

FOCUS スパコン向け Winmostar インストールマニュアル

2025 年 1 月 7 日

本書は、Winmostar を使用して公益財団法人計算科学振興財団（通称 FOCUS）のスパコン上で計算を実行したい方および、FOCUS 主催の LAMMPS 講習会、Quantum ESPRESSO 利用講習会（年度により名称が異なる場合があります）にオンラインで参加される方向けの、Winmostar および LAMMPS、Quantum ESPRESSO 等のソルバのインストール手順を示すものです。

【注意】 PC および LAN のセキュリティ設定の変更が必要な場合はインストール作業全体に数日掛かる場合があるため、FOCUS 主催講習会の準備をされる方は余裕をもって本書の手順を実行してください。

本書の手順で想定通りに行かない場合は、FOCUS への接続については FOCUS ご担当者に直接連絡、Winmostar およびソルバのインストールについては [よくある質問](#) を確認してください。

1. PC の準備

Winmostar のネイティブ動作は Windows OS のみサポートしているため、Windows PC を準備してください。推奨スペック、対応 OS 等は [Winmostar の動作環境](#) で確認してください。

2. FOCUS への接続環境の準備

FOCUS スパコンへの接続の方法には、VPN 方式と公開鍵認識接続方式があります。本書では基本的に VPN 方式の手順を示しますが、公開鍵認識接続方式の場合も「6. 多段 SSH 接続の手順」を参考に接続可能です。

VPN 方式の際には VPN クライアント（Cisco AnyConnect Secure Mobility Client など）が必要です。FOCUS より案内された手順に従って VPN クライアント、Tera Term、WinSCP をインストールしてください。

FOCUS 主催講習会に参加される方は、FOCUS から受講者用アカウントが発行された後（概ね開催 1 週間前）にこの準備を行うことができます。

参考までに、過去の講習会の準備手順は [こちら](#) でご確認できます。

3. Winmostar およびソルバのインストール

[インストール方法](#) に記載の手順で Winmostar およびソルバをインストールしてください。

- 本書執筆時点では、Winmostar V11.10.2 以前のバージョンを使う場合にテンプレートスクリプトを修正する必要がありますが、本書にその方法は記載していません。Winmostar V11.10.3 以降のバージョンをつかう場合はテンプレートスクリプトの修正が不要です（本書執筆時点）。シェル操作に慣れていなくテンプレートスクリプトの自力での修正ができない方は、Winmostar V11.10.3 以降のバージョンをインストールしてください。
- [インストール方法](#) の【手順 10】は不要です。FOCUS 主催講習会を受講する場合または FOCUS にインストール済みのソルバを使う場合は【手順 11】も不要です。

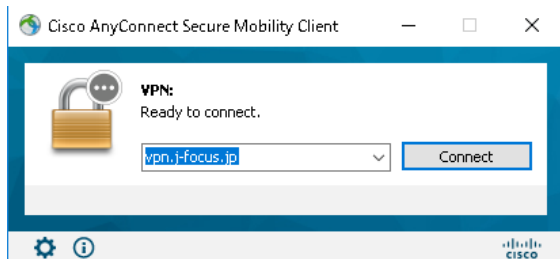
- **FOCUS 主催講習会を受講される方**で、V11 以降の Winmostar プロフェッショナル版をお持ちでない方は、1 か月間使用可能な無料トライアルをご利用頂けます。すでに他の目的で無料トライアルを登録し期限切れとなった方は[お問い合わせフォーム](#)からその旨をお知らせください。
- **FOCUS 主催の LAMMPS 講習会を受講される方**は、Winmostar 本体だけでなく、【手順 6】の CygwinWM も必ずインストールしてください。【手順 7】の LAMMPS のインストールは、Winmostar V11.5.X 以降かつ CygwinWM 2022/07/15 バージョン以降の環境では不要です。【手順 10、11】は不要です。
- **FOCUS 主催の Quantum ESPRESSO 講習会を受講される方**は、Winmostar 本体だけでなく、【手順 6】の CygwinWM も必ずインストールしてください。【手順 7】の Quantum ESPRESSO のインストールは、Winmostar V11.5.X 以降かつ CygwinWM 2022/07/15 バージョン以降の環境では不要です。【手順 10、11】は不要です。
- **FOCUS スパコンシステムの更新に合わせるため**、過去にインストールした Winmostar および CygwinWM をご利用中の方は、[Winmostar の安定版最新バージョン](#)と [CygwinWM の最新バージョン](#)にアップデートしてください。アップデート方法は[こちら](#)です。Winmostar の FOCUS スパコンへの対応状況は[更新履歴](#)から確認できます。

LAMMPS 講習会を受講される方は「4. 動作確認 (LAMMPS の場合)」を実施してください。Quantum ESPRESSO 講習会のみ受講される方は、「5. 動作確認 (Quantum ESPRESSO の場合)」までスキップしてください。

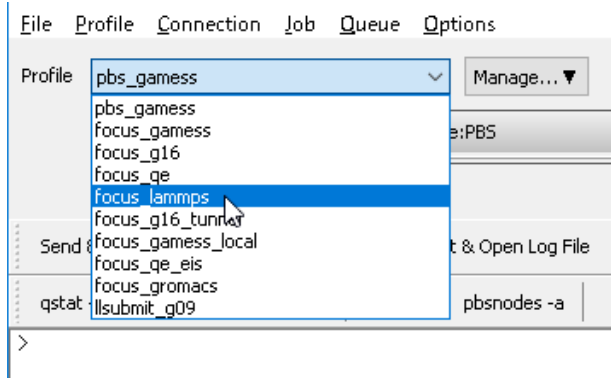
4. 動作確認 (LAMMPS の場合)

ここでは VPN 接続の場合の方法のみ示します。SSH 多段接続の場合は 6 を参照してください。

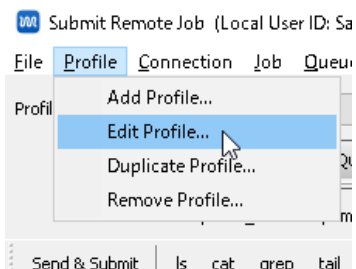
- ① FOCUS から案内のあった方法に従い、Cisco AnyConnect Secure Mobility Client で FOCUS に接続してください。下図は本書作成時点での参考画面です。



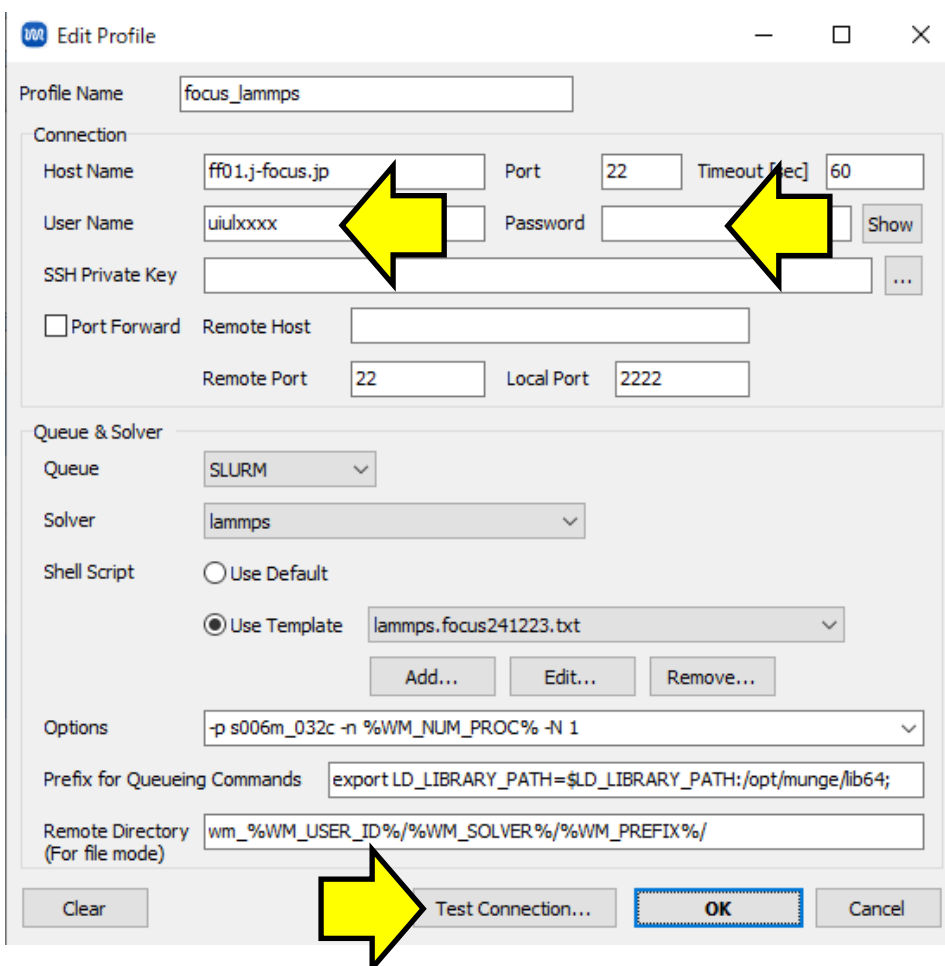
- ② Winmostar を起動し、ツールバーの  リモートジョブ投入をクリックしてください。
- ③ **Submit Remote Job** ウィンドウの **Profile** で「focus_lammps」を選択してください。



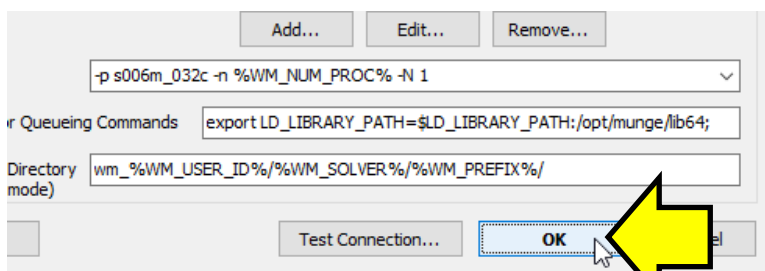
- ④ **Submit Remote Job** ウィンドウで **Profile | Edit Profile** をクリックしてください。



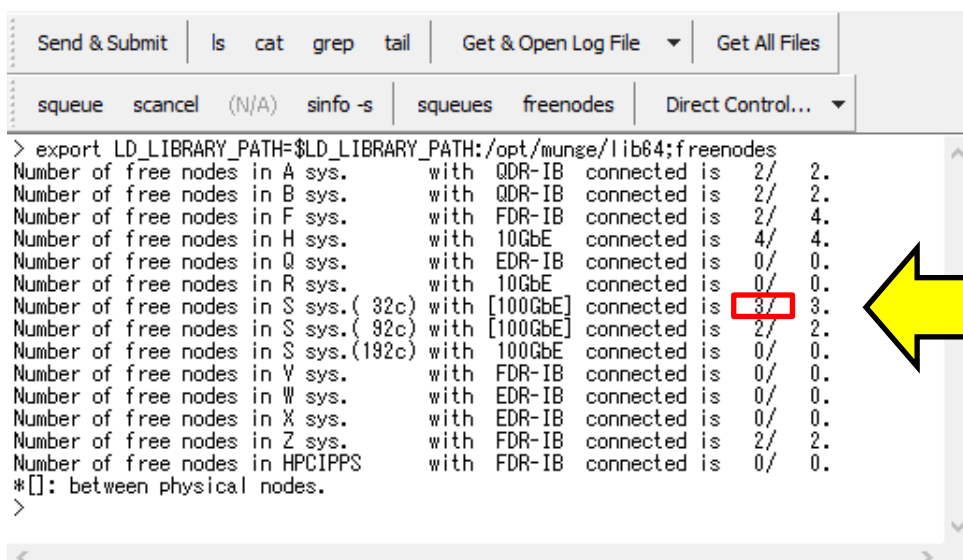
- ⑤ **Edit Profile** ウィンドウで **User Name** と **Password** に FOCUS から配布されたアカウントを入力してください (必ず半角英数字で)。その後、ウィンドウ下部の **Test Connection** ボタンをクリックします。「接続テストとリモートサーバ上でのジョブスケジューラの動作テストを実行しますか?」と表示されたら **接続テストのみ** をクリックします。「テストが正常に終了しました。」と表示されたら正常に接続設定ができたこととなります。そうでない場合は **User Name** と **Password** を注意深く再入力してください。



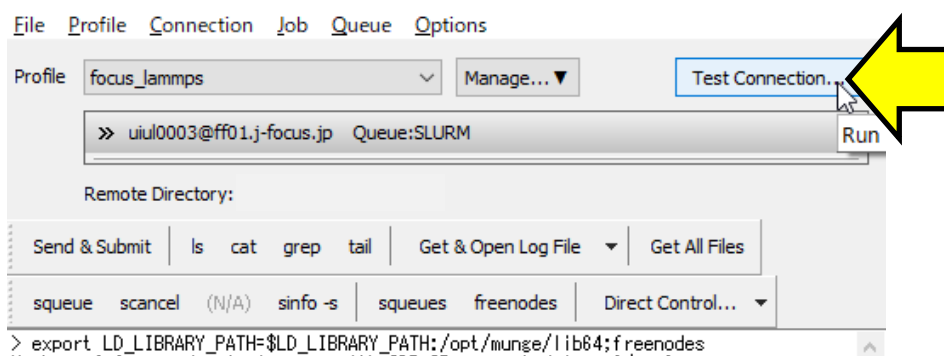
- ⑥ **Edit Profile** ウィンドウで **OK** をクリックしてください。



- ⑦ **Submit Remote Job** ウィンドウで中断の **freenodes** ボタンをクリックし、ノードの空き状況を確認します。ここではプロファイルにデフォルトで設定されている S システム (32c) (キュー名 : s006m_032c) を使うことにします。下図に結果の一例を示しますがタイミングによって表示内容は変化します。「Number of free nodes in S sys. (32c)」の行の右端で分子 (下図の場合は赤枠内の「3」) が 0 でない状態になるまで何度か **freenodes** をクリックします。0 の場合は他のユーザが S システム (32c) を利用中ということになります。



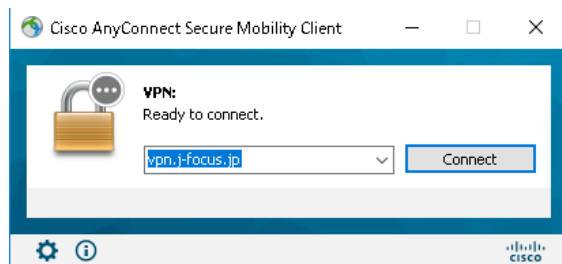
- ⑧ **Test Connection** をクリックします。「接続テストとリモートサーバ上でのジョブスケジューラの動作テストを実行しますか？」と表示されたら**両方実行**をクリックします。「ジョブスケジューラの動作テストの待ち時間を入力」と表示されたら **OK** をクリックします。「リモートサーバ上での **LAMMPS** のテストも実行しますか? ...」と表示されたら**はい**をクリックします。しばらく処理が流れたのち、「テストが正常に終了しました」と表示されることを確認します。されない場合は Winmostar および CygwinWM を再インストールしてください。



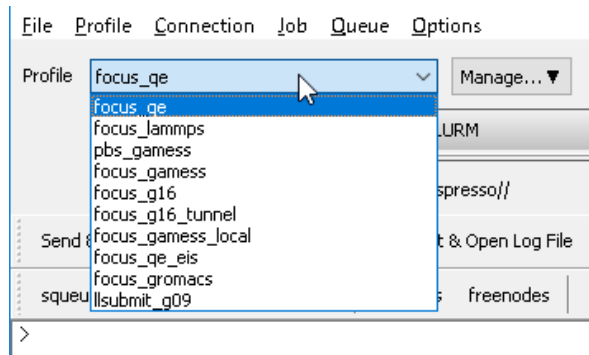
5. 動作確認 (Quantum ESPRESSO の場合)

ここでは VPN 接続の場合の方法のみ示します。SSH 多段接続の場合は 6 を参照してください。

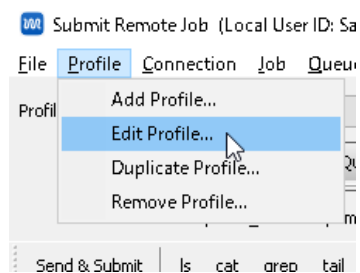
- ① FOCUS から案内のあった方法に従い、Cisco AnyConnect Secure Mobility Client で FOCUS に接続してください。下図は本書作成時点での参考画面です。



- ② Winmostar を起動し、ツールバーの  リモートジョブ投入をクリックしてください。
- ③ **Submit Remote Job** ウィンドウの **Profile** で「focus_qe」を選択してください。



- ④ **Submit Remote Job** ウィンドウで **Profile | Edit Profile** をクリックしてください。



- ⑤ **Edit Profile** ウィンドウで **User Name** と **Password** に FOCUS から配布されたアカウントを入力してください（必ず半角英数字で）。その後、ウィンドウ下部の **Test Connection** ボタンをクリックします。「接続テストとリモートサーバ上でのジョブスケジューラの動作テストを実行しますか？」と表示されたら **接続テストのみ** をクリックします。「テストが正常に終了しました。」と表示されたら正常に接続設定ができたことになります。そうでない場合は **User Name** と **Password** を注意深く再入力してください。

The screenshot shows the 'Edit Profile' window with the following details:

- Profile Name:** focus_qe
- Connection:**
 - Host Name: ff01.j-focus.jp
 - Port: 22
 - Timeout [sec]: 60
 - User Name: uxxx0000
 - Password: ●●
 - SSH Private Key: [Empty]
 - Port Forward: Remote Host: [Empty]
 - Remote Port: 22
 - Local Port: 2222
- Queue & Solver:**
 - Queue: SLURM
 - Solver: quantumespresso
 - Shell Script: Use Template: quantumespresso.focus220418.txt
 - Options: -p g006m -n %WM_NUM_PROC% -N 1
 - Prefix for Queueing Commands: export LD_LIBRARY_PATH=\$LD_LIBRARY_PATH:/opt/munge/lib64;
 - Remote Directory (For file mode): wm_%WM_USER_ID%/ %WM_SOLVER%/ %WM_PREFIX%/
- Buttons:** Clear, Test Connection..., OK, Cancel

- ⑥ **Edit Profile** ウィンドウで **OK** をクリックしてください。

This is a close-up view of the bottom section of the 'Edit Profile' window, showing the 'Options' field with the value '-p s006m_032c -n %WM_NUM_PROC% -N 1', the 'Prefix for Queueing Commands' field with 'export LD_LIBRARY_PATH=\$LD_LIBRARY_PATH:/opt/munge/lib64;', and the 'Directory (For file mode)' field with 'wm_%WM_USER_ID%/ %WM_SOLVER%/ %WM_PREFIX%/'. The 'OK' button is highlighted with a yellow arrow pointing to it.

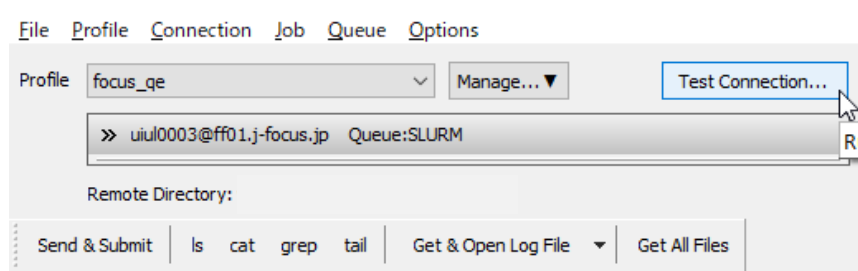
- ⑦ **Submit Remote Job** ウィンドウで中断の **freenodes** ボタンをクリックし、ノードの空き状況を確認します。ここではプロファイルにデフォルトで設定されている S システム (32c) (キュー名: s006m_032c) を使うことにします。下図に結果の一例を示しますがタイミングによって表示内容は変化します。「Number of free nodes in S sys. (32c)」の行の右端で分子 (下図の場合は赤枠内の「3」) が 0 でない状態になるまで何度か **freenodes** をクリックします。0 の場合は他のユーザが S システム (32c) を利用中ということになります。

```

> export LD_LIBRARY_PATH=$LD_LIBRARY_PATH:/opt/munge/lib64;freenodes
Number of free nodes in A sys.      with QDR-IB  connected is 2/ 2.
Number of free nodes in B sys.      with QDR-IB  connected is 2/ 2.
Number of free nodes in F sys.      with FDR-IB  connected is 2/ 4.
Number of free nodes in H sys.      with 10GbE   connected is 4/ 4.
Number of free nodes in Q sys.      with EDR-IB  connected is 0/ 0.
Number of free nodes in R sys.      with 10GbE   connected is 0/ 0.
Number of free nodes in S sys.( 32c) with [100GbE]  connected is 3/ 3.
Number of free nodes in S sys.( 32c) with [100GbE]  connected is 2/ 2.
Number of free nodes in S sys.(192c) with 100GbE   connected is 0/ 0.
Number of free nodes in V sys.      with FDR-IB  connected is 0/ 0.
Number of free nodes in W sys.      with EDR-IB  connected is 0/ 0.
Number of free nodes in X sys.      with EDR-IB  connected is 0/ 0.
Number of free nodes in Z sys.      with FDR-IB  connected is 2/ 2.
Number of free nodes in HPCIPPS     with FDR-IB  connected is 0/ 0.
*[]: between physical nodes.
>

```

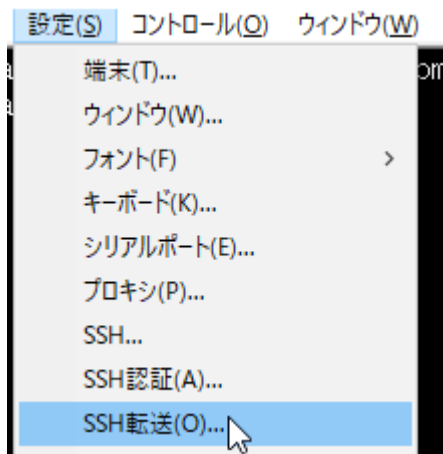
- ⑧ **Test Connection** をクリックします。「接続テストとリモートサーバ上でのジョブスケジューラの動作テストを実行しますか?」と表示されたら**両方実行**をクリックします。「ジョブスケジューラの動作テストの待ち時間を入力」と表示されたら **OK** をクリックします。「リモートサーバ上での Quantum ESPRESSO のテストも実行しますか?...」と表示されたら**はい**をクリックします。しばらく処理が流れたのち、「テストが正常に終了しました」と表示されることを確認します。されない場合は Winmostar および CygwinWM を再インストールしてください。



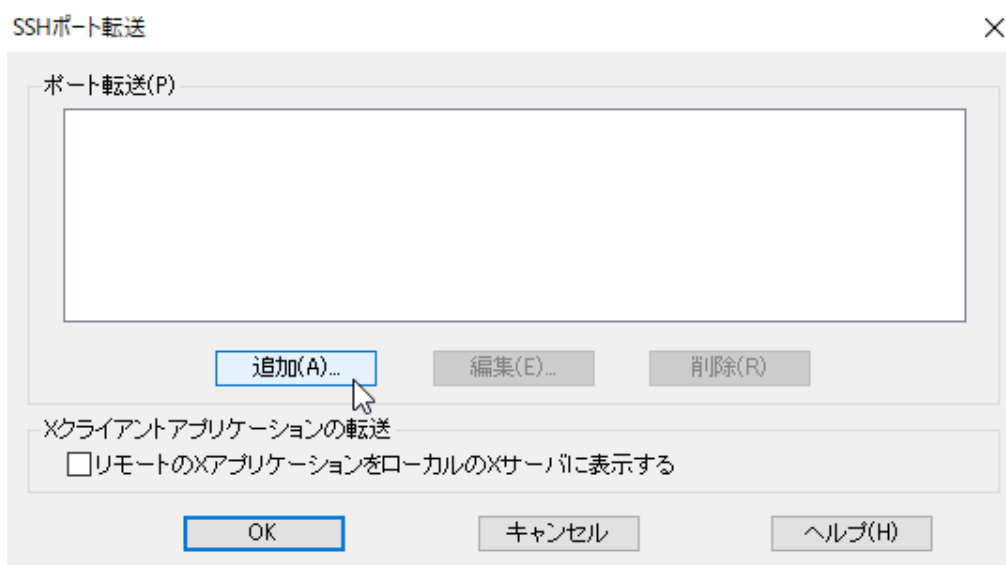
6. 多段 SSH 接続の手順

VPN 接続ができない場合、多段 SSH 接続を行います。

1. FOCUS スパコン HP の [「システムへのログイン」](#) → [「インターネットからの SSH 接続によるログイン」](#) の手順を参考に、TeraTerm を用いてログインサーバ (ssh.j-focus.jp) にログインします。
2. ログインサーバにログインした状態で TeraTerm の **設定 | SSH 転送** をクリックします。



3. **追加** をクリックします。



4. 以下のように入力し、**OK** をクリックします。**ローカルのポート**は、10335 が他の接続で使われている場合は適宜別のポートにしてください。

SSHポート転送

ポート転送を行う向きを選択:

ローカルのポート(L) 10335 リッスン(D)

リモート側ホスト(M) ff01.j-focus.jp ポート(P) 22

リモートサーバのポート(R) リッスン(S)

ローカル側ホスト(A) ポート(O)

ダイナミックポート(D) リッスン(T)

OK キャンセル

5. **OK** をクリックします。

SSHポート転送

ポート転送(P)

ローカルの "localhost" のポート 10335 からリモート側ホスト "ff01.j-focus.jp" のポート 22

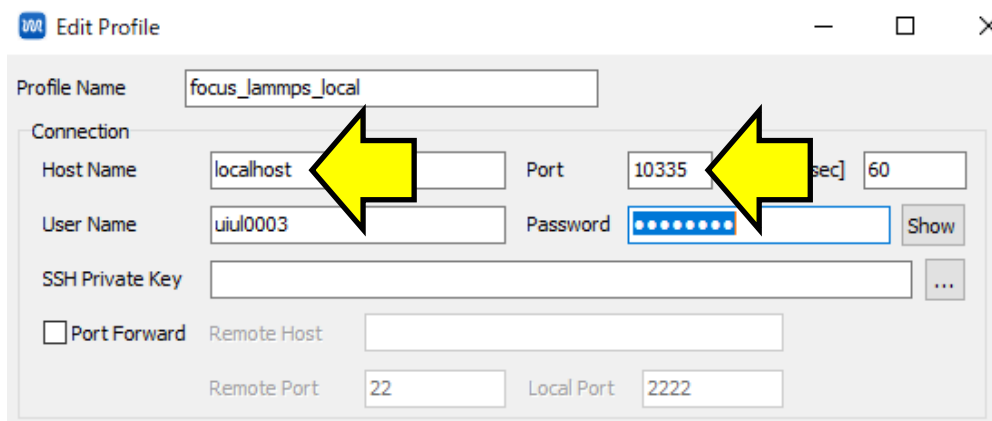
追加(A)... 編集(E)... 削除(B)

Xクライアントアプリケーションの転送

リモートのXアプリケーションをローカルのXサーバに表示する

OK キャンセル ヘルプ(H)

6. 上記の状態です「4. 動作確認 (LAMMPS の場合)」または「5. 動作確認 (Quantum ESPRESSO の場合)」の手順を実施します。ただし、Cisco AnyConnect Secure Mobility Client の起動と接続は不要です。操作中は TeraTerm でログインサーバに接続している状態を維持してください。そして、Winmostar のツール | リモートジョブ投入 | Profile | Edit Profile のウィンドウで操作する際に、**Host Name** を「localhost」、**Port** を「10335」(4.でローカルのポートを変更したときはその番号) に変更します。



以上