#### **M** winmostar チュートリアル

# リモートジョブ プロジェクトモード向け

V11.6.4

2025年7月1日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.



- 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<u>ユーザマニュアル</u>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。
  - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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<u>よくある質問</u>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。



- 本書ではプロジェクトモード向けのリモートジョブの実行方法のみを示します。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。
- ・ ファイルモード向けのリモートジョブの実行方法は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





#### I. 事前準備

- 1. リモートサーバにSSHで接続するために必要な以下の情報を確認してください。接続情報の入 力時に必要です。
  - ホスト名またはIPアドレス
  - ユーザ名
  - パスワード
  - その他必要に応じてSSHの各種設定
- 2. リモートサーバにSSHでログインし、ジョブスケジューラが動作していることを確認してくだ さい。
  - ジョブスケジューラのインストール方法は<u>こちら</u>で確認頂けます。
- 3. リモートサーバにSSHでログインし、対象のソルバがインストールされていることを確認して ください。
  - ソルバのインストール方法はこちらで確認頂けます。
- 4. リモートサーバにSSHでログインし、ジョブスケジューラを用いて対象のソルバを使用できる ことを確認してください。テンプレートスクリプトの編集に必要です。

# II. プロファイルの選択

- <u>各ソルバのチュートリアルの基礎編</u>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. すでにこれから使うリモートサーバ用のプロファイルがある場合はプロファイルでそれを選択 しP. 10に進んでください。そうでない場合はプロファイルのConfigをクリックします。

👐 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	2			_	
プロファイル	pbs_example ~	Config			
אונע	gamess $\vee$				
テンプレートスクリプト	(Default) ~	New	Edit		
オプション	-I nodes=1:ppn=%WM_NUM_	PROC%			$\sim$
	Test Connection	Control			
接続情報	SSH: User name@xxx.xxx.xx Command: qsub -o remotejol -l nodes=1:ppn=1	xx.xxx o_stdout.txt -e remo (script).pbs	otejob_std	err.txt -1	ı
□ ファイルの保存後ジョブを実行	テしない				
並列数					
# of MPI Procs $1 \sim$	# of Threads / MPI Proc	1 ~			

- **1. Profile Name**でこれから使うリモートサーバの設定に最も近いものを選択してください。特に近いものがない場合は適当で構いません。
- 2. DuplicateをクリックしNew Profile Nameに適当な名前を入力しOKをクリックしてください。

Pos_example pos_example Server Tersge_example slurm_example Connect [sf_example focus oness	New Rename Duplicate	
Host N focus_g16 focus_ge	Port 22 Timeout [sec] 60	
User N focus_lammps focus_g16_tunnel	Password •• Show	
SSH Pr focus_ge_eis focus_gromacs		Profile Name
Remote Port 22	Local Port 2222	New Profile Name obs. test
Show Console		hew Home Hume pos_dest
Queue		ОК
Queue PBS $\vee$		
Options -I nodes=1:ppn=%WN	1_NUM_PROC%	
Prefix for Queueing Commands		
Remote Directory wm_%WM_USER_ID% (For project mode)	/%WM_PROJ%/%WM_PROJ_WORKDIR%/	
Demote Directory, um 9/10/M LICED TD9/	6/%WM_SOLVER%/%WM_PREFIX%/	

- **1.** ConnectionのHost Name (IPアドレス、ホスト名)、User Name (ユーザ名)、 Password (パスワード)などに、接続したいリモートサーバの情報を入力します。
- 入力後、Test Connectionをクリックし、SSH接続テストのみにチェックをいれOK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。Test Connection機能の詳細はこちらで確認できます。

Profile Name pbs_te	st ~ New Rename.	Duplicate Delete		
Connection	cripts		200 住 キーフト	
Host Name	xxx.xxx.xxx Port 22	Timeout [sec] 60	11日本 11日本 11日本 11日本 11日本 11日本 11日本 11日本	
User Name	User name Password ••	Show	リモートサーバ上でテストする項目を選んびださい	
SSH Private K	У			1
Port Forwa	rd Remote Host		<ul> <li>SSH接続のみ</li> </ul>	
	Remote Port 22 Local Port 222	2	○ ssH接結とジョブスケジューラ	
Show Co	nsole			
Queue				
Queue	PBS ~		ジョブフケジュ ニョの是大 待ち時間[4] 50	
Options	H nodes=1:ppn=%WM_NUM_PROC%	~		
Prefix for Que	ueing Commands			
Remote Direct (For project m	pry wm_%WM_USER_ID% /%WM_PRO	)3%/%WM_PROJ_WORKDIR%/		
Remote Direct (For file mode	wm_%WM_USER_ID%/%WM_SOLVER%/%WM_PREF	FIX%/		

winmostar Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

×

- QueueのQueue(ジョブスケジューラの種類)、Options(サブミットコマンドの引数)などに、接続したいリモートサーバの情報を入力します。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<u>こちら</u>)
- 2. 入力後、Test Connectionをクリックし、SSH接続とジョブスケジューラにチェックを入れ ます。(このテストでは実際に短時間で終わるジョブを投入し正常に実行されるかを確かめま す。)ジョブスケジューラの最大最大待ち時間には、ジョブが実際にサブミットされ処理が完 了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ま たはOptionsの設定が不適切か、その時点でジョブスケジューラ上で待ちが発生していること が考えられます。QueueまたはOptionsの入力内容を再度見直すか、ジョブスケジューラに 町が発生していない状態で再度実行してください。Test Connection機能の詳細は<u>こちら</u>で 確認できます。

<u>_/</u>	Queue PBS V
_/	Options
	Prefix for Queueing Commands
	Remote Directory wm_%WM_USER_ID% /%WM_PROJ%/%WM_PROJ_WORKDIR%/
	Remote Directory wm_%WM_USER_ID%/%WM_SOLVER%/%WM_PREFIX%/ (For file mode)
	Clear Test Connection OK Cancel



- 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ァイルに先ほど作成したプロファイルが選択されていることを確認します。

	1997の設定 - ロ X
Profile Name pbs_test V New Rename Duplicate Delete	○このマシンでジョブを実行
Server Template Scripts	・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・
Connection	プロファイル pbs_test ~
Host Name         xxx.xxx.xxx         Port         22         Timeout [sec]         60	ソルバ gamess ~
User Name Dessword •• Show	テンプレートスクリプト (Default) Vew Edit
SSH Private Key	オプション
Port Forward Remote Host	Test Connection
Remote Port 22 Local Port 2222	
Queue PBS V	接続情報 SSH: User name@xxx.xxx.xxx Command: qsub -o remotejob_stdout.txt -e remotejob_stderr.txt -N -l nodes=1:ppn=1 (script).pbs
Options	
Prefix for Queueing Commands         Remote Directory       wm_%WM_USER_ID%       /%WM_PROJ%/%WM_PROJ_WORKDIR%/         (For project mode)       wm_%WM_USER_ID%/%WM_SOLVER%/%WM_PREFIX%/         (For file mode)       wm_%WM_USER_ID%/%WM_SOLVER%/%WM_PREFIX%/	並列数 # of MPI Procs 1 ~ # of Threads / MPI Proc
Clear Te OK Cancel	作業フォルダ名 work

## IV.テンプレートスクリプトの選択

- すでにこれから使うリモートサーバ用のテンプレートスクリプトがある場合はテンプレートス クリプトでそれを選択しP.12に進みます。そうでない場合は、テンプレートスクリプトの Newをクリックし、Script nameに適当な名前を入力しOKをクリックします。なお、テン プレートスクリプトの中身はP.8のQueueの種類に応じて変更する必要があるため、Queueを 変更した場合は変更前に使用したテンプレートスクリプトを使用できません。
- 2. 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コマンドを追記し 保存します。すでにソルバにPATHが通っている場合は特に追加不要なことがあります。

	🚾 ジョブの設定		_		×		ammps.1.bxt - 火モ帳 —		×	
	○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 ソルバ	pbs_test  Config gamess			1		ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルブ(H) ドー/bin/bash #WM_SCRIPT_HEADER if [ 1 - 2 \$PBS_0_WORKDIR ]; then cd \$PBS_0_WORKDIR fi if [ ! -z \$PBS_NODEFILE ]; then unig \$PBS_NODEFILE > hostfile fi #WM_VERSION 11.2.1 export LANG=C			
	テンプレートスクリプト オプション	(Default)     New       I nodes=1:ppn=%WM_NUM_PROC%       Test Connection			~		date           pwd           #WM_SCRIPT_BODY           set +v           echo "************************************			
	Add Template			×			set +v echo "************************************			4
	Script name: gam	ess. test					set v # Insert commands here MPI_COMMAND="mpirunhostfile \$PBS_NODEFILE -n %WM_NUM_ BIN_LAMMPS=Imp_mpi OPT_LAMMPS_CONV_RESTART=-restart # for LAMMPS before 240 #OPT_LAMMPS_CONV_RESTART=-restart2data # for LAMMPS afte 240ct2018	PROC% ″ =t2018		
<b>N</b> w	inmostar	Copyright 2008-2	025 X-	Abili	ty C	o., Ltd.	# Do not modify the followings echo "************************************			

## IV.テンプレートスクリプトの選択

 Test Connectionをクリックし、SSH接続とジョブスケジューラと●●●(選択したソルバ 名)にチェックを入れます。ジョブスケジューラの最大待ち時間には、ジョブが実際にサブ ミットされ処理が完了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、P.10の設定内容を再度見直します。Test Connection機能の詳細は<u>こちら</u>で確認でき ます。

🚾 ジョブの設定	-		×	-
<ul> <li>○このマシンでジョブを実行</li> <li>●リモートマシンでジョブを実行</li> </ul>	Ŧ			🚾 接続テスト - ロ X
プロファイル ソルバ テンプレートスクリプト オプション	pbs_test     Config       gamess     (Default)       Indes=1:ppn=%WM_NUM_PROF to		~	リモートサーバ上でテストする項目を選んでください ○ SSH接続のみ ○ SSH接続とジョブスケジューラ
接続情報	Test Connection SSH: User name@xxx.xxx.xxx Command: qsub -o remotejob_stdout.txt -e remotejob_ gSakamaki -i nodes=1:ppn=1 (script).pbs	stderr.txt	-N	<ul> <li>③ SSH接続とジョブスケジューラとGromacs</li> <li>ジョブスケジューラの最大待ち時間[s]</li> <li>OK</li> <li>キャンセル</li> </ul>
□ ファイルの保存後ジョブを実 並列数 # of MPI Procs 1 〜	行しない # of Threads / MPI Proc			

## 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. 12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。

🕺 ジョブの設定	- 0	× Control Remote Job/Server (Local User ID: ) − □ ×	
○このマシンでジョブを実行		File Profile Connection Job Queue Options	
●リモートマシンでジョブを実行		Profile pbs_test ∨ Manage▼ Test Connection	
プロファイル	pbs_test ~ Config	» @172.27.31.114 Queue:PBS	
אתע	gamess 🗸		
テンプレートスクリプト	(Default) V New Edit	Send & Submit   Is cat grep tail   Get & Open Log File 🔻   Get All Files	
オプション	-I nodes=1:ppn=%WM_NUM_PROC%	🗸 🗸 qstat -a qdel qstat -s qstat   qstat -Q pbsnodes -a   Direct Control 🔻	
接続情報	SSH: User name@xxx.xxx.xxx.xxx Command: qsub -o remotejob_stdout.txt -e remotejob_stderr.txt -N I nodes=1:ppn=1 (script).pbs	samess.tListSubmitted Jobs ewly created at > Started connection test > (1/4) Connecting to server > (2/4) Creating a directory > (3/4) Sending data > (4/4) Recieving data Connection test succeeded. Successfully finished > gatat -a	
□ファイルの保存後ジョブを実			
並列数 # of MPI Procs 🚺 🗸	# of Threads / MPI Proc		
作業フォルダ名	work      Work     ま     おやンセル	Clear Log Close	Ċ

### 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。
- 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。

	プロファイル	pbs_test ~ Config	
	אווע	gamess 🗸	アクション (work3_LMP_MIN)
	テンプレートスクリプト	(Default) V New Edit	Coordinate (Initial)
	オプション	-I nodes=1:ppn=%WM_NUM_PROC%	
N		Test Connection	Coordinate (Final)
	接続情報	SSH: User name@xxxx.xxx.xxx Command: gsub -o remotejob_stdout.txt -e remotejob_stderr.txt -N	
		gaa	Log (Extracted)
	□ファイルの保存後ジョブを実	行しない	C Energy plot
	並列数		
	# of MPI Procs 👖 🗸	# of Threads / MPI Proc	Show in Explorer
	作業フォルタ名	work	Receive All Remote Output Files
	moctor	Converiant 2000 2025 V Ability Co. 1	
	iiiustai	copyright 2008-2025 X-Adility Co., L	LL(I.

#### 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個所を推定します。

- 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をクリックし口 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、Is、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。





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>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<u>よくある質問</u>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