

Winmostar™ チュートリアル

リモートジョブ投入

V8.025

株式会社クロスアビリティ

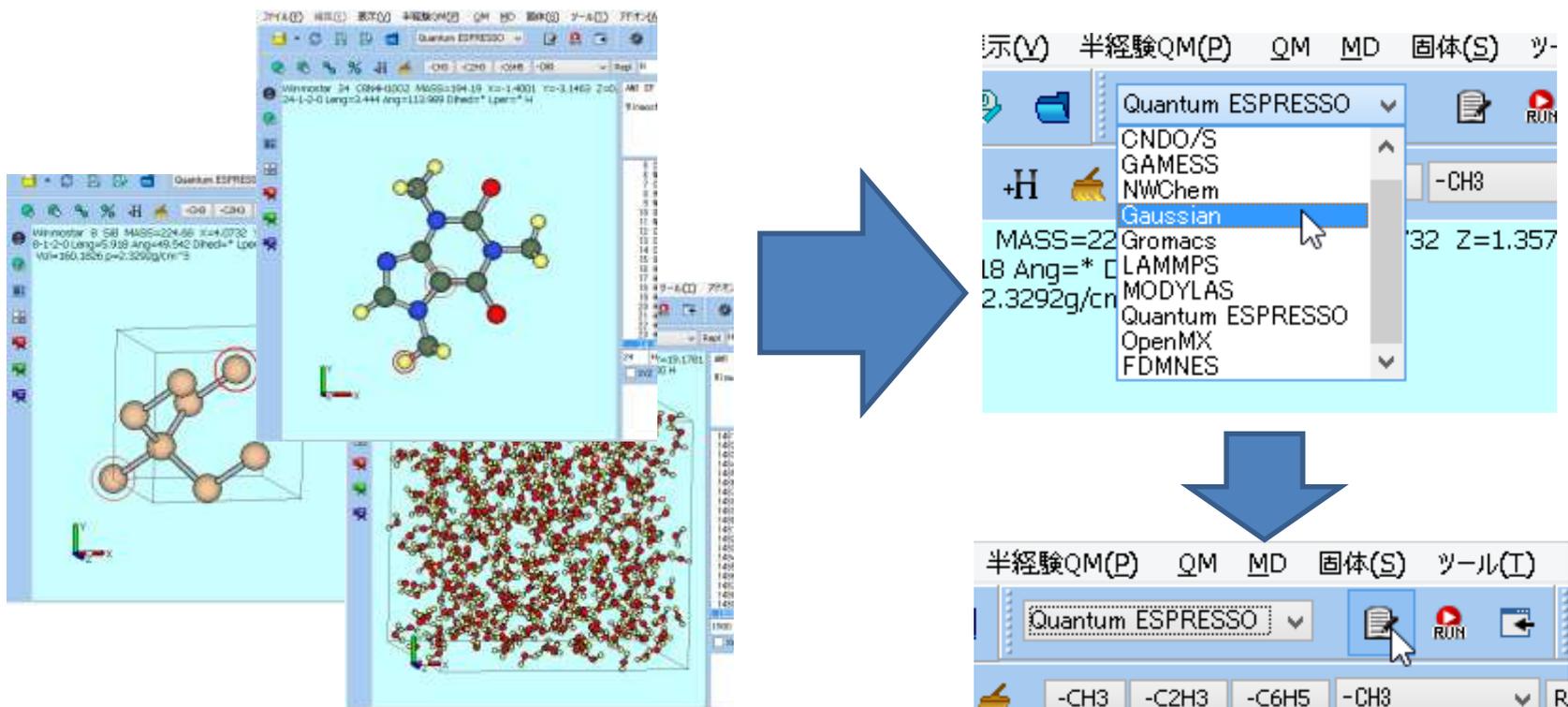
2018/07/13

概要

- リモートサーバにジョブを投入する手順を示します。
- 以下の環境・条件でのスクリーンショットを例として示しますが、他のソルバ・ジョブ管理システムの場合も同様の手順で操作できます。
ソルバー: Quantum ESPRESSO
ジョブ管理システム: PBS (TORQUE)
- それぞれのボタン・メニューの詳細な機能については、Winmostarマニュアルの「リモートジョブ投入」の項を参照してください。
https://winmostar.com/jp/manual_jp/V8/calcmanual_jp.html#jobsubmit
- サーバへの接続方法、サーバ上でソルバを動かすための設定、ジョブ管理(キューイング)システムの使用法については、サーバ管理者にお問い合わせください。
- ジョブ管理システムとソルバのセットアップ方法は、以下を参照してください。
https://winmostar.com/jp/download_jp.html#install_manual

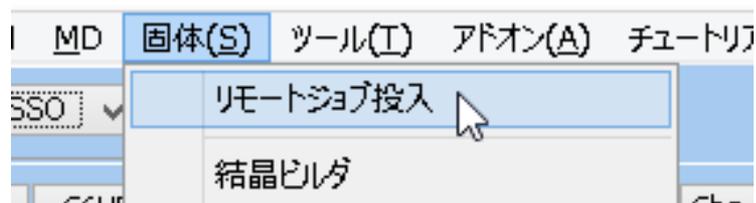
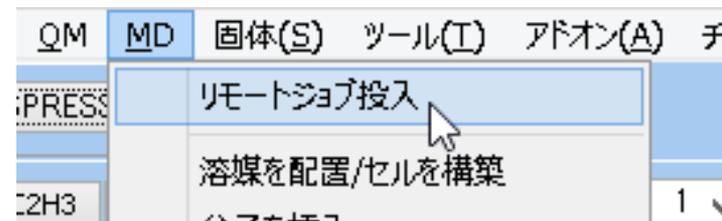
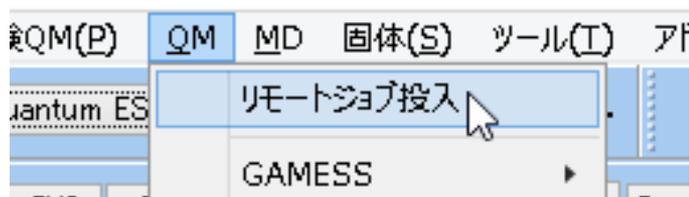
I. モデルの作成、計算条件の設定

ローカルマシンでジョブを実行する時と同様に、モデルの作成とキーワードの設定を行う。各ソルバのチュートリアルを参考に、「〇〇(ソルバ名)実行」メニューをクリックする直前までの手順を実施する。



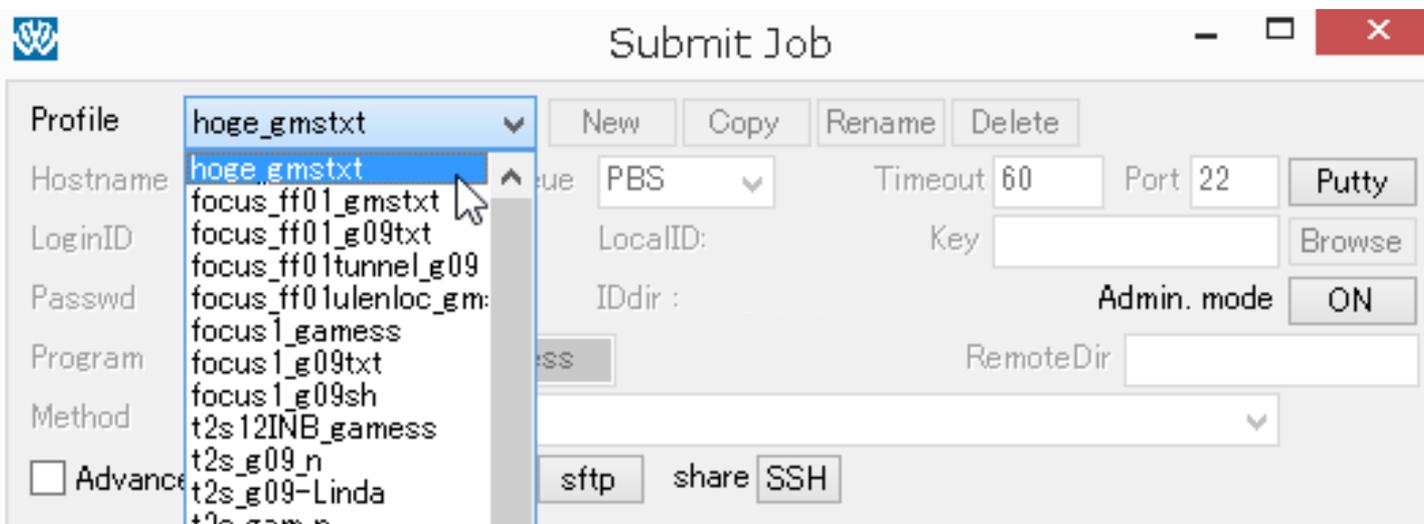
II. リモートサーバへの接続の設定

メインメニューの[QM], [MD], [固体]のいずれかのメニューから[リモートジョブ投入]をクリックする。(内部的にはどのメニューから選んでも同じ機能が作動する)



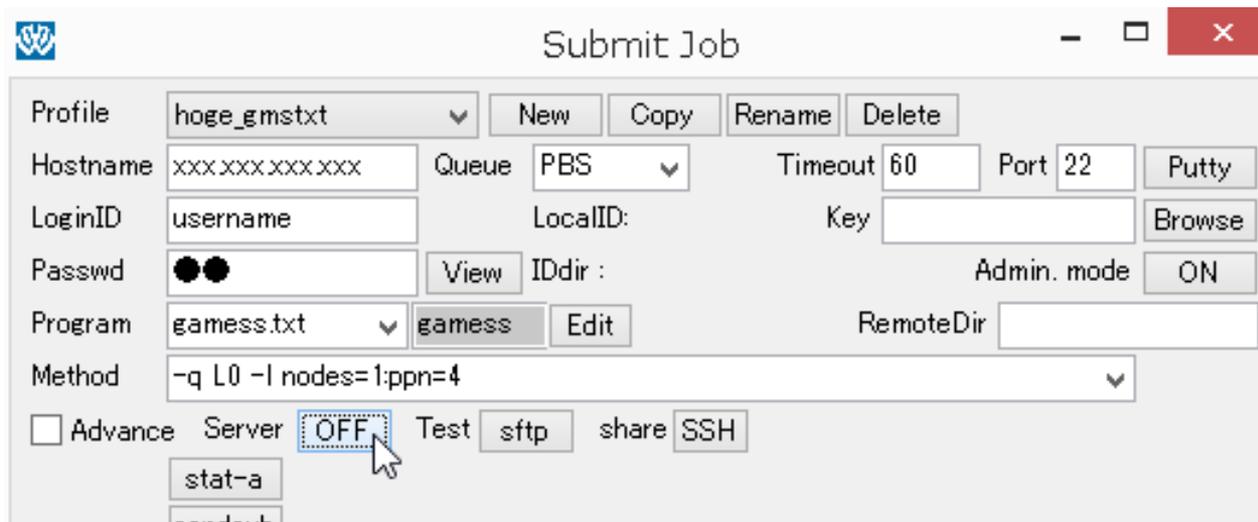
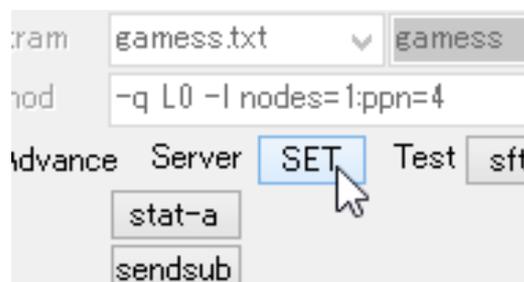
II. リモートサーバへの接続の設定

開いたSubmitJobウインドウ上部の[Profile]において、リモートサーバへの接続の設定のプロファイルを選択する。以前設定したプロファイルがある場合はそれを選択し、P.17に進む。プロファイル(接続先のサーバ、使用するソルバ)を変更または新規に作成する場合は、次の頁に進む。



II. リモートサーバへの接続の設定

Server [Set]ボタンをクリックし、サーバの設定のロックを解除する。([Set]ボタンは[OFF]ボタンに変化する。)



II. リモートサーバへの接続の設定

[Profile]欄の横の[New]ボタンを押す。(既存のプロファイルのコピーして編集したい場合は[Copy]ボタンを押す。)プロファイル名を変更したい場合は、[Rename]ボタンを押し、Profileウィンドウに新しいプロファイル名を入力して[OK]を押す。



Submit Job

Profile hoge_gmstxt New Copy Rename Delete

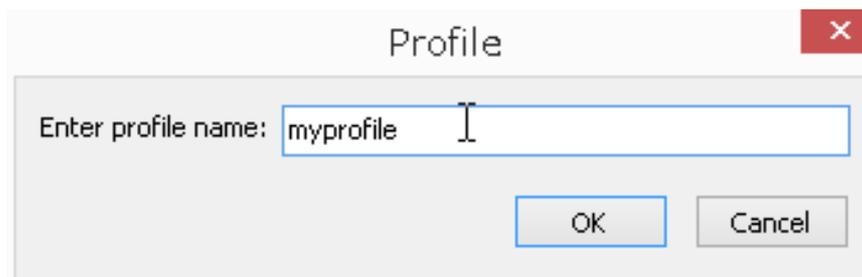
Hostname xxx xxx xxx xxx Queue PBS Timeout fill



SUBMIT JOB

Profile New New Copy Rename Delete

Hostname * Queue PBS Timeout 15



Profile

Enter profile name: myprofile

OK Cancel

II. リモートサーバへの接続の設定

使用するリモートサーバへ接続するための以下の情報を埋める。

- Hostname : ホスト名、IPアドレス
- LoginID : ユーザ名
- Passwd : パスワード
- Port : 接続するポート (SSHはデフォルトの22)

TSUBAME, FOCUSの多段SSH接続など特殊な場合の接続方法については、Winmostarユーザガイド(https://winmostar.com/jp/manual_jp.html)を参照する。

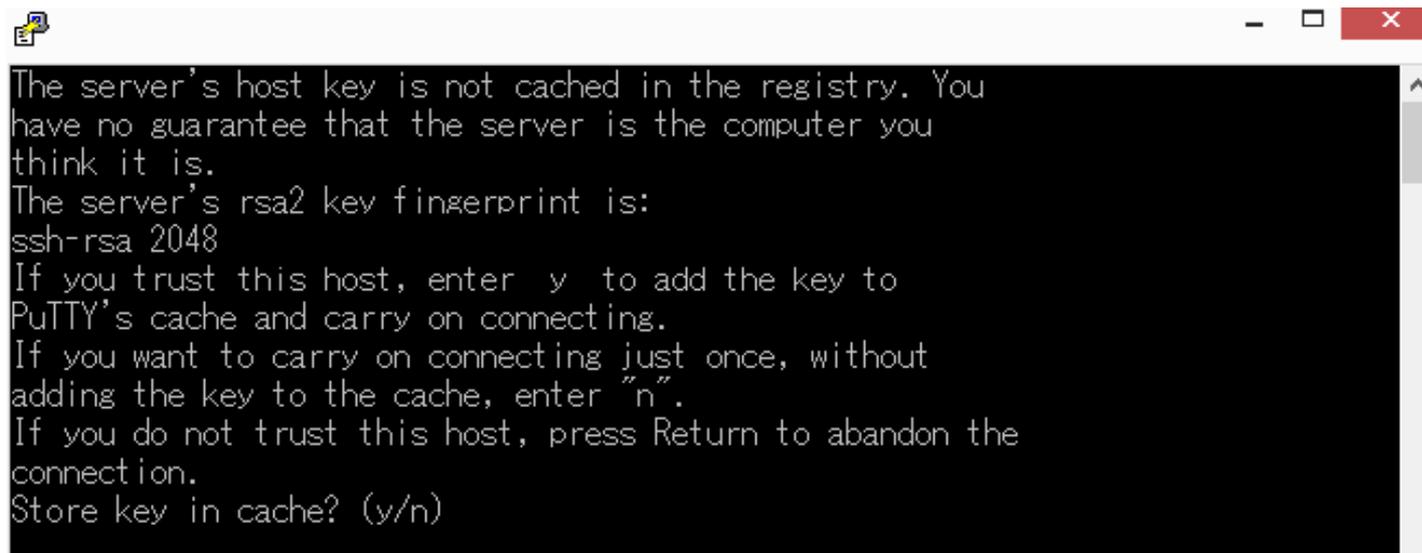
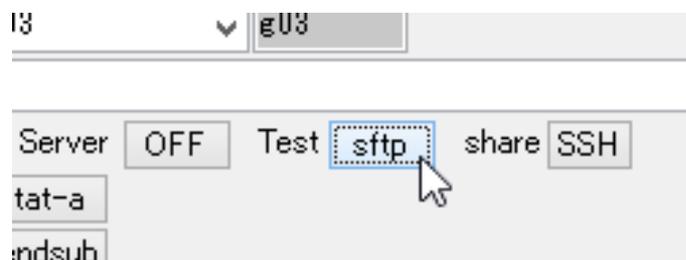


Submit Job

Profile	myprofile	New	Copy	Rename	Delete			
Hostname	192.168.0.101	Queue	PBS	Timeout	15	Port	22	Putty
LoginID	user	LocalID:	Key	Browse				
Passwd	●●●●●●●●	View	IDdir :	Admin. mode	ON			

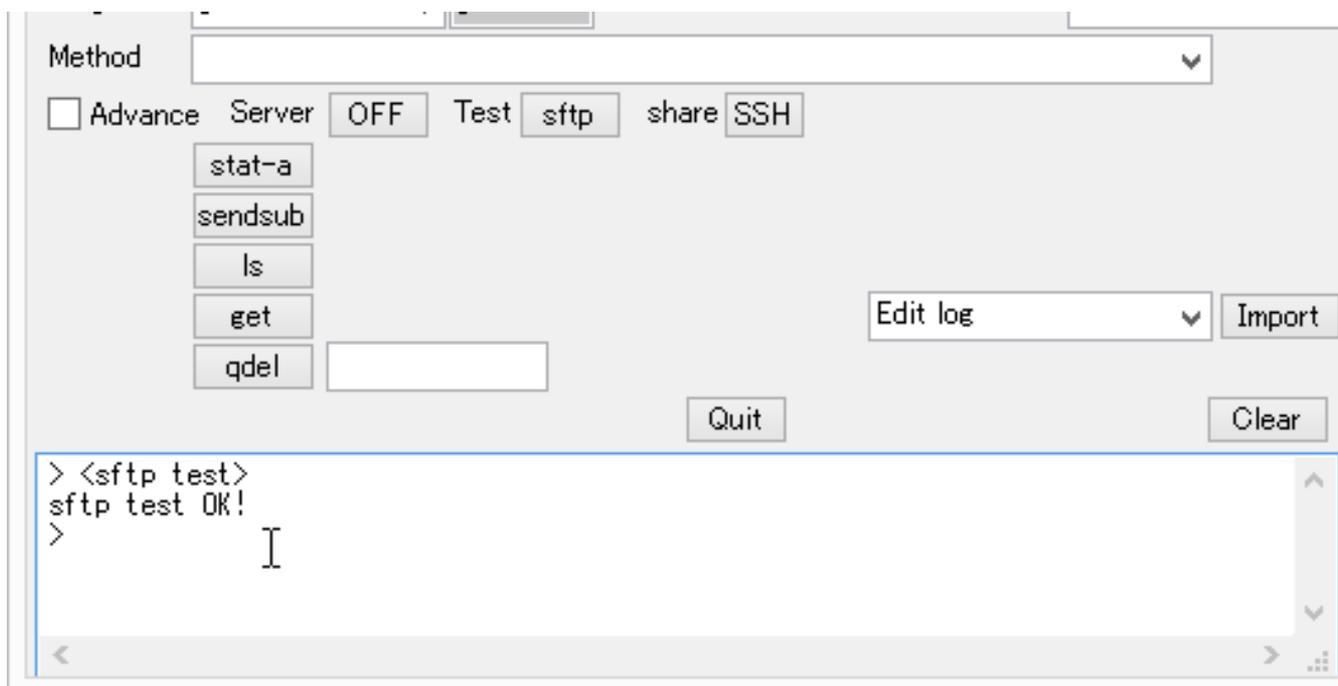
II. リモートサーバへの接続の設定

リモートサーバへ接続するための情報を埋めた後、接続テストとしてTest [sftp]ボタンを押す。初回接続時には下図のように「Store key in cache? (y/n)」と尋ねられるので、「y」と入力しEnterキーを押す。



II. リモートサーバへの接続の設定

接続テストに成功したら、SubmitJobウインドウ下部に「sftp test OK!」と表示される。「sftp connection error or time out」などと表示された場合は、「sftp test OK!」と表示されるようになるまで、P.8の設定に戻る。



III. ジョブ管理システムの設定

使用するリモートサーバ上で使うジョブ管理(キューイング)システムの設定を埋める。

- Queue : ジョブ管理システムの種類
- Method : シェル上で入力する際のジョブ投入コマンドの引数
(例えばPBSの場合はqsubコマンドの後ろに続くオプション)

以下のエイリアス文字列は使用するソルバのキーワード設定ウィンドウで指定した値として入力する。

- %WM_NUM_PROC% : MPI並列数(設定がない場合は1)
- %WM_NUM_THREAD% : OpenMP並列数(設定がない場合は1)
- %WM_NUM_PARALLEL% : MPI並列数とOpenMP並列数の積
- \$0 : 入力ファイル名
- \$1 : 入力ファイル名から拡張子を除いた文字列

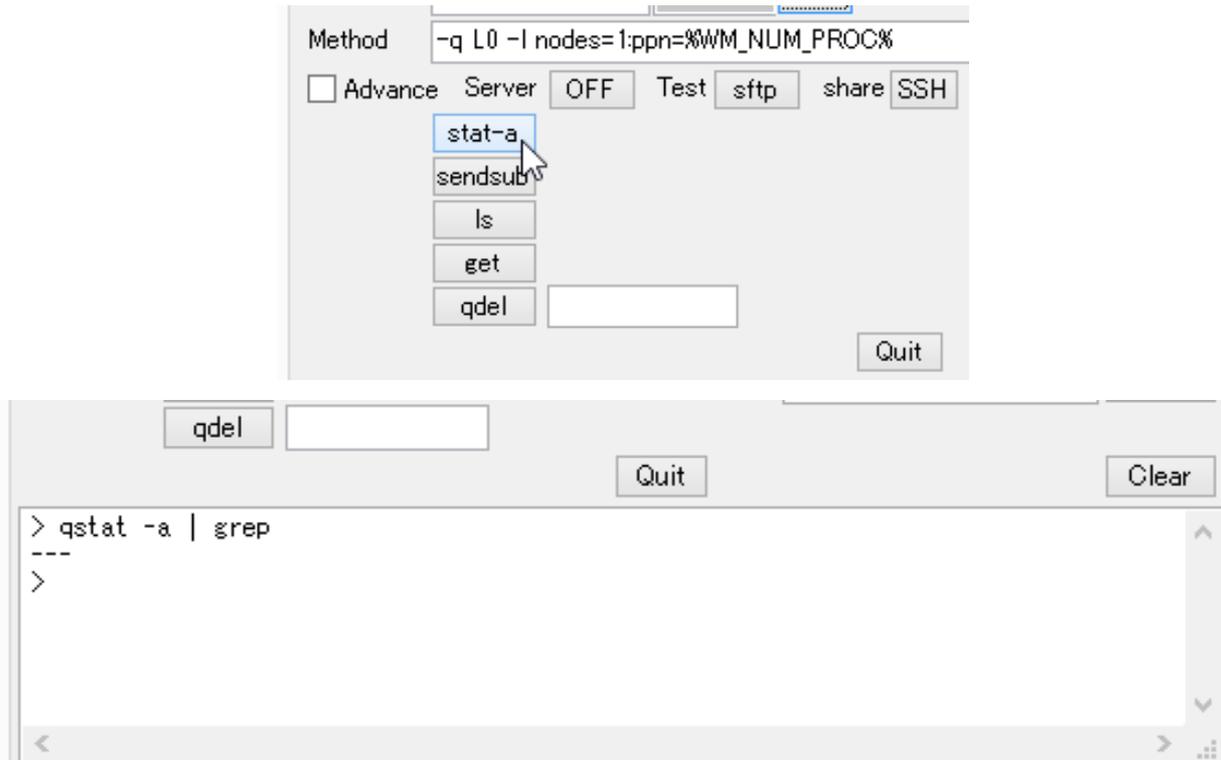
The screenshot shows a job submission form with the following fields and values:

- Hostname: 192.168.0.101
- Queue: PBS
- LoginID: user
- LocalID: (empty)
- Passwd: (masked with dots)
- View: (button)
- IDdir: (empty)
- Program: g03
- Method: -q L0 -l nodes=1:ppn=%WM_NUM_PROC%

At the bottom, there are checkboxes for "Advance", "Server", "OFF", "Test", "often", "share", and "SSH".

III. ジョブ管理システムの設定

下図の[stat-a]の場所にあるボタン(Queueの種類によって名前が変化する)をクリックすると、現在ジョブ管理システムに登録されている自分のジョブが表示される。ここでSubmitJobウインドウ下部が下図の様にならず、「command not found」などと表示される場合は選択したQueueが適切でない可能性がある。

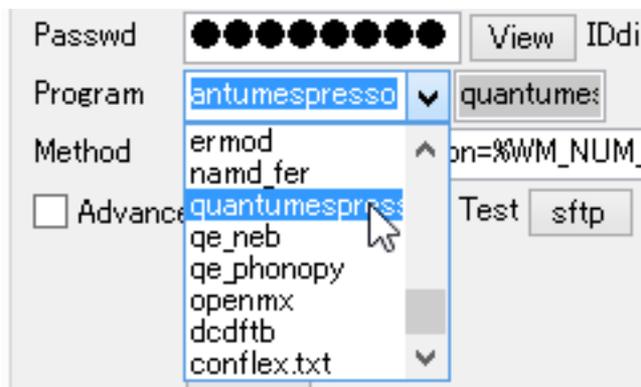


IV. 使用するソルバの設定

[Program]欄において使用するソルバを選択する。

デフォルトで生成されるシェルスクリプトを使用してジョブを投入する場合は、P.17に進む。

シェルスクリプトをカスタマイズして投入場合は、次の頁に進む。



IV. 使用するソルバの設定

シェルスクリプトをカスタマイズする場合は、[Program]欄に表示されているプログラム名の末尾に、「.txt」から始まる文字列を付加する。例えば、プログラム名が「quantumespresso」の場合は「quantumespresso.txt000」とする。

この文字列は、Winmostarのインストールフォルダの下のUserPrefフォルダに置かれる、ひな形スクリプトのファイル名となる。

UserPref以下に存在するひな形スクリプトを使う場合は、その名前を[Program]欄に記入する。

UserPref以下に存在しないファイル名を[Program]欄に記入した場合は、次の頁の操作でその名前のファイルを生成する。

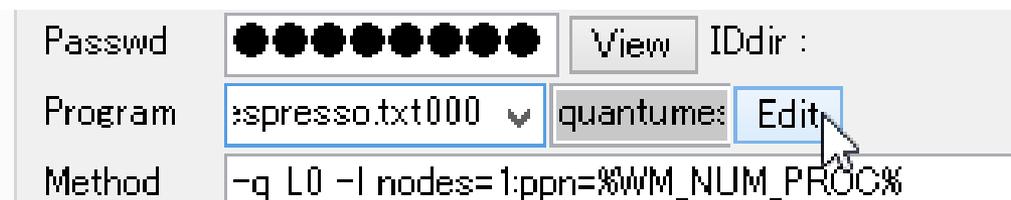
Passwd	●●●●●●●●	View	IDDIR : sa
Program	espresso.txt000	quantumes	Edit
Method	-n 0 -l nodes=1:nnn=%WM NIIM PROC9		

PC > Windows (C:) > winmos8 > UserPref

名前	種類
atoms1.wmx	WMX ファイル
init.dat	DAT ファイル
kpath_default.txt	テキストドキュメント
qe_pseudo_priority_list.txt	テキストドキュメント
quantumespresso.txt000	TXT000 ファイル
winmos_0.lic	License
winmos_server.ini	INI ファイル
wmset.ini	INI ファイル

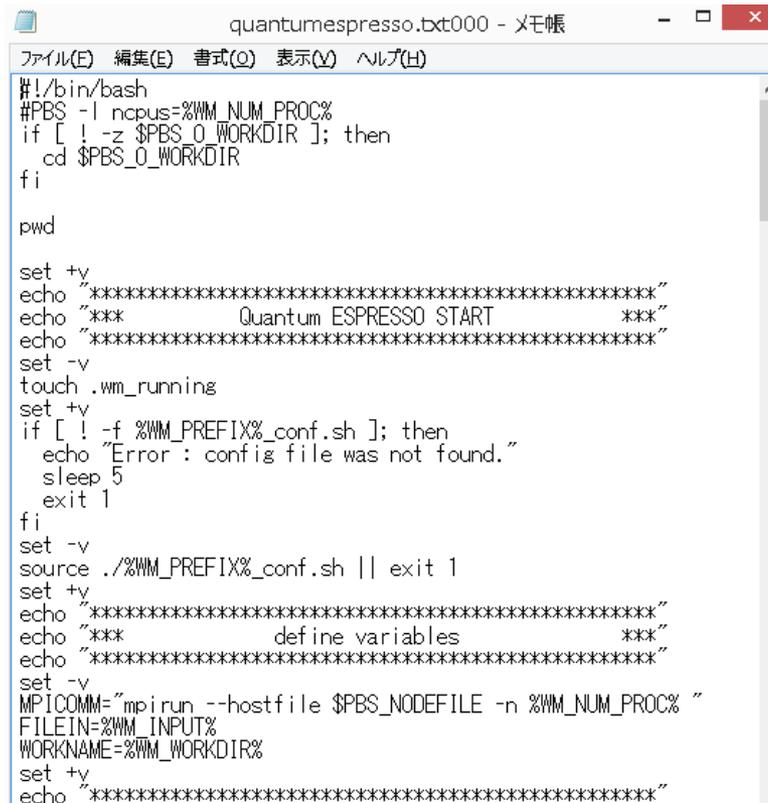
IV. 使用するソルバの設定

([Program]欄に「*.txt*」と入力された状態で)[Program]欄の右側に出現した[Edit]ボタンを押すと、[Program]欄と同名のひな形スクリプトが開く。同名のひな形スクリプトが存在しない場合は、「新たに生成しますか?」と聞かれるので、[はい]ボタンを押すとひな形スクリプトがUserPref以下に生成され開かれる。



IV. 使用するソルバの設定

ひな形スクリプトには、使用するソルバのPATH, LD_LIBRARY_PATHなどの設定、mpirun (mpiexec)コマンドの設定、moduleコマンドなどを追加する。[Method]欄と同様に、「%WM_NUM_PROC%」、「\$1」などのエイリアス文字列を、ひな形スクリプトの中で使用することができる。



```

quantumespresso.txt000 - ヌモ帳
ファイル(E) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
#!/bin/bash
#PBS -l ncpus=%WM_NUM_PROC%
if [ ! -z $PBS_O_WORKDIR ]; then
  cd $PBS_O_WORKDIR
fi

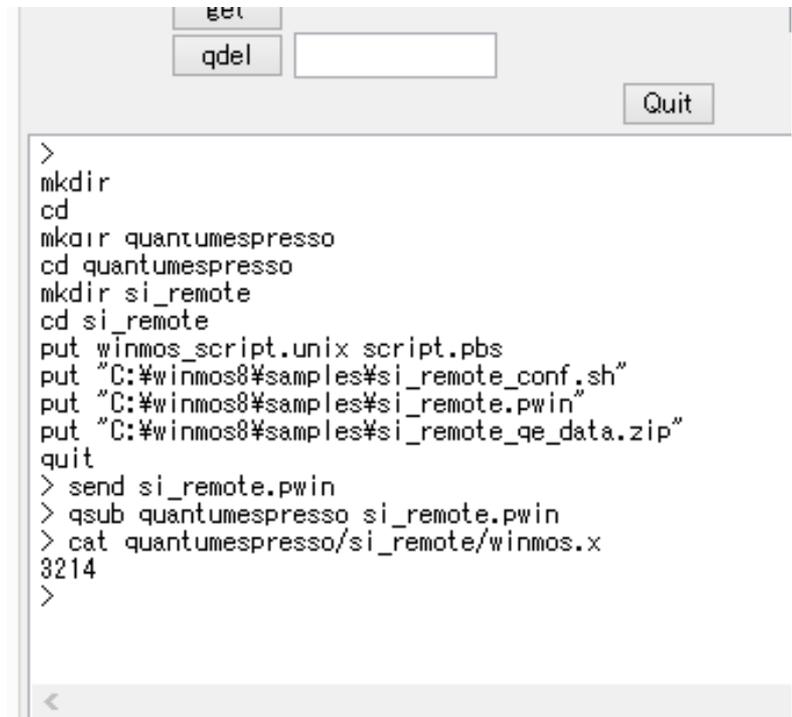
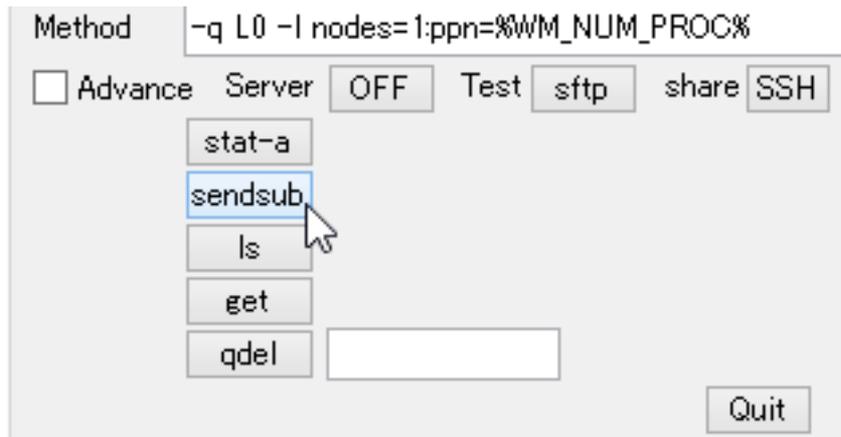
pwd

set +v
echo "*****"
echo "***          Quantum ESPRESSO START          ***"
echo "*****"
set -v
touch .wm_running
set +v
if [ ! -f %WM_PREFIX%_conf.sh ]; then
  echo "Error : config file was not found."
  sleep 5
  exit 1
fi
set -v
source ./%WM_PREFIX%_conf.sh || exit 1
set +v
echo "*****"
echo "***          define variables          ***"
echo "*****"
set -v
MPICOMM="mpirun --hostfile $PBS_NODEFILE -n %WM_NUM_PROC% "
FILEIN=%WM_INPUT%
WORKNAME=%WM_WORKDIR%
set +v
echo "*****"

```

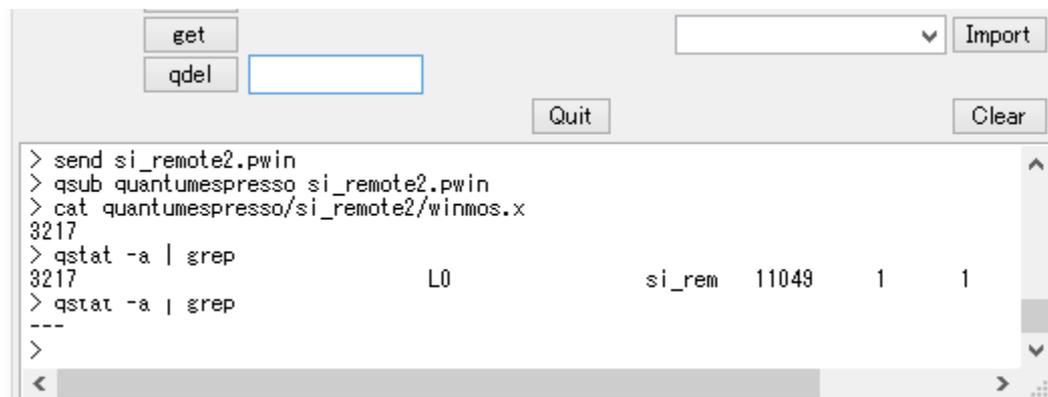
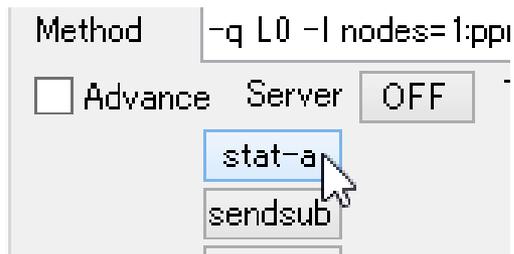
V. ジョブの開始

下図の[sendsub]の場所にあるボタン(Queueの種類によって名前が変化する)をクリックすると、入力ファイルを保存するために[保存]ダイアログが開く。ファイル名を入力して保存すると、続けて入力ファイルのリモートサーバへの転送とジョブの投入が始まる。処理が正常に終了すると、SubmitJobウィンドウ下部に、投入されたジョブのIDが表示される。



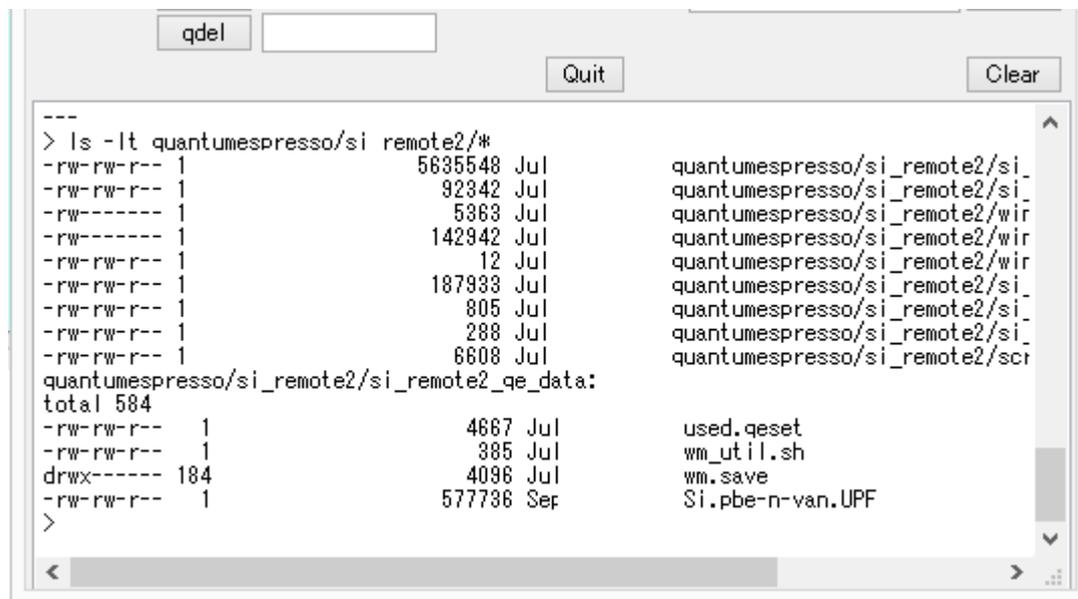
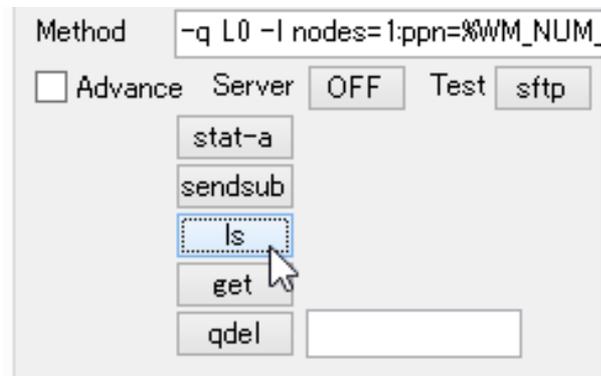
VI. ジョブ実行中の確認

[sendsub]直後に下図の[stat-a]の位置にあるボタンを押すと、SubmitJobウインドウ下部に、ジョブ管理システムに登録されているジョブ一覧が表示される。全てのジョブが完了した場合には「---」と表示される。(ジョブの終了があまりに早い場合、[sendsub]直後であってもそのように表示されることがある)



VI. ジョブ実行中の確認

下図の[ls]の場所にあるボタン(Queueの種類によって名前が変化する)をクリックすると、SubmitJobウィンドウ下部に、メインウィンドウで開かれているファイルに関するリモートサーバ上のフォルダの中身が表示(ls)される。これによりジョブの状況を類推することができる。



VII. 完了後のジョブのファイルの取得

リモートサーバ上で完了したジョブのファイルをローカルマシンに取得する場合は、まずメインウィンドウ上で、取得したいジョブの入力ファイルを開く。
ジョブ開始後に他のファイルを開いていない場合はこの操作は不要である。

The screenshot displays the Quantum ESPRESSO graphical user interface. The main window shows a 3D visualization of a silicon crystal structure with two atoms highlighted by red circles. The control panel on the right contains the following configuration:

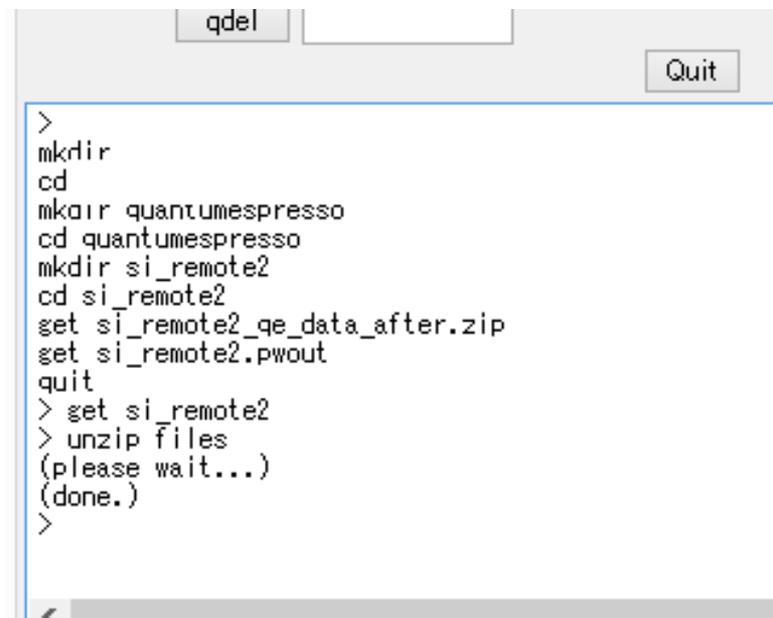
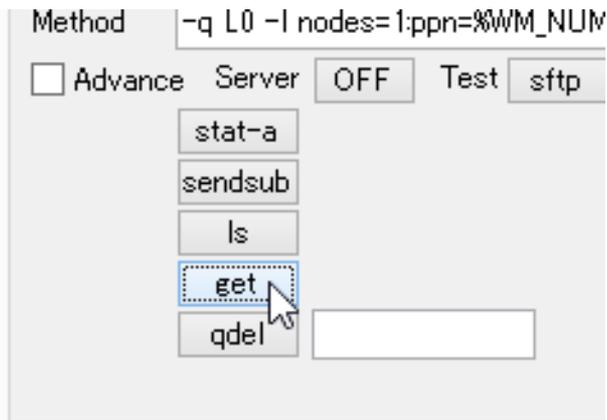
```
&control
prefix      = 'wm'
outdir      = 'si_remote2_qe_data'
verbosity   = 'high'
calculation = 'scf'
restart_mode = 'from_scratch'
wf_collect  = .True.
```

1	Si	0.00000	1	0.0000	1	0.0000	1	0	0	0
2	Si	7.05495	1	0.0000	1	0.0000	1	1	0	0

```
2 Si 7.054946 0 0 1 0 0
XYZ 1 1 1
K_POINTS {automatic}
12 12 12 1 1 1
```

VII. 完了後のジョブのファイルの取得

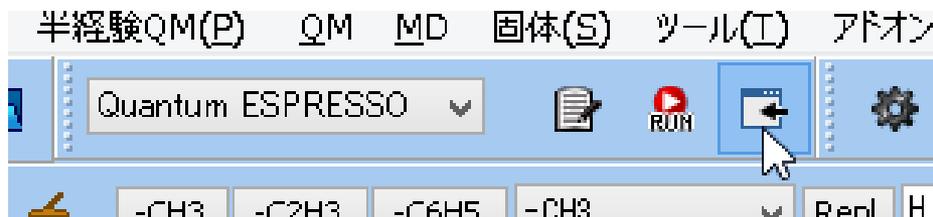
次に、下図の[get]の場所にあるボタン(Queueの種類によって名前が変化する)をクリックすると、リモートサーバから転送が開始される。
ソルバによっては、転送終了後ログファイルが開かれる。SubmitJobウインドウ下部に表示されるメッセージもソルバの種類によって異なる。
ファイルの転送に失敗する場合は、サーバの設定あるいはメインウインドウで開かれているファイルが不適切な場合と、サーバ上でジョブが完了していないか、何らかの不正終了となった場合がありうる。



```
qdel [ ] [Quit]
>
mkdir
cd
mkdir quantumespresso
cd quantumespresso
mkdir si_remote2
cd si_remote2
get si_remote2_qe_data_after.zip
get si_remote2.pwout
quit
> get si_remote2
> unzip files
(please wait...)
(done.)
>
```

VII. 完了後のジョブのファイルの取得

完了したジョブのファイルを[get]でローカルマシンに取得した後は、ローカルマシンで計算を実行した時と同様に、結果の解析、可視化を行うことができる。



facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30 · 公開

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_au_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38 · 公開

👍 いいね!