



# HPCシステムズ サイエンスクラウド向け設定

V11.3.1

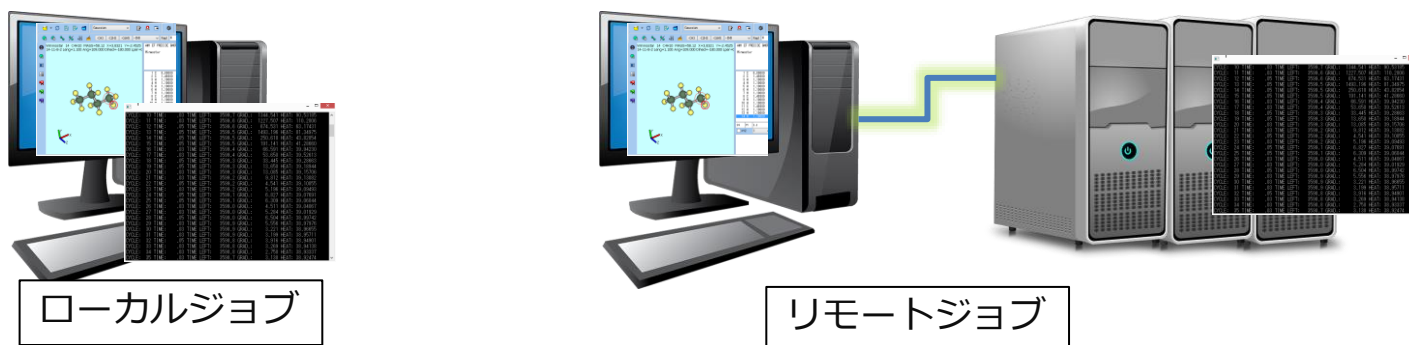
2022年12月27日 株式会社クロスアビリティ

# 本書について

- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方は[ビギナーズマニュアル](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
  - [Winmostar導入講習会](#)：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
  - [Winmostar基礎講習会](#)：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
  - [個別講習会](#)：ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾なく、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。

# 概要

- 本書では**プロジェクトモード**でHPCシステムズのサイエンスクラウドを利用してリモートジョブを実行する方法を示します。分子・原子構造の作成方法、計算条件の設定方法、結果の解析方法についてはローカルジョブと変わらないため他のチュートリアルを参照してください。



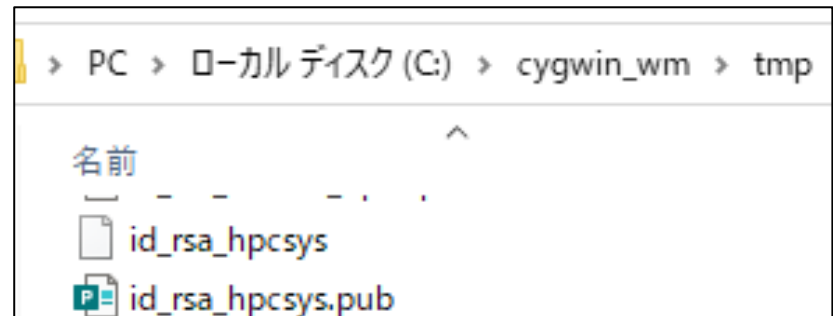
# I. 公開鍵・秘密鍵の生成と登録

すでに何らかの方法で公開鍵・秘密鍵ファイルを生成済みの場合はP. 5に進んでください。  
このページではCygwinを使って鍵を生成する方法を示しますが他の方法でも構いません。

1. Winmostarを起動し**ツール | CygwinWM**をクリックします。
2. 開いた黒いウィンドウ上で「ssh-keygen -m pem -f /tmp/id\_rsa\_hpcsys」と入力しEnterキーを押します。（WinmostarのSSH機能はPEM形式のみ対応）
3. 「Enter passphrase (empty for no passphrase):」と表示されたら5文字以上の任意のパスワード（メモを取る）を入力してEnterキーを押します。
4. 「Enter same passphrase again:」と表示されたら4で入力したパスワードを入力してEnterキーを押し、「Your identification has been saved in /tmp/id\_rsa\_hpcsys」と表示されることを確認します。
5. CygwinWMのインストールフォルダ（デフォルトではC:\cygwin\_wm）の下のtmpフォルダの下にあるid\_rsa\_hpcsys（秘密鍵）とid\_rsa\_hpcsys.pub（公開鍵）の2つのファイルをどこか安全な場所にコピーします。



```
Sakamaki@DESKTOP-A394EFD
$ ssh-keygen -m pem -f /tmp/id_rsa_hpcsys
Generating public/private rsa key pair.
Enter passphrase (empty for no passphrase):
Enter same passphrase again:
Your identification has been saved in /tmp/id_rsa_hpcsys
Your public key has been saved in /tmp/id_rsa_hpcsys.pub
```

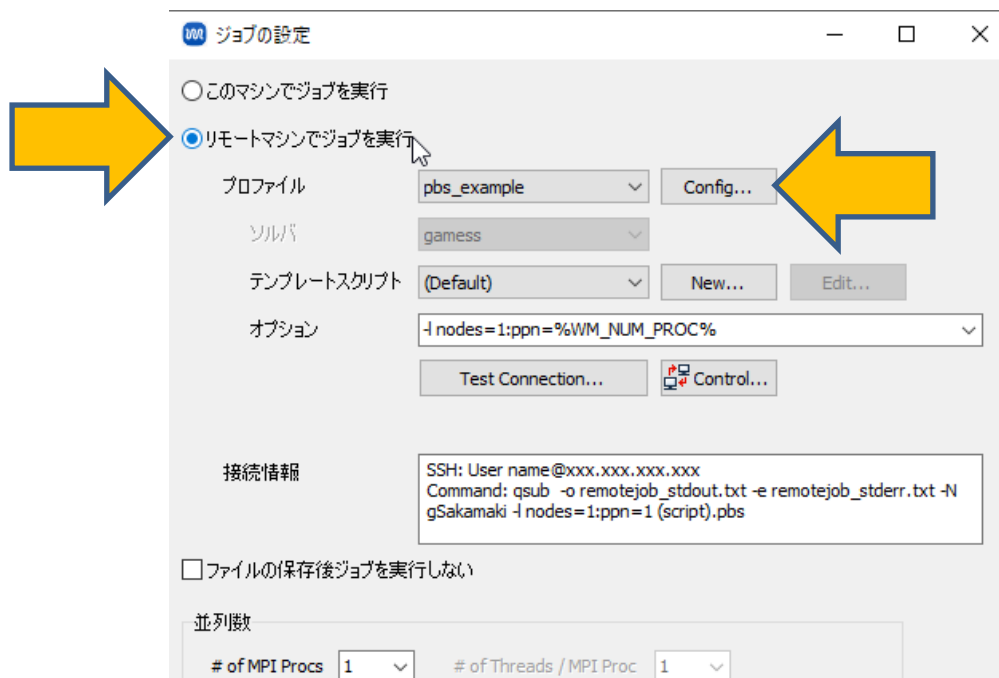


# I. 公開鍵・秘密鍵の生成と登録

- 公開鍵をHPCシステムズに登録済みの場合はP. 6に進んでください。
- これから登録する場合は、公開鍵（P. 4の方法で生成した場合はid\_rsa\_hpcsys.pub）をHPCシステムズに送り、登録されるまで待ちます。

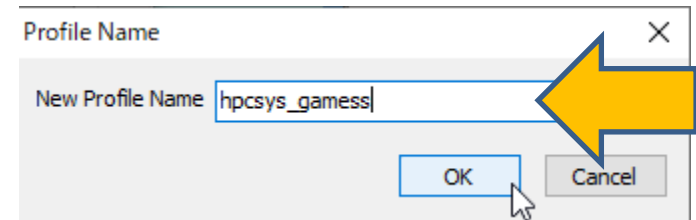
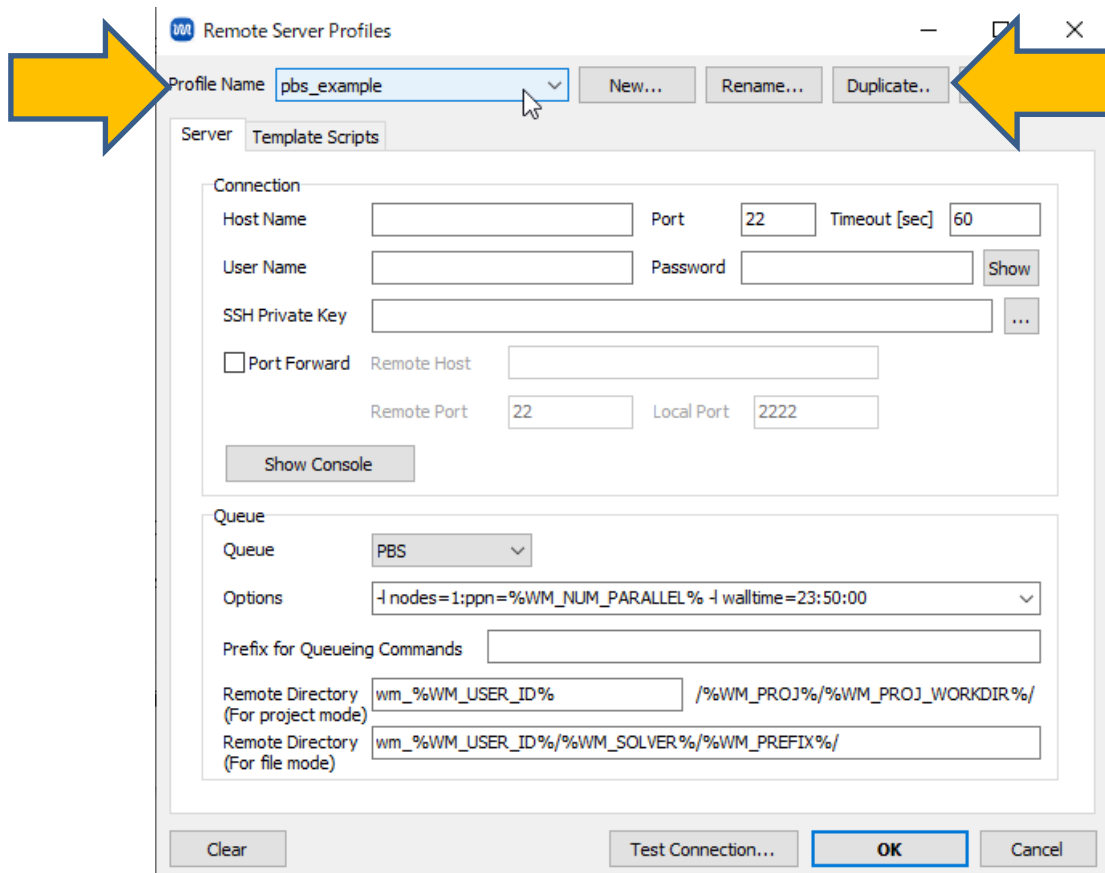
## II. プロファイルの選択

1. [各ソルバのチュートリアル](#)の基礎編に倣い、計算したい分子・原子構造を作成し、使用したいソルバの  **ワークフロー設定**をクリックし**Workflow Setup**ウィンドウで計算条件を設定した後、**OK**をクリックし**ジョブの設定**ウィンドウに進みます。
2. **リモートマシンでジョブを実行**にチェックを入れます。
3. そうでない場合は**プロファイル**の**Config**をクリックします。



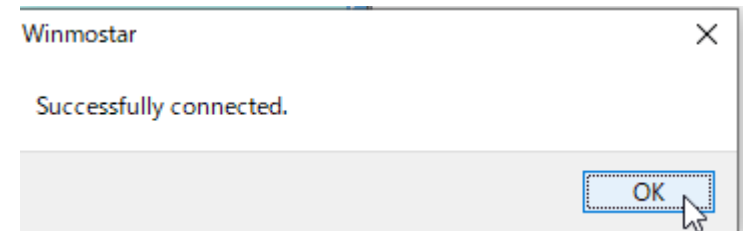
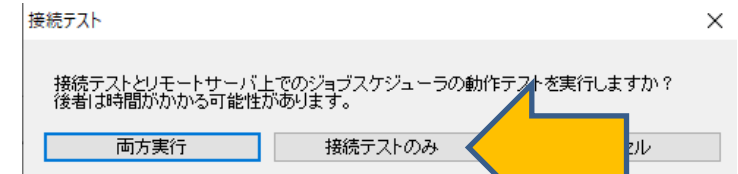
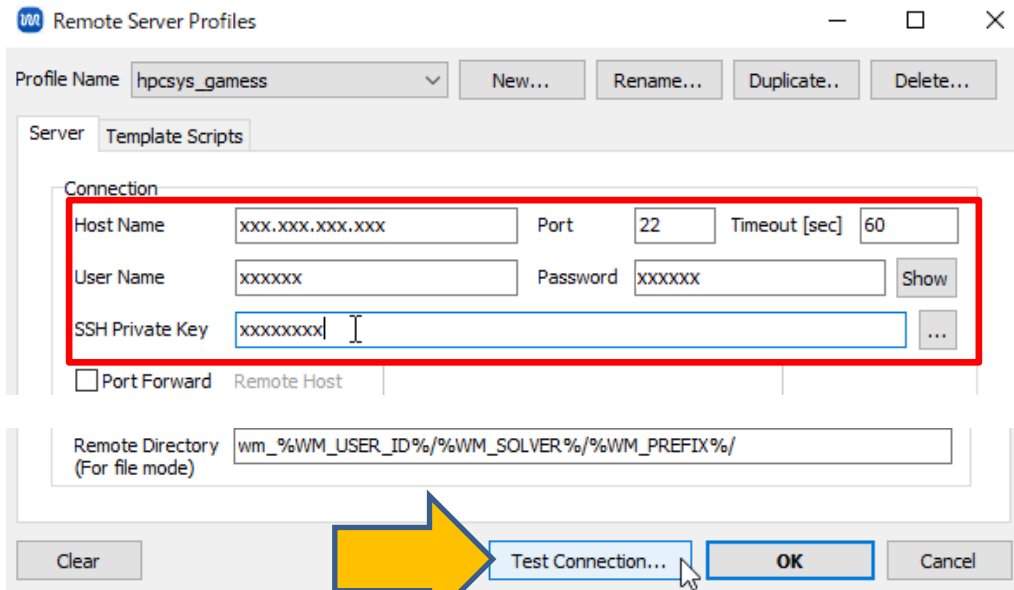
# III. プロファイルの新規作成

1. **Profile Name**で「pbs\_example」を選択してください。
2. **Duplicate**をクリックし**New Profile Name**に「hpcsys\_(ソルバ名)」(例えばGAMESSの場合は「hpcsys\_gamess」)と入力し**OK**をクリックしてください。



# III. プロファイルの新規作成

1. **Connection**の**Host Name** (IPアドレス、ホスト名)、**Port** (接続ポート番号)、**User Name** (ユーザ名)、**Password** (パスワードではなく秘密鍵のパスフレーズ) に、HPCシステムズから通知のあった情報を入力します。
2. **SSH Private Key**の…ボタンをクリックし、秘密鍵を選択します。(P. 4の手順の場合で秘密鍵を生成した場合はid\_rsa\_hpcsys) 秘密鍵がPEM形式以外の場合は[この手順](#)で変換します。
3. 入力後、**Test Connection**をクリックし、**接続テストのみ**をクリックします。数秒間テストが流れ、「テストが正常に終了しました」と表示されたら先に進みます。表示されなかった場合は、**Connection**の入力内容を再度見直します。





# III. プロファイルの新規作成

1. **QueueのOptions**に、`qsub`コマンドの引数を入力します。なお、「`%WM_NUM_PROC%`」などのエイリアスを利用すると並列数などに関する設定を簡略化できます。（詳細は[こちら](#)）ひとまず動作確認だけしたいときはデフォルトの設定で先に進みます。
2. **Test Connection**をクリックし、接続テストで**両方実行**をクリックします。**最大待ち時間**には、ジョブが実際にサブミットされ処理が環境するまでの適当な秒数を入力し**OK**をクリックします。しばらくテストが流れ、「テストが正常に終了しました。」と表示されたら先に進みます。表示されなかった場合は、**Queue**の入力内容を再度見直します。

Queue

Queue: PBS

Options: `-l nodes=1:ppn=%WM_NUM_PARALLEL% -l walltime=23:50:00`

Prefix for Queueing Commands:

Remote Directory (For project mode): `wm_%WM_USER_ID%` /`/%WM_PROJ%//%WM_PROJ_WORKDIR%/`

Remote Directory (For file mode): `wm_%WM_USER_ID%//%WM_SOLVER%//%WM_PREFIX%/`

Clear Test Connection... OK Cancel

接続テスト

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？  
後者は時間がかかる可能性があります。

両方実行 接続テストのみ キャンセル

ジョブスケジューラの動作テストの最大待ち時間を入力

最大待ち時間[秒] 180 OK

# III. プロファイルの新規作成

1. Remote Server Profilesウィンドウ右下のOKをクリックします。
2. ジョブの設定ウィンドウでプロフィールに先ほど作成したプロフィールが選択されていることを確認します。

Remote Server Profiles

Profile Name: hpcsys\_gamess

Server | Template Scripts

Connection

Host Name: xxx.xxx.xxx.xxx | Port: 22 | Timeout [sec]: 60

User Name: xxxxxxx | Password: xxxxxxx | Show

SSH Private Key: xxxxxxxx | ...

Port Forward

Remote Host: | Remote Port: 22 | Local Port: 2222

Show Console

Queue

Queue: PBS

Options: -l nodes=1:ppn=%WM\_NUM\_PARALLEL% -l walltime=23:50:00

Prefix for Queueing Commands: |

Remote Directory (For project mode): wm\_%WM\_USER\_ID% /%WM\_PROJ%/%WM\_PROJ\_WORKDIR%/

Remote Directory (For file mode): wm\_%WM\_USER\_ID%/%WM\_SOLVER%/%WM\_PREFIX%/

Clear | Test | **OK** | Cancel

ジョブの設定

このマシンでジョブを実行

リモートマシンでジョブを実行

プロフィール: hpcsys\_gamess | ...

ソルバ: gamess

テンプレートスクリプト: (Default) | New... | Edit...

オプション: -l nodes=1:ppn=1 -l walltime=23:50:00

Test Connection... | Control...

接続情報

SSH: xxxxxxx@xxx.xxx.xxx.xxx  
Command: qsub -o remotejob\_stdout.txt -e remotejob\_stderr.txt -N g -l nodes=1:ppn=1 -l walltime=23:50:00 (script).pbs

ファイルの保存後ジョブを実行しない

並列数

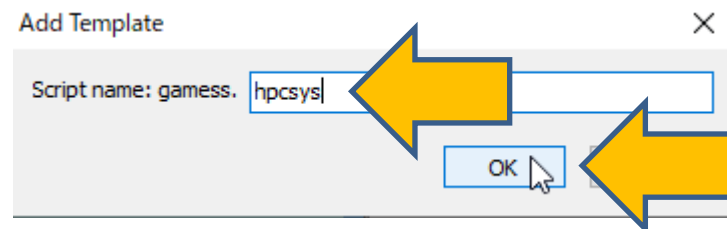
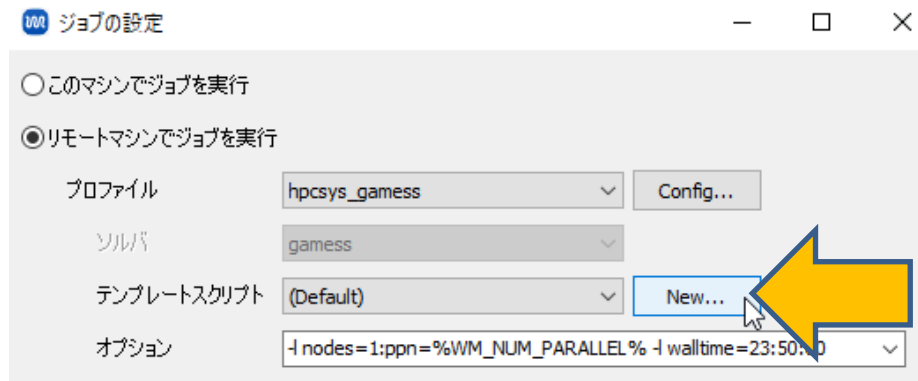
# of MPI Procs: 1 | # of Threads / MPI Proc: 1

作業フォルダ名: work

**実行** | キャンセル

# IV. テンプレートスクリプトの選択

1. テンプレートスクリプトの**New**をクリックし、**Script name**に「hpcsys」と入力し**OK**をクリックします。



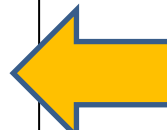
# IV. テンプレートスクリプトの選択

1. テキストエディタでテンプレートスクリプトが開いたら、「# Insert commands here」と「# Do not modify the followings」の間にソルバの起動に必要な設定・コマンドを追記し保存します。設定・コマンドについては <https://www.hpc.co.jp/support/> のマニュアル・ダウンロード→HPCアプリケーションから確認できます。

```
gameess.hpcsys.txt - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
#!/bin/bash
#WM_SCRIPT_HEADER
if [ ! -z $PBS_O_WORKDIR ]; then
  cd $PBS_O_WORKDIR
fi
if [ ! -z $PBS_NODEFILE ]; then
  uniq $PBS_NODEFILE > hostfile
fi
#WM VERSION 11.3.1

export LANG=C
date
pwd

#WM_SCRIPT_BODY
set +y
echo "*****"
echo "***          Start GAMESS job          ***"
echo "*****"
set -y
set +y
echo "*****"
echo "***          Set user-defined variables          ***"
echo "*****"
set -y
# Insert commands here
# Do not modify the followings
set +y
echo "*****"
echo "***          Check environment          ***"
```



例： /usr/local/gaussian16b01\_legacyにインストールされているGaussian (g16) を利用したい場合は以下のように追記します。(プログラムのインストール場所は同じプログラムでもユーザによって異なりますので都度確認してください。)

```
...
# Insert commands here
export PATH=$PATH:/usr/local/gaussian16b01_legacy
# Do not modify the followings
...
```

# IV. テンプレートスクリプトの選択

1. **Test Connection**をクリックし、接続テストで**両方実行**をクリックします。**最大待ち時間**には、ジョブが実際にサブミットされ処理が環境するまでの適当な秒数を入力し**OK**をクリックします。「リモートサーバ上での●●●のテストを実行しますか?」と表示されたら**はい**をクリックします。しばらくテストが流れ、「テストが正常に終了しました」と表示されたら先に進みます。表示されなかった場合は、P.12の設定内容を再度見直します。

Winmostar ジョブの設定

このマシンでジョブを実行  
 リモートマシンでジョブを実行

プロファイル: hpcsys\_gamess [Config...]

ソルバ: gamess

テンプレートスクリプト: gamess.hpcsys.txt [New... Edit...]

オプション: -l nodes=1:ppn=%WM\_NUM\_PARALLEL% -lltime=23:50:00 [Test Connection...]

接続情報: SSH: xxxxxx@xxx.xxx.xxx.xxx  
Command: msub -o remotejob\_stdout.txt -e remotejob\_stderr.txt -N g nodes=1:ppn=1 -l walltime=23:50:00 (script).pbs

ファイルの保存後ジョブを実行しない

並列数: # of MPI Procs: 1 # of Threads / MPI Proc: 1

作業フォルダ名: work

[RUN] 実行 [キャンセル]

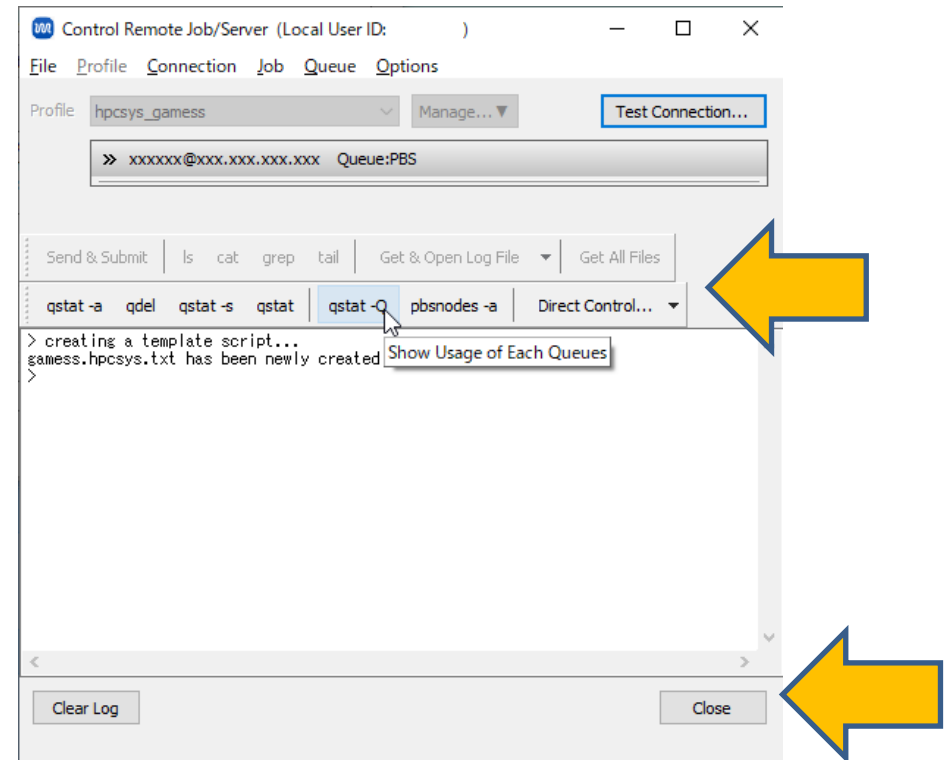
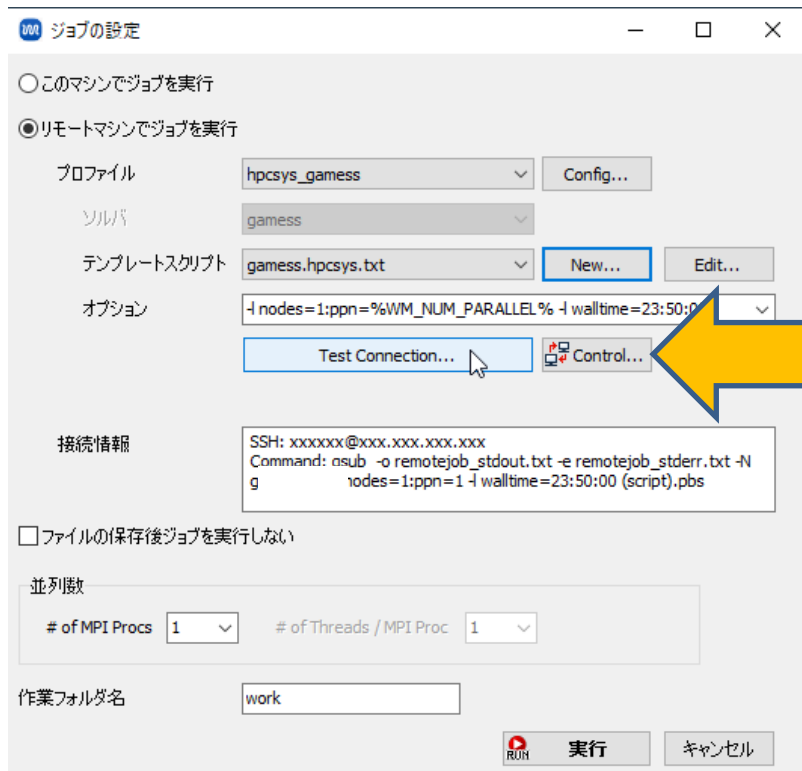
情報

**i** リモートサーバ上でのGAMESSのテストも実行しますか?このテストは時間がかかる可能性があります。

はい(Y) [キャンセル]

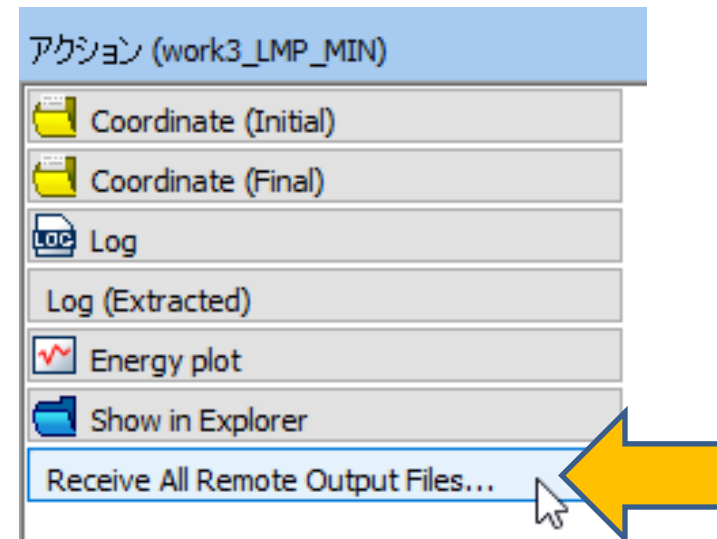
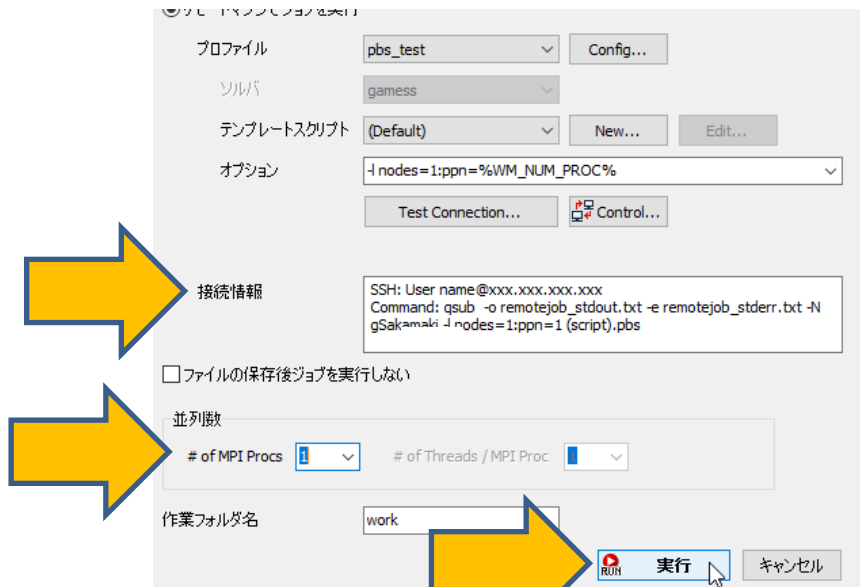
# V. リモートサーバの状態確認

1. リモートサーバのキューの状態などの確認が不要な場合はP. 15に進みます。確認したい場合は**Control**をクリックします。
2. **Control Remote Job/Server**ウィンドウ中段のボタンで必要な操作を実行してください。
3. 実行後、**Close**をクリックしてください。



# VI. ジョブの実行

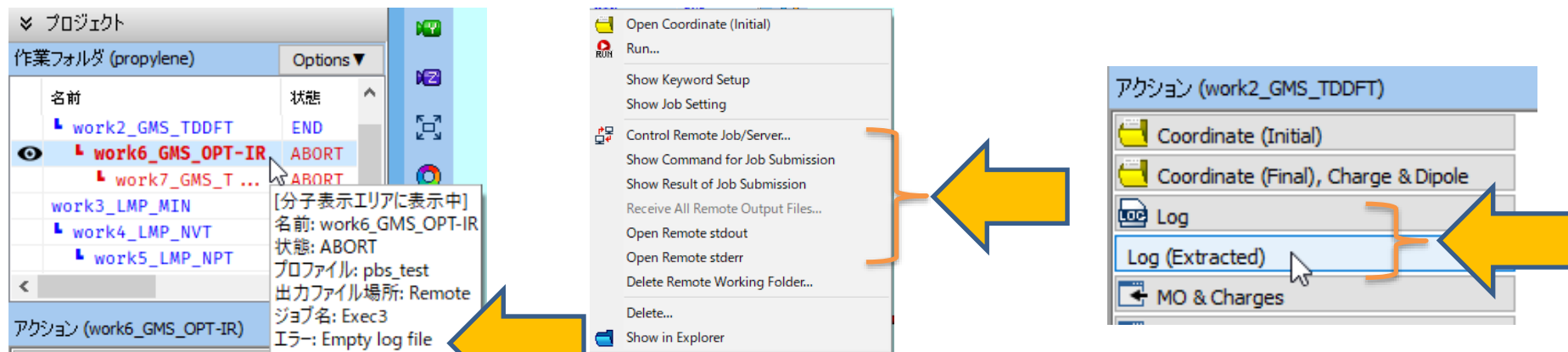
1. **接続情報**を確認しながら**並列数**を適宜変更し**実行**をクリックしてジョブを開始します。
2. 作業フォルダの**状態**は、正常に計算が進行した場合は  
**NEW**→**SEND**→**PEND**→**RUN**→**END(Rem)**（正常終了し出力ファイルがリモートにある）  
→**RECV**→**END**（正常終了し全出力ファイルがローカルに転送済み）と自動で変化します。
3. ソルバによっては最後に**END**の代わりに**END(-)**（正常終了しログ等一部ファイルのみローカルに転送済み）となります。その場合、必要に応じて**アクション**から**Receive All Remote Output Files**をクリックし全ての出力ファイルをローカルに転送します。
4. その後、ローカルジョブと同様に結果の可視化、解析を行います。



# ジョブ実行後エラーが発生した場合の対処

作業フォルダの状態が**ABORT**（異常終了）の場合、次の手順でエラー発生箇所を推定します。

- プロジェクト表示エリアで対象の作業フォルダにマウスカーソルを重ね、エラーメッセージを確認します。
- 対象の作業フォルダを右クリックし、**Show Command for Job Submission**と**Show Result of Job Submission**でジョブをサブミットしたときの状況を確認します。
- 対象の作業フォルダをクリックし、**アクション**で**Log (Extracted)**または**Log**をクリックしログファイルの内容を確認します。
- 対象の作業フォルダを右クリックし、**Open Remote stdout**または**stderr**からリモートサーバで実行された際の標準出力・エラーを確認します。
- 対象の作業フォルダを右クリックし、**Control Remote Job/Server**をクリックし、**ls**、**tail**、**Get & Open...**などでサーバの状態やサーバ上のファイルの状態を確認します。





# 最後に

- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。



## [ユーザマニュアル](#)



## [Winmostar 講習会](#)の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、[Winmostar導入講習会](#)、[Winmostar基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)の受講をご検討ください。（詳細はP.2）
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず[よくある質問](#)を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、[お問合せフォーム](#)に、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上