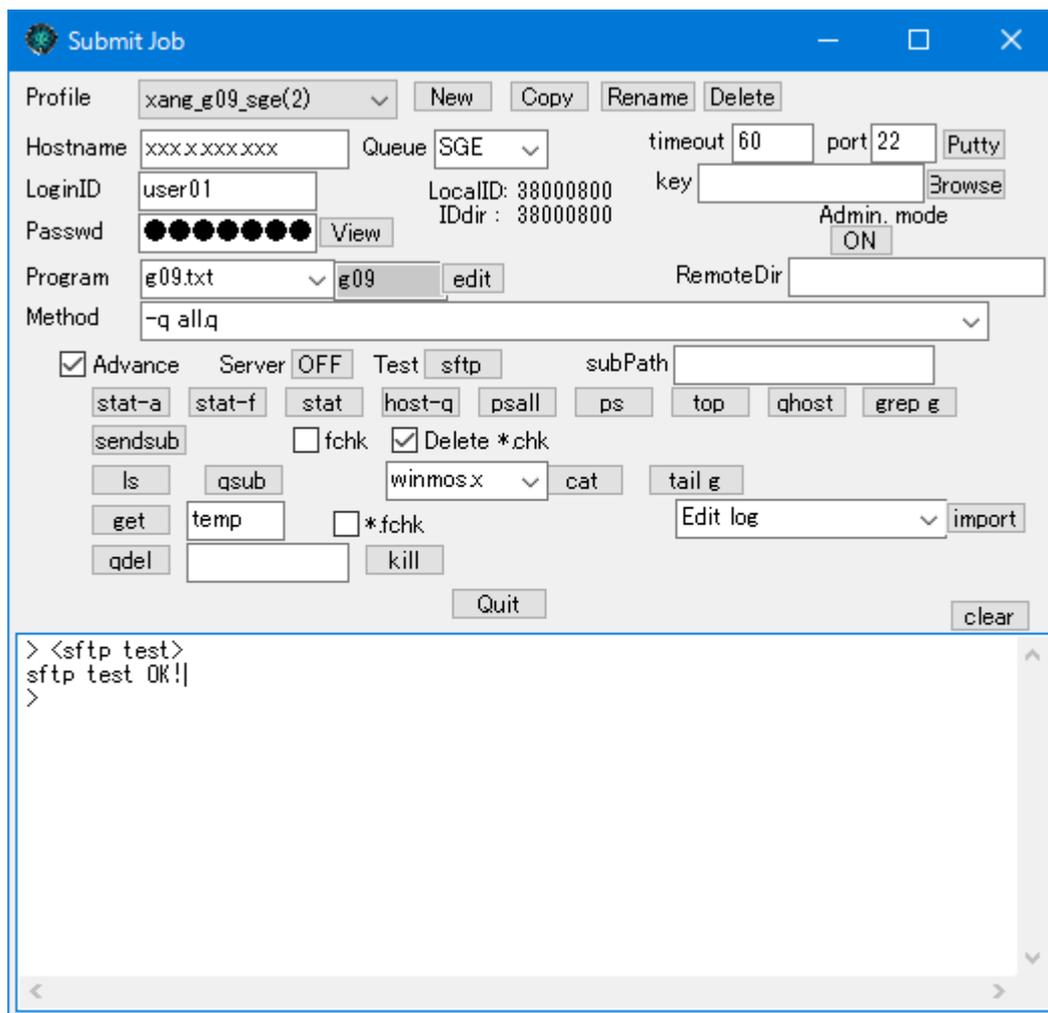


Winmostar Submit Job 機能マニュアル (SGE-Gaussian 編)

1. 計算 1 または 2 → UNIX Server で Submit Job の画面が立ち上がる。
2. Submit Job の初期画面で、Server の [SET] を押すと Server の設定ができるようになる。
(Admin mode の [ON] を押し Password で “0204” を入力すると、Server の設定以外に管理者用の設定も可能になる。)
3. Server [SET] で Queue (LSF, PBS, SGE, T2SUB, SLURM 等) でスケジューラの設定ができる。
SGE を設定すると、次の図のようになる。Advance にチェックするとボタンが増えるが、Advance のチェックがなくても通常の操作はできる。



4. Hostname (IP アドレス) や LoginID、Passwd の設定を行う。
プライベートキーを使う場合は、key にフルパスでプライベートキーを設定する。Program で g09 や g03 の選択、Method で SGE のオプションを指定する。

5. Test の横の[sftp]ボタンでテストする。

最初の接続時は、以下のメッセージがでるので、y[Enter]を入力する、

If you want to carry on connecting just once, without adding the key to the cache, enter "n".

If you do not trust this host, press Return to abandon the connection.

Store key in cache? (y/n)

このテストが OK になれば、6. ~ 10. を行う。この時は、Server を OFF にしても良い。通常は Server を OFF にしておく方が、誤って設定を変えてしまう恐れがない。

6. [stat-a]でジョブの状況を確認する。[host-q]や[qhost]でマシンの状況を確認する。

7. [sendsub]で linux 機にデータが転送されて、ジョブが起動される。

filename.gif の計算は RemoteDir で設定したディレクトリで実行されるが、RemoteDir が空白の場合は、Linux 機の LoginID のホームディレクトリ/IDdir/g03/ filename /のディレクトリで実行される。Windows の ID は、画面上の LocalID で表示されている。LocalID に全角文字や半角空白が含まれている場合は、下の IDdir で表示される 16 進数を含む文字列で代用される。例えば、"12 千田 AB"は" 1290E79363AB"になる。LocalID に全角文字や半角空白が含まれない場合は IDdir と一致する。

RemoteDir を'/hoge/g09test'のように（シングルクォーテーション）でくくると指定したディレクトリ以下に IDdir を作成して実行される。

RemoteDir を"/hoge/g09test"（シングルクォーテーションを 2 個づつ）でくくると、指定したディレクトリで IDdir を作成することなく実行される。

8. [ls]で、その他の出力ファイルの存在も確認できる。winmos.x はジョブの起動を示し、winmos.o と winmos.e はジョブの終了を示している。[stat-a]等で実行状況を確認する。

9. ジョブ投入後は Winmostar を終了してもよい。再度立ち上げた場合は、filename.gif を呼び出して[ls]することで計算結果の出力ファイル(filename.log)を確認することができる。[stat-a]で実行状況を確認することもできる。

10. 出力ファイルが確認できたら、[get]する。途中結果を[get]することもできる。

[import]の左のボックスに[get]後の動作（ファイルを開く等）を指定することができる。PC 上に一度[get]したファイルは、[get]しなくても[import]で別の動作をすることができる。

計算 → Import → Animation 等で、様々な図示ができる。MO 表示は、計算 → Import → MO,UV,Charge...で行なう。

11. ジョブのキャンセルは、[qdel]の横の窓に[stat-a]で確認したジョブ番号を入れて[qdel]を押す。

（注）同一ディレクトリでのジョブの二重投入は異常終了する。Windows のユーザーID 等が異なれば、同一ディレクトリにはならないので問題はない。