版	/usr/local/app/VASP6/current/bin/vasp_std
VASP6.2.1 Gamma 点版	/usr/local/app/VASP6/current/bin/vasp_gam
VASP6.2.1 non-collinear 版	/usr/local/app/VASP6/current/bin/vasp_ncl

以下のコマンドを実行します。

```
mpirun [ -np 並列数 ] [ -ppn ノードあたりの並列数 ] -hostfile ホストファイル  
/usr/local/app/VASP4/current/vasp
```

例)

```
mpirun -np 2 -hostfile hostfile /usr/local/app/VASP4/current/vasp
```

4.2.8 WIEN2k

WIEN2kはライセンスをお持ちでない方は利用できません。利用希望者は[こちら](#)までその旨お問合せ下さい。ライセンスを当センターにて確認させて頂いた後利用可能となります。

以下のバージョンが利用可能です。

バージョン	実行モジュールのパス
17.1	/usr/local/app/WIEN2k/current
19.1	/usr/local/app/WIEN2k/WIEN2k_19.1

以下のコマンドを実行します。

```
export SCRATCH=/work-nfs/$USER/scratch
export WIENROOT=/usr/local/app/WIEN2k/current
export PATH=$WIENROOT:$PATH
```

wien2k 実行スクリプト オプションパラメータ

例)

```
export SCRATCH=/work/$USER/scratch
export WIENROOT=/usr/local/app/WIEN2k/current
export PATH=$WIENROOT:$PATH

run_lapw -cc 0.0001 -NI
```

4.2.9 SIESTA

以下のバージョンが利用可能です。

バージョン	実行モジュールのパス
4.0	/usr/local/app/SIESTA/current/Obj/siesta
4.1.5	/usr/local/app/SIESTA/siesta-4.1.5/Obj/siesta

以下のコマンドを実行します。

```
mpirun [ -np 並列数 ] [ -ppn ノードあたりの並列数 ] -hostfile ホストファイル
/usr/local/app/SIESTA/current/Obj/siesta < 入力ファイル > 出力ファイル
```

例)

```
mpirun -np 2 -hostfile hostfile /usr/local/app/SIESTA/current/Obj/siesta <
input.fdf > siesta.out
```

4.2.10 ABINIT

以下のバージョンが利用可能です。

バージョン	実行モジュールのパス
8.8.2	/usr/local/app/ABINIT/current/src/98_main/abinit
8.10.3	/usr/local/app/ABINIT/abinit-8.10.3/src/98_main/abinit

以下のコマンドを実行します。

```
mpirun [ -np 並列数 ][ -ppn ノードあたりの並列数 ] -hostfile ホストファイル  
/usr/local/app/ABINIT/current/src/98_main/abinit < 入力ファイル
```

例)

```
mpirun -np 2 -hostfile hostfile  
/usr/local/app/ABINIT/current/src/98_main/abinit < input.files
```

4.2.11 CPMD

CPMD の利用を希望される場合は[計算材料学センター](#)までご連絡ください。

以下のバージョンが利用可能です。

バージョン	実行モジュールのパス
4.1	/usr/local/app/CPMD/current
4.3	/usr/local/app/CPMD/CPMD4.3

以下のコマンドを実行します。

```
mpirun [ -np 並列数 ][ -ppn ノードあたりの並列数 ] -hostfile ホストファイル  
/usr/local/app/CPMD/current/bin/cpmd.x 入力ファイル > 出力ファイル
```

例)

```
mpirun -np 2 -hostfile hostfile /usr/local/app/CPMD/current/CPMD/bin/cpmd.x  
inp-1 > cpmd.out
```

4.2.12 QUANTUM ESPRESSO

以下のバージョンが利用可能です。

バージョン	実行モジュールのパス
6.2.1	/usr/local/app/QuantumESPRESSO/current
6.4.1	/usr/local/app/QuantumESPRESSO/qe-6.4.1

以下のコマンドを実行します。

```
mpirun [ -np 並列数 ][ -ppn ノードあたりの並列数 ] -hostfile ホストファイル  
/usr/local/app/QuantumESPRESSO/current/bin/pw.x < 入力ファイル > 出力ファイル
```

例)

```
mpirun -np 2 -hostfile hostfile  
/usr/local/app/QuantumESPRESSO/current/bin/pw.x < cluster4.in > qe.out
```

4.2.13 LAMMPS

以下のバージョンが利用可能です。

バージョン	実行モジュールのパス
31 Mar 17	/usr/local/app/ LAMMPS/current
5 Jun 19	/usr/local/app/ LAMMPS/lammps-5Jun19

以下のコマンドを実行します。

```
mpirun [ -np 並列数 ][ -ppn ノードあたりの並列数 ] -hostfile ホストファイル  
/usr/local/app/LAMMPS/current/src/lmp_intel_cpu_intelmpi < 入力ファイル > 出力  
ファイル
```

例)

```
mpirun -np 2 -hostfile hostfile  
/usr/local/app/LAMMPS/current/src/lmp_intel_cpu_intelmpi < in.ij > lammps.out
```