

 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

2024年1月31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**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[ユーザマニュアル](#)を参照してください。

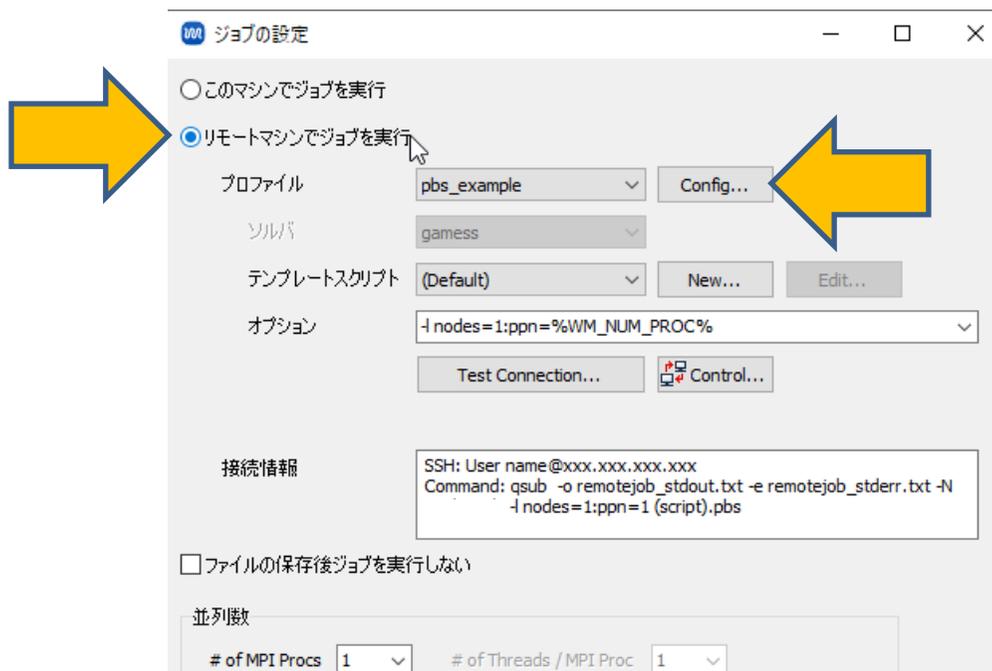


I. 事前準備

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[こちら](#)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。

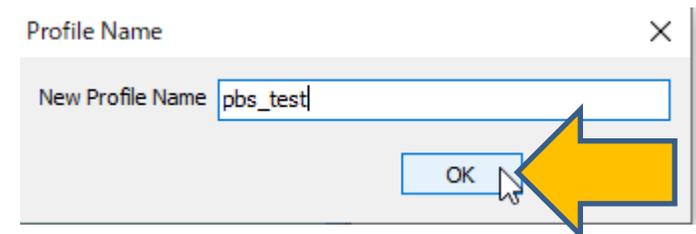
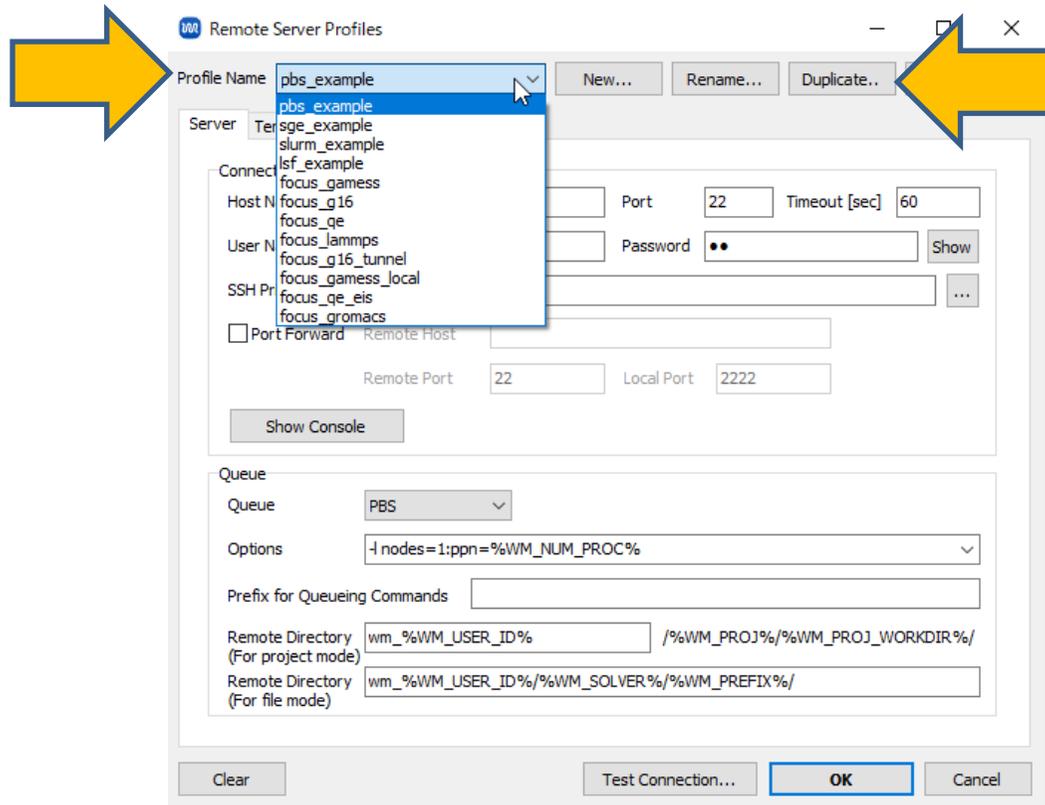
II. プロファイルの選択

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. 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。



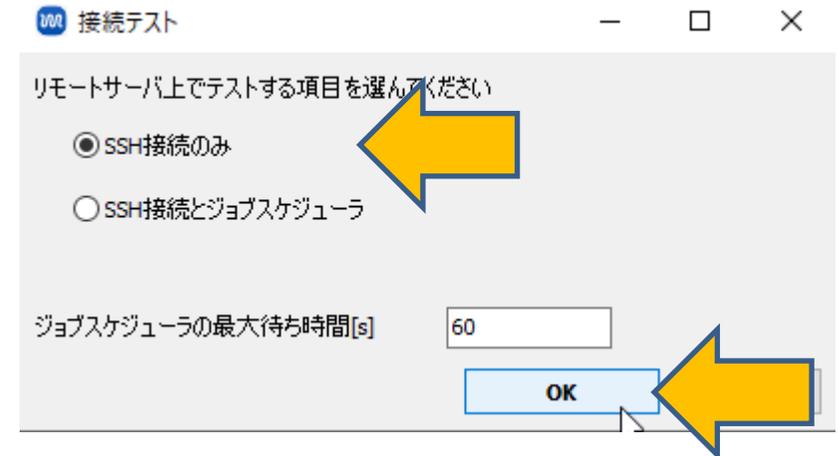
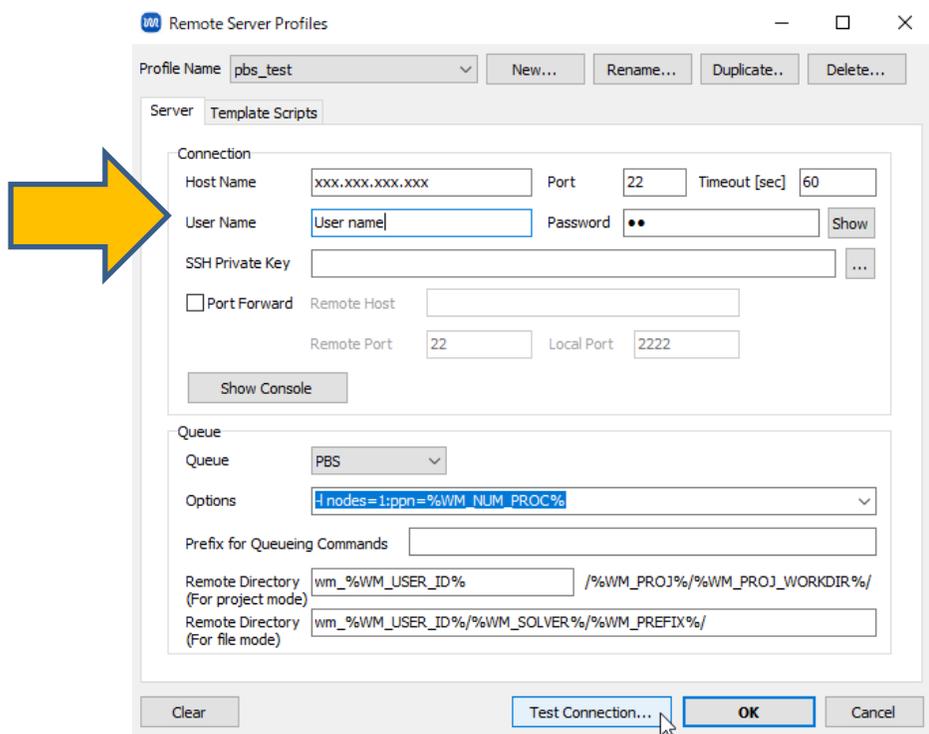
III. プロファイルの新規作成

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。



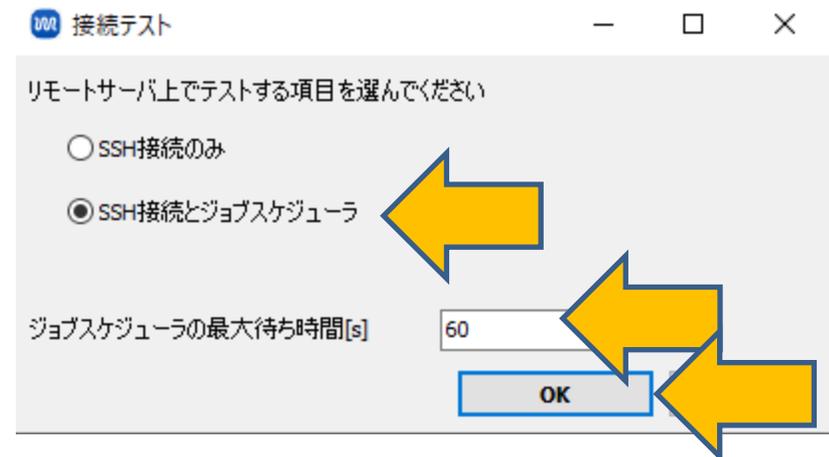
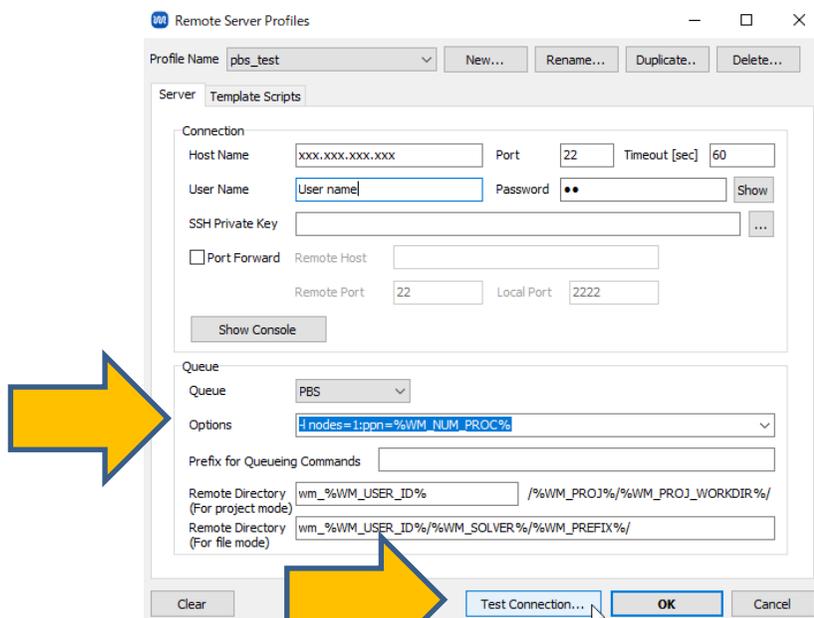
III. プロファイルの新規作成

1. **Connection**の**Host Name** (IPアドレス、ホスト名)、**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。
2. 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。



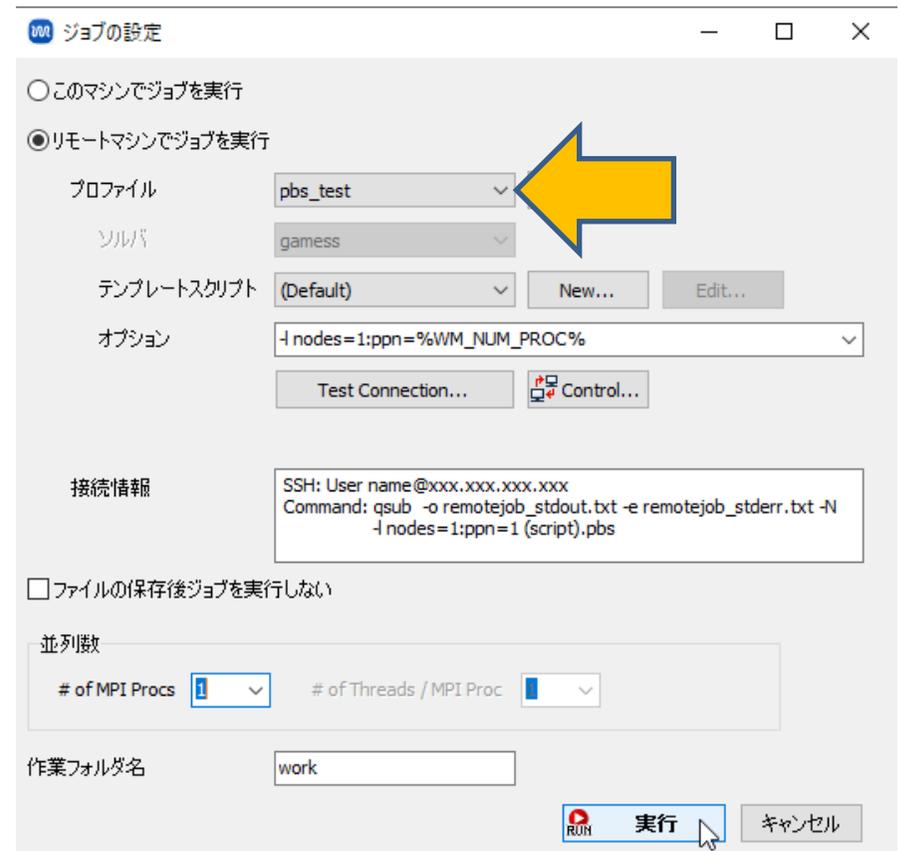
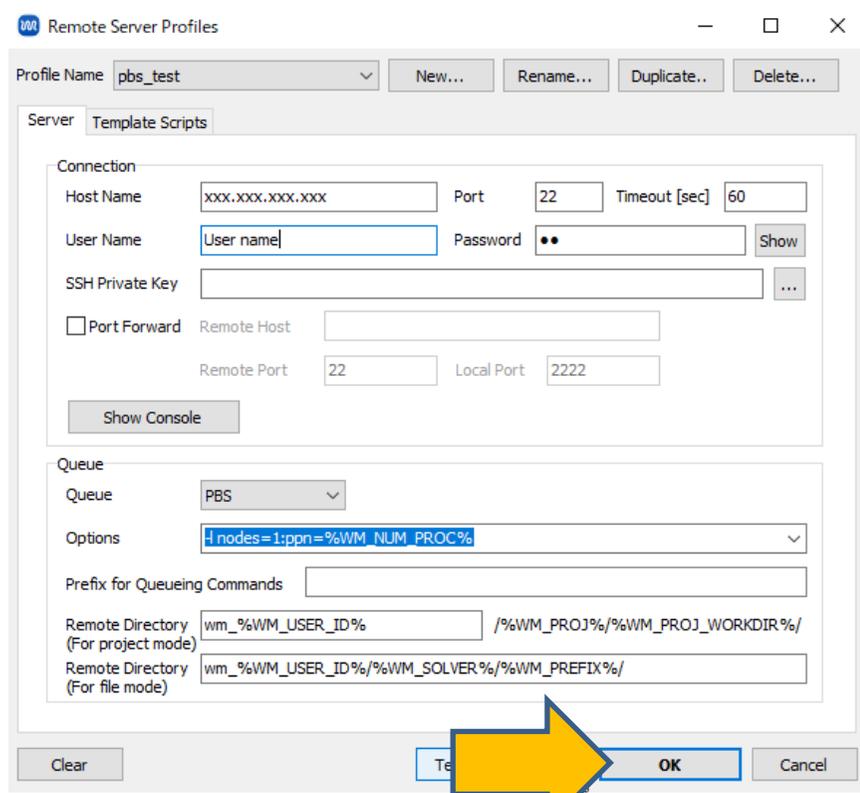
III. プロファイルの新規作成

1. **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[こちら](#)）
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。**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**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. 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。



IV. テンプレートスクリプトの選択

1. 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ことがあります。

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

プロフィール: pbs_test [Config...]

ソルバ: gamess

テンプレートスクリプト: (Default) [New...]

オプション: -l nodes=1:ppn=%WM_NUM_PROC%

Test Connection... Control...

Add Template

Script name: gamess. test [OK]

```
lammps.1.txt - Xモック
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 11.2.1

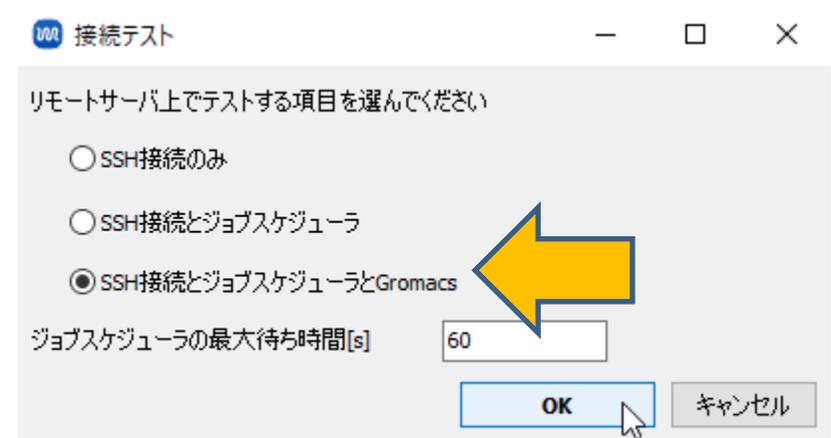
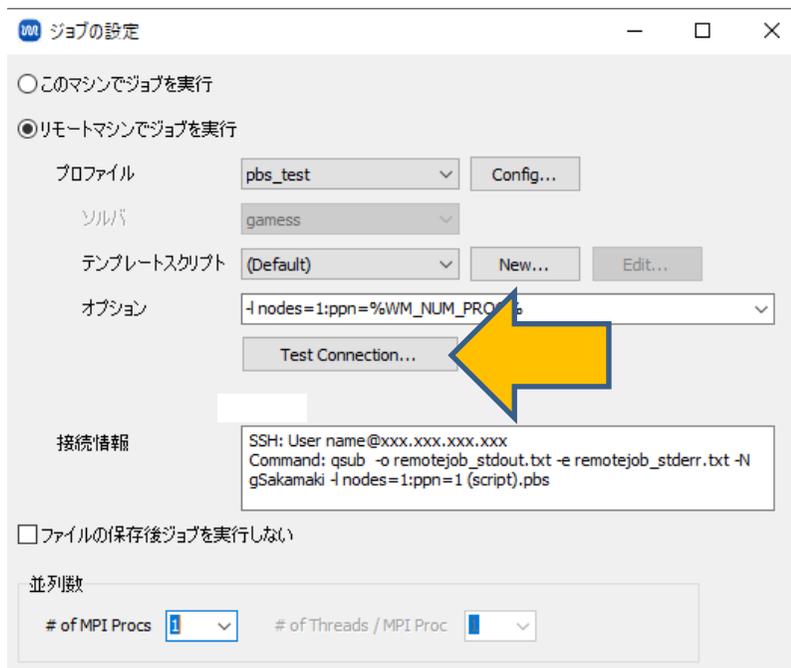
export LANG=C
date
pwd

#WM_SCRIPT_BODY
set -v
echo "*****"
echo "***          Start LAMMPS job          ***"
echo "*****"
set -v
set +v
echo "*****"
echo "***          Set user-defined variables          ***"
echo "*****"
set -v
# Insert commands here
MPI_COMMAND="mpirun --hostfile $PBS_NODEFILE -n %WM_NUM_PROC%"
BIN_LAMMPS=lmpp_mpi
OPT_LAMMPS_CONV_RESTART="--restart # for LAMMPS before 240ct2018"
#OPT_LAMMPS_CONV_RESTART="--restart2data # for LAMMPS after 240ct2018"

# Do not modify the followings
set +v
echo "*****"
```

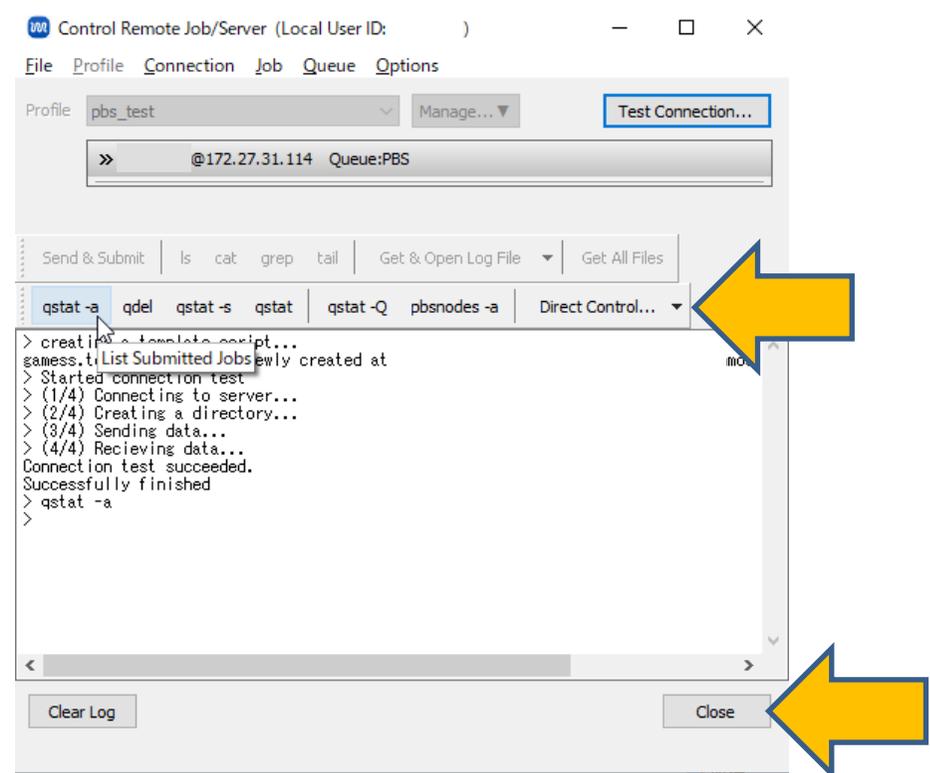
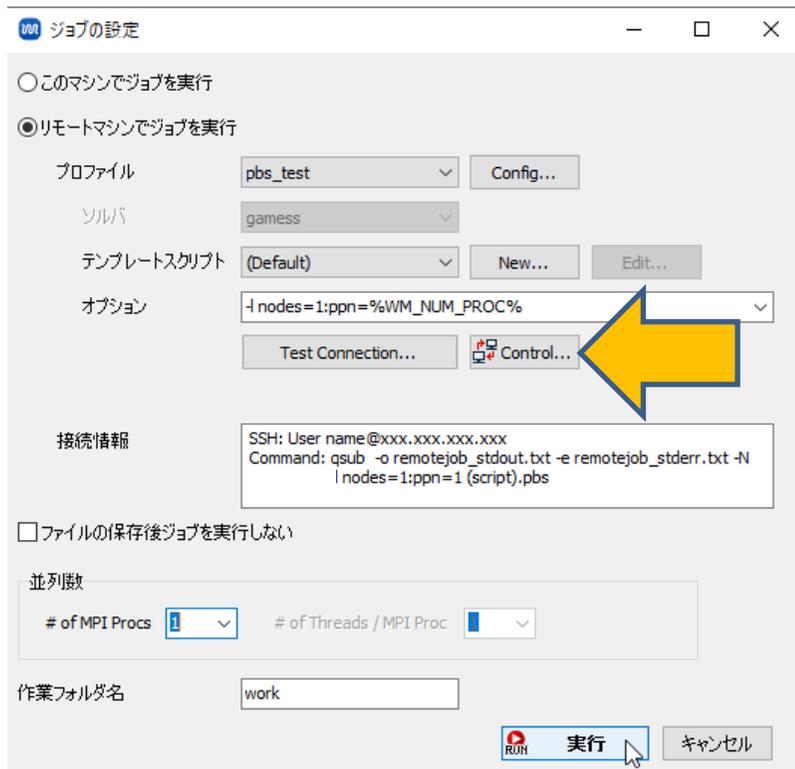
IV. テンプレートスクリプトの選択

1. **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。



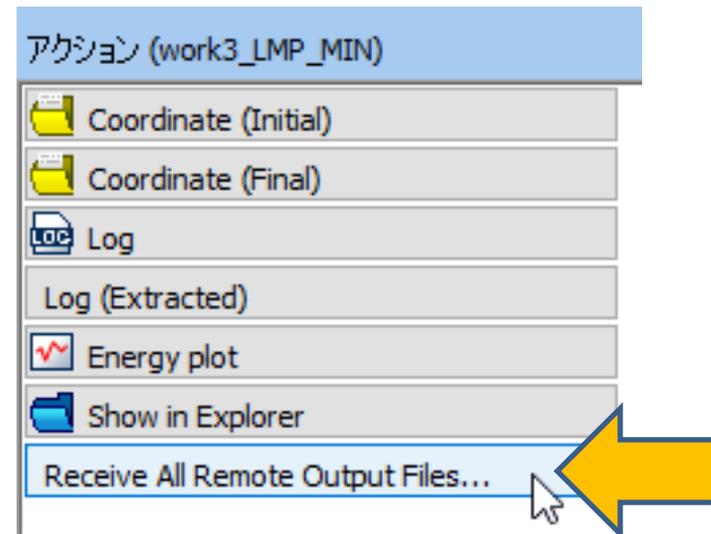
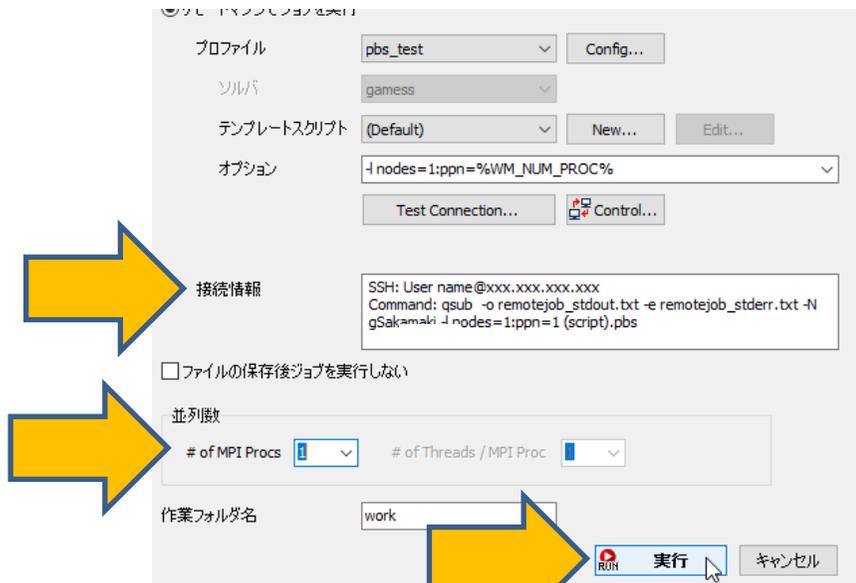
V. リモートサーバの状態確認

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。



VI. ジョブの実行

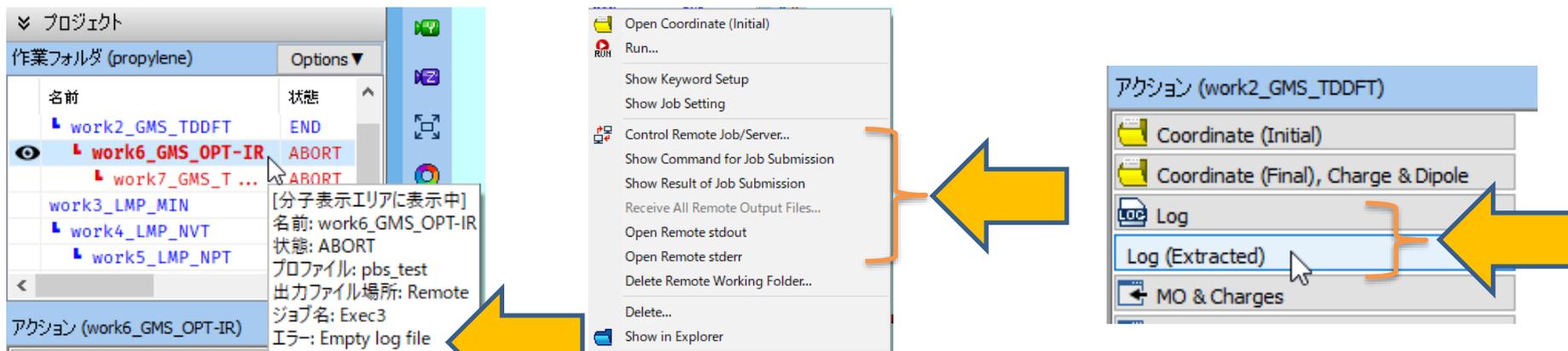
1. **接続情報**を確認しながら**並列数**を適宜変更し**実行**をクリックしてジョブを開始します。
2. 作業フォルダの**状態**は、正常に計算が進行した場合は
NEW→**SEND**→**PEND**→**RUN**→**END(Rem)**（正常終了し出力ファイルがリモートにある）
→**RECV**→**END**（正常終了し全出力ファイルがローカルに転送済み）と自動で変化します。
3. ソルバによっては最後に**END**の代わりに**END(-)**（正常終了しログ等一部ファイルのみローカルに転送済み）となります。その場合、必要に応じて**アクション**から**Receive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