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 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

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。

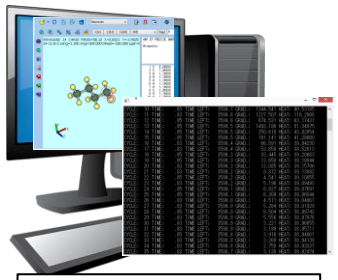
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。

- 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。

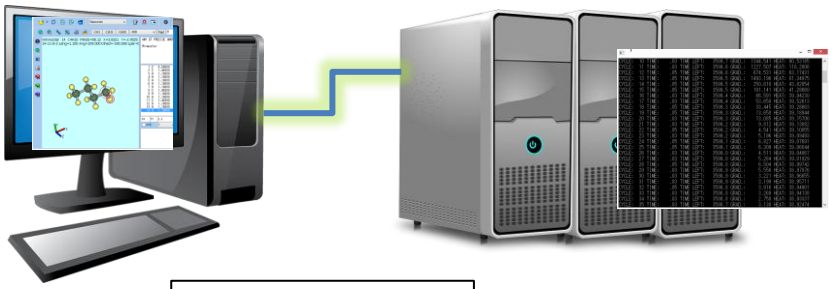
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾なく、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。

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。



ローカルジョブ



リモートジョブ

Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

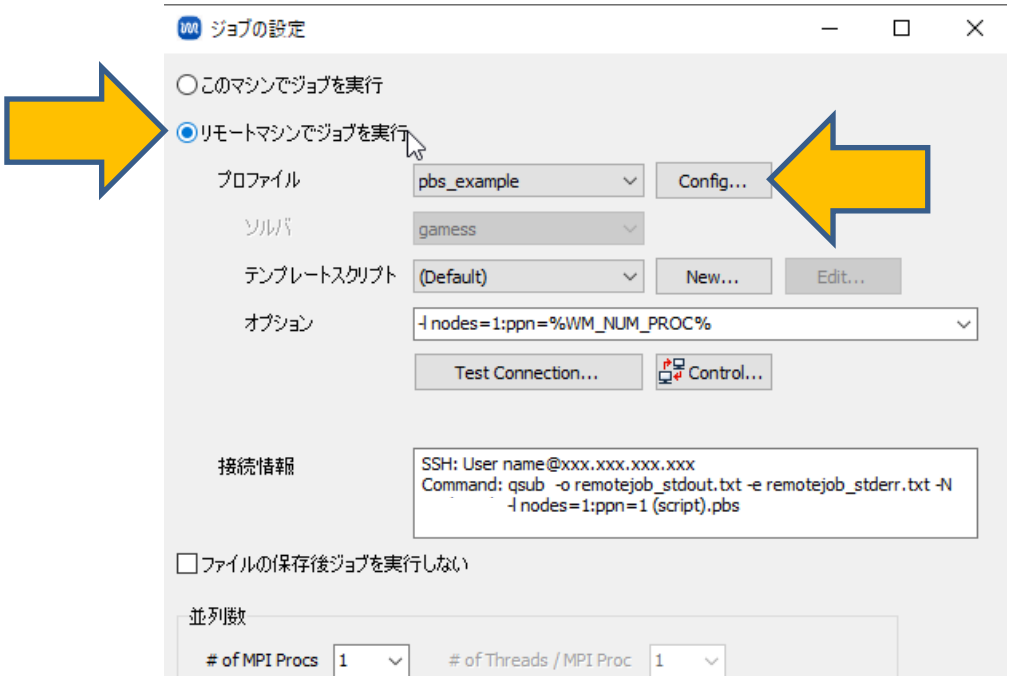
I. 事前準備

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。

Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

II. プロファイルの選択

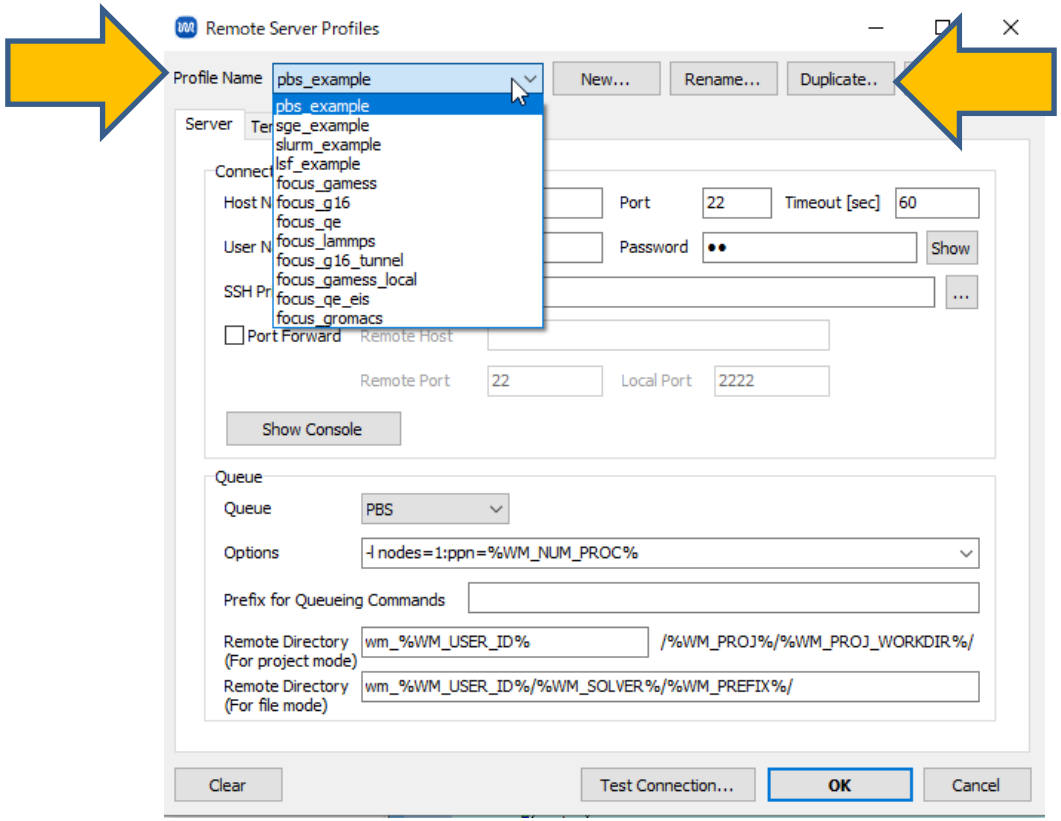
1. 各ソルバのチュートリアルの基礎編に倣い、計算したい分子・原子構造を作成し、使用したいソルバの **ワークフロー設定**をクリックし**Workflow Setup**ウィンドウで計算条件を設定した後、**OK**をクリックし**ジョブの設定**ウィンドウに進みます。
2. **リモートマシンでジョブを実行**にチェックを入れます。
3. すでにこれから使うリモートサーバ用のプロファイルがある場合は**プロファイル**でそれを選択しP. 10に進んでください。そうでない場合は**プロファイル**の**Config**をクリックします。

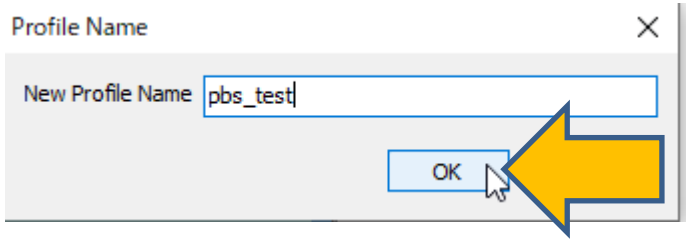


Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

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。

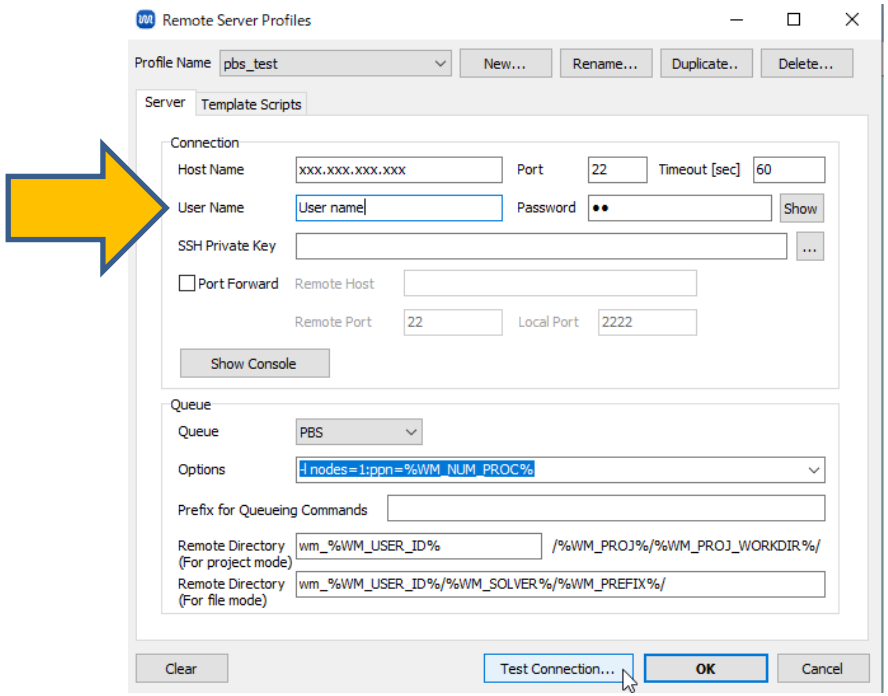


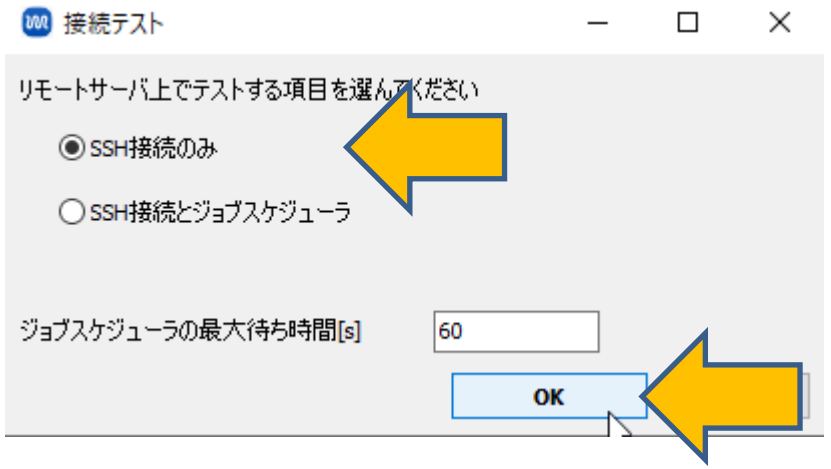


Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

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。**Test Connection**機能の詳細は[こちら]で確認できます。

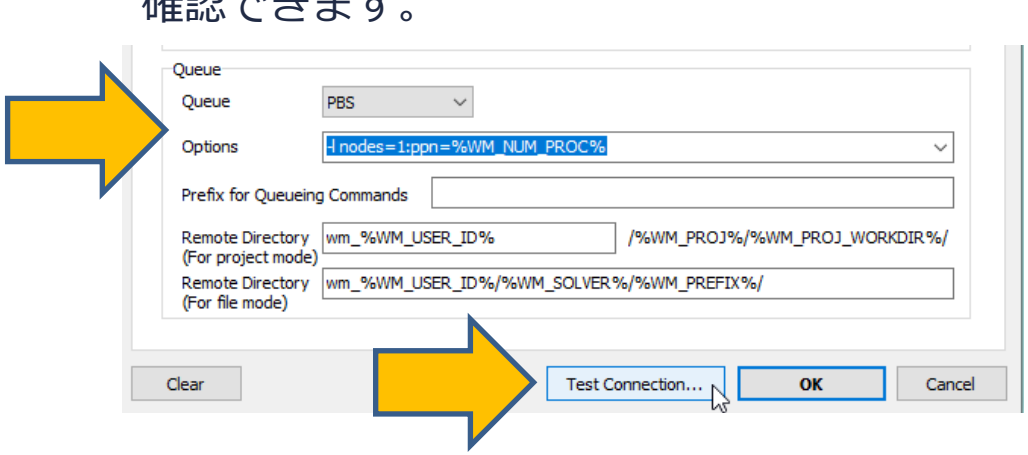


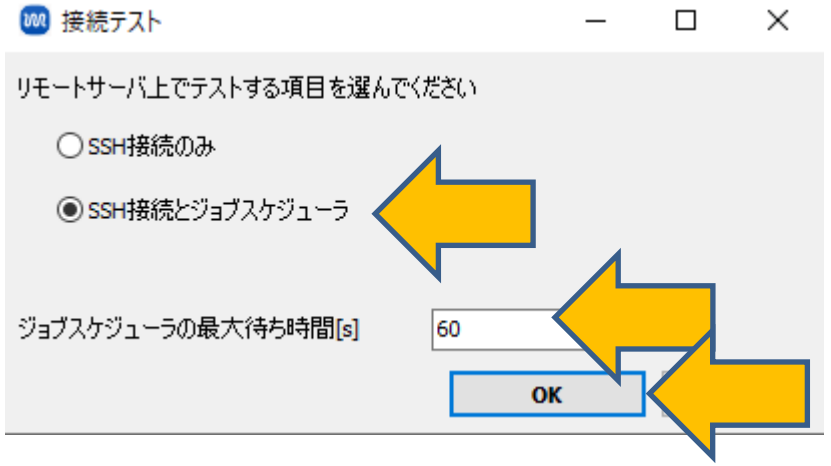


Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

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。（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[こちら]で確認できます。

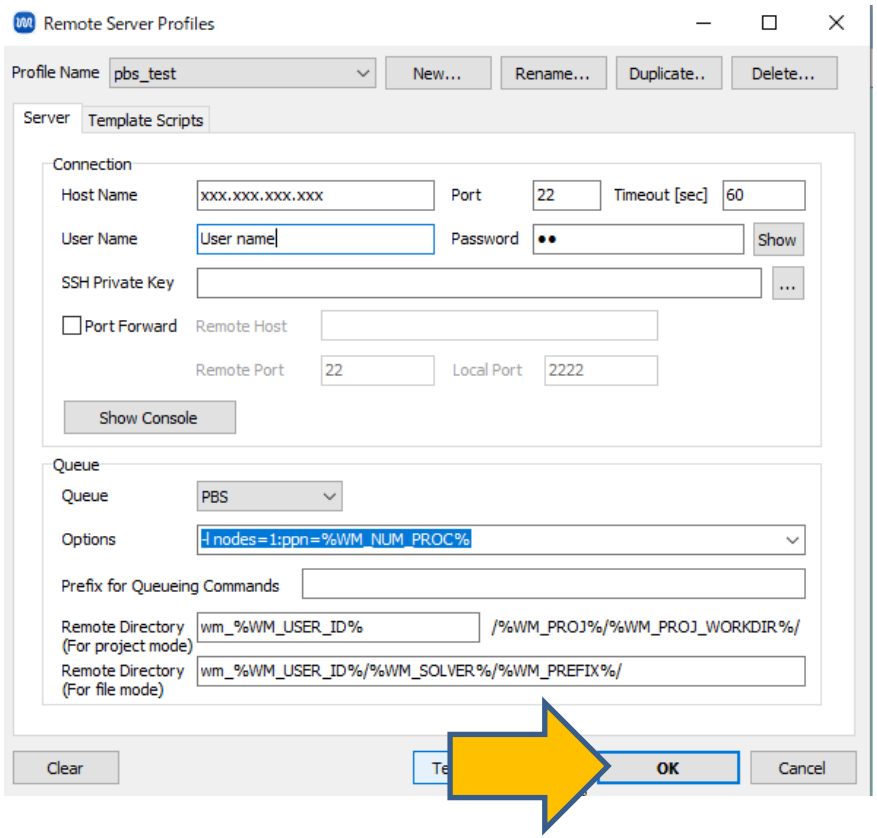


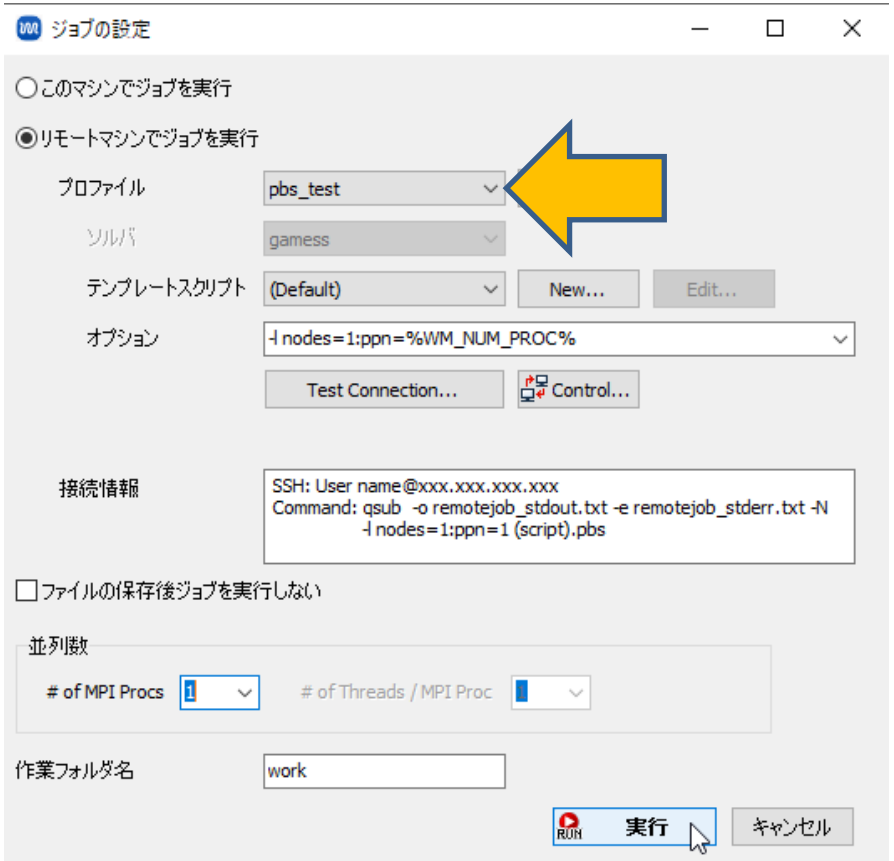


Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

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。

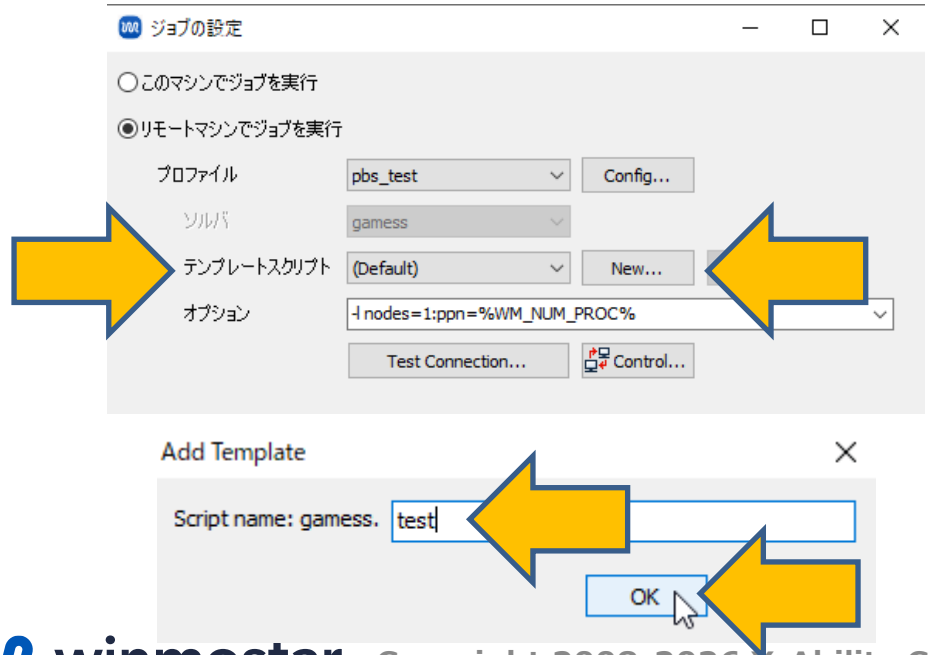


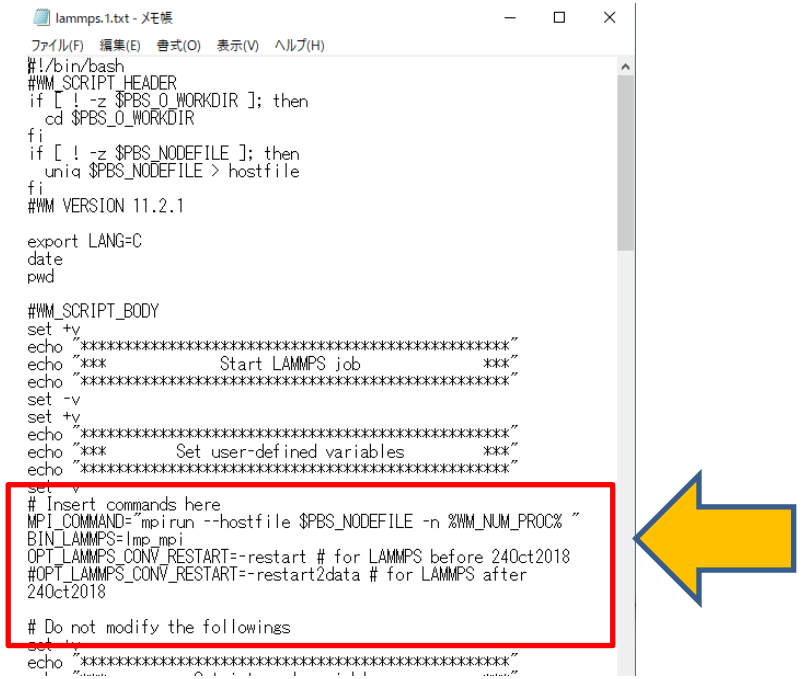


Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

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なことがあります。

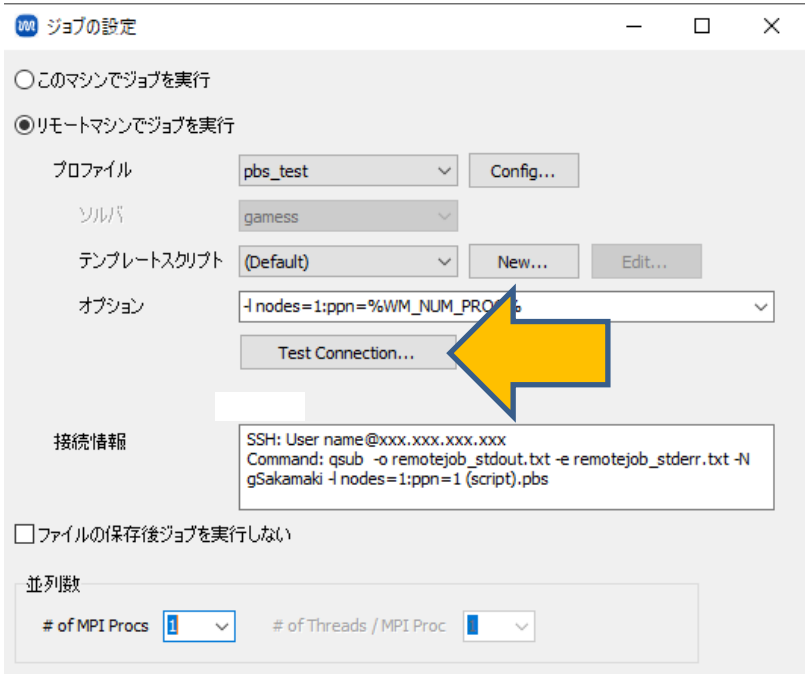


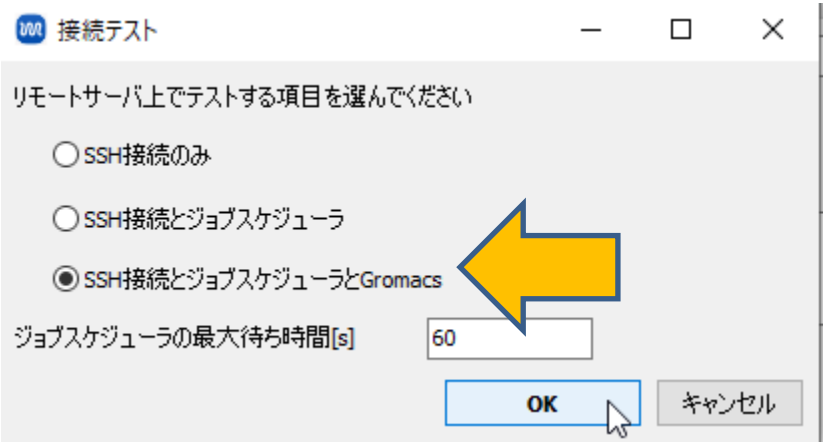


Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

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。 **Test Connection**機能の詳細は[こちら]で確認できます。

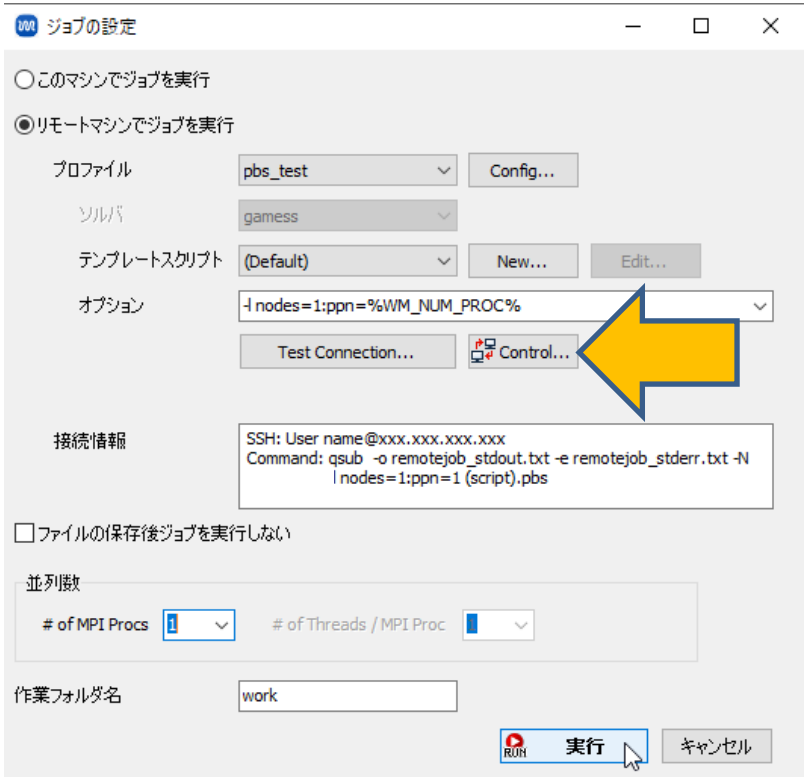


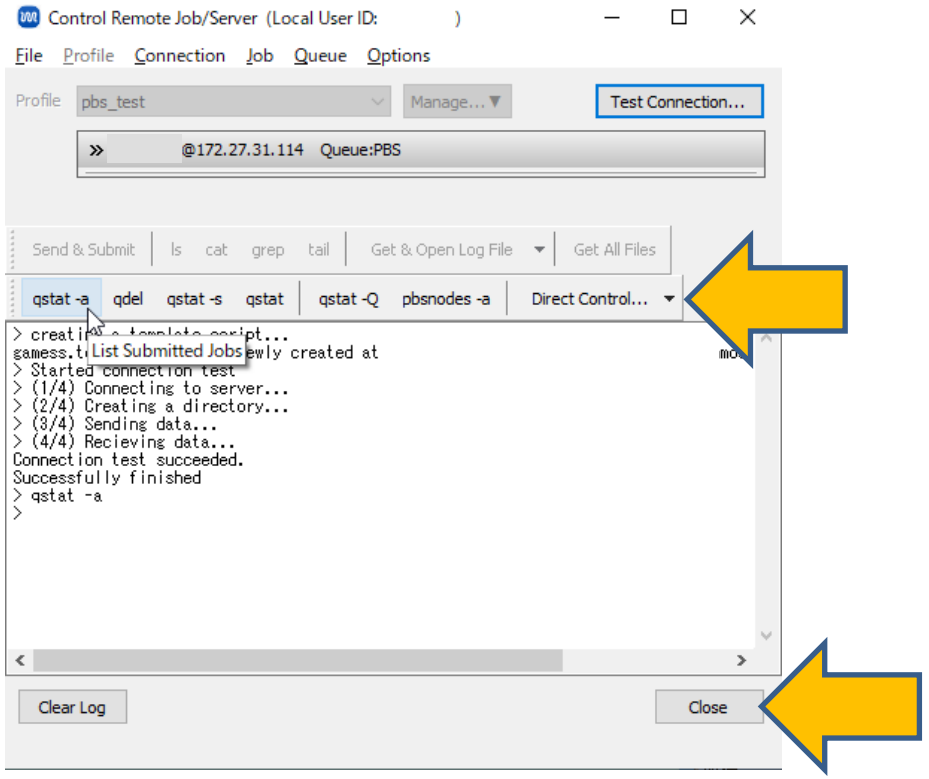


Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

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。

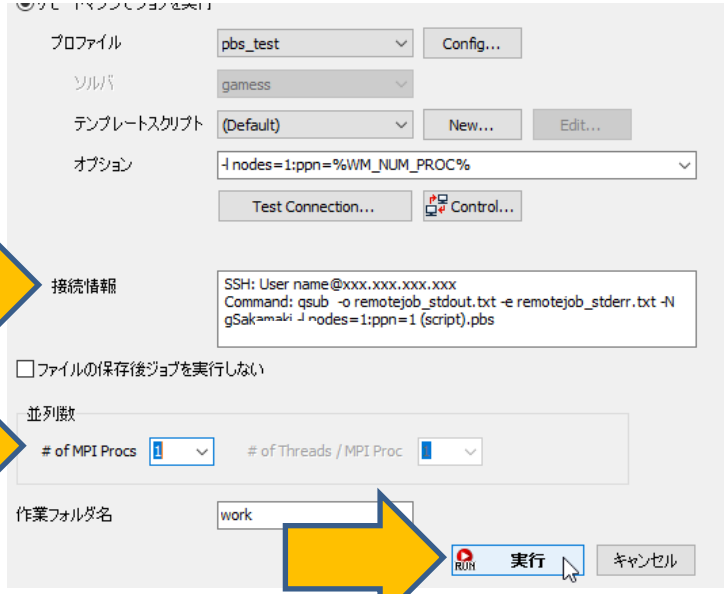


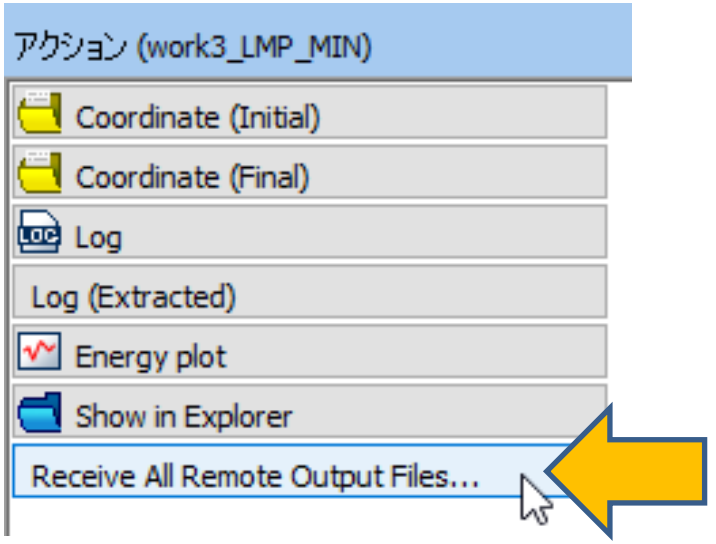


Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

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。



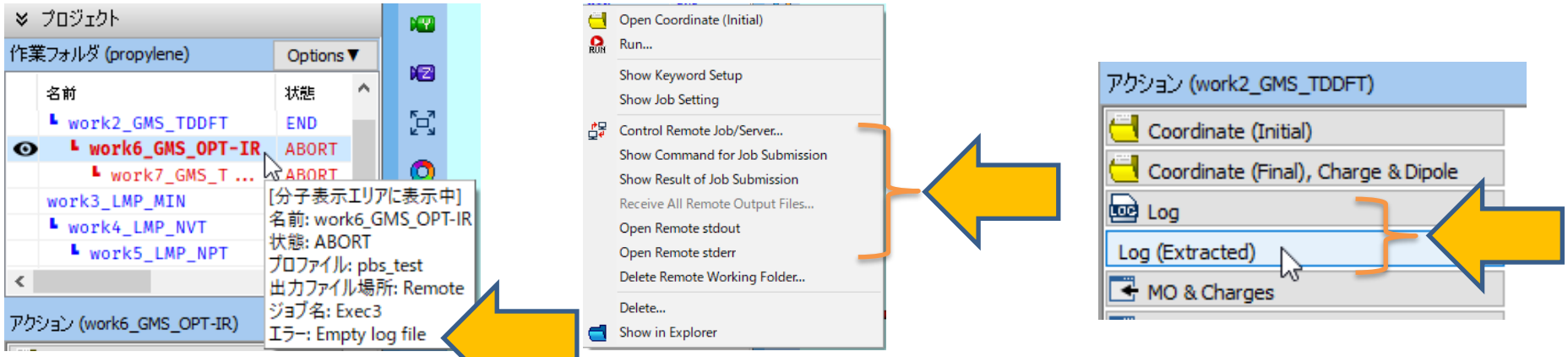


Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

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。



Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

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

Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.