

FOCUS スパコン向け Winmostar インストールマニュアル

2021 年 8 月 18 日

本書は、Winmostar を使用して公益財団法人計算科学振興財団（通称 FOCUS）のスパコン上で計算を実行したい方および、FOCUS 主催の LAMMPS 講習会、Quantum ESPRESSO & OpenMX 利用講習会（年度により名称が異なる場合があります）にオンラインで参加される方向けの、Winmostar および LAMMPS、Quantum ESPRESSO 等のソルバのインストール手順を示すものです。

【注意】 PC および LAN のセキュリティ設定の変更が必要な場合はインストール作業全体に数日掛かる場合があるため、FOCUS 主催講習会の準備をされる方は余裕をもって本書の手順を実行してください。

本書の手順で想定通りに行かない場合は、FOCUS への接続については FOCUS ご担当者へ直接連絡、Winmostar およびソルバのインストールについては[よくある質問](#)を確認してください。

1. PC の準備

Winmostar のネイティブ動作は Windows OS のみサポートしているため、Windows PC を準備してください。推奨スペック、対応 OS 等は [Winmostar の動作環境](#) で確認してください。

2. FOCUS への接続環境の準備

FOCUS スパコンへの接続には VPN クライアント（Cisco AnyConnect Secure Mobility Client など）が必要です。FOCUS より案内された手順に従って VPN クライアント、Tera Term、WinSCP をインストールしてください。

FOCUS 主催講習会に参加される方は、FOCUS から受講者用アカウントが発行された後（概ね開催 1 週間前）にこの準備を行うことができます。

参考までに、過去の講習会の準備手順は[こちら](#)でご確認できます。

3. Winmostar およびソルバのインストール

[インストール方法](#)に記載の手順で Winmostar およびソルバをインストールしてください。

- 手順 10 は不要です。FOCUS にインストール済みのソルバを使う場合は手順 11 も不要です。
- **FOCUS 主催講習会を受講される方**で、V10 以降の Winmostar プロフェッショナル版をお持ちでない方は、1 か月間使用可能な無料トライアルをご利用頂けます。すでに他の目的で無料トライアルを登録し期限切れとなった方は[お問い合わせフォーム](#)からその旨をお知らせください。
- **FOCUS 主催の LAMMPS 講習会を受講される方**は、Winmostar 本体だけでなく、手順 6 の CygwinWM、手順 7 の LAMMPS も必ずインストールしてください。手順 10、11 は不要です。
- **FOCUS 主催の Quantum ESPRESSO & OpenMX 講習会を受講される方**は、Winmostar 本体だけでなく、手順 6 の CygwinWM（OpenMX を含む）、手順 7 の Quantum ESPRESSO も必ずインストールしてください。手順 10、11 は不要です。
- FOCUS スパコンシステムの更新に合わせるため、過去にインストールした Winmostar および

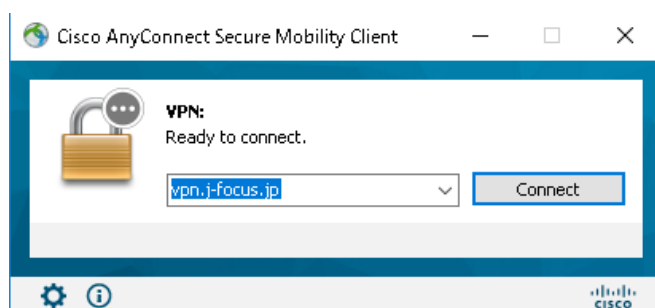
CygwinWM をご利用中の方は、[Winmostar の安定版最新バージョン](#)と [CygwinWM の最新バージョン](#)にアップデートしてください。アップデート方法は[こちら](#)です。Winmostar の FOCUS スパコンへの対応状況は[更新履歴](#)から確認できます。

FOCUS 主催の LAMMPS 講習会基礎編または Quantum ESPRESSO & OpenMX 講習会を受講される方は、以降の操作が不要です。LAMMPS 講習会応用編を受講される方は以下の操作を実行してください。

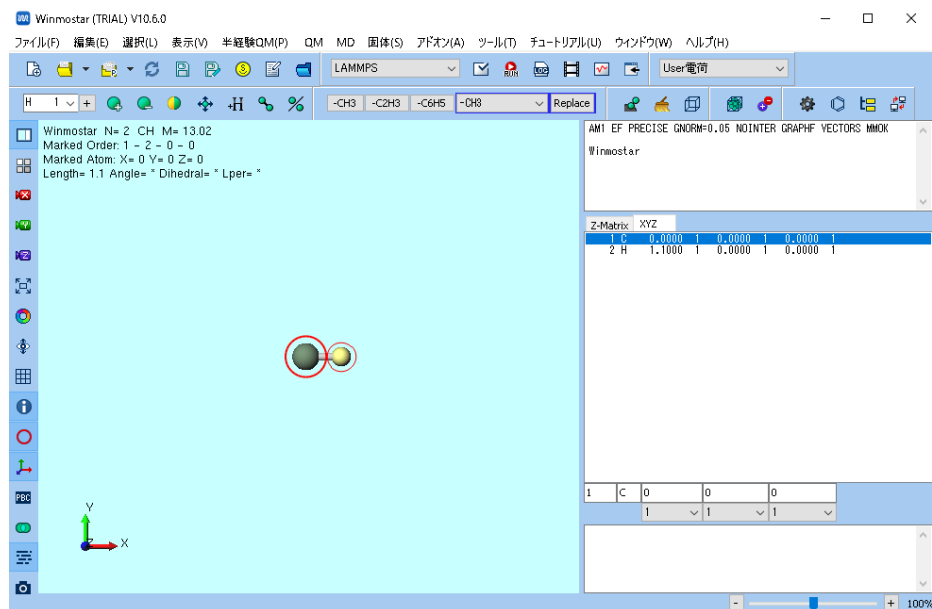
4. 動作確認 (LAMMPS の場合)

ここでは VPN 接続の場合の方法のみ示します。

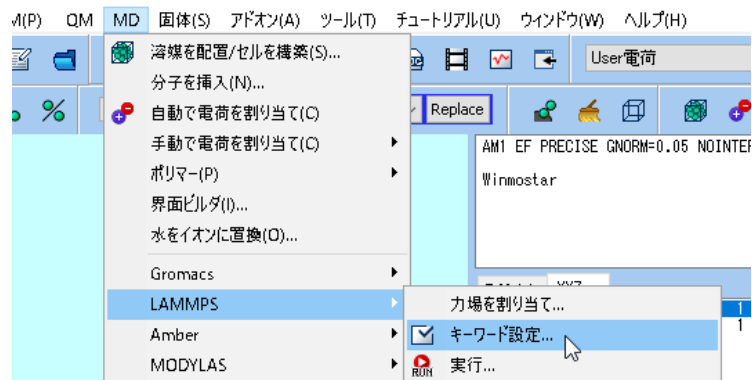
1. FOCUS から案内のあった方法に従い、Cisco AnyConnect Secure Mobility Client で FOCUS に接続してください。下図は本書作成時点での参考画面です。



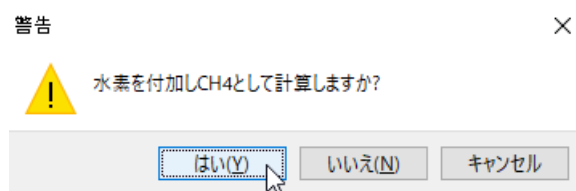
2. Winmostar を起動してください。



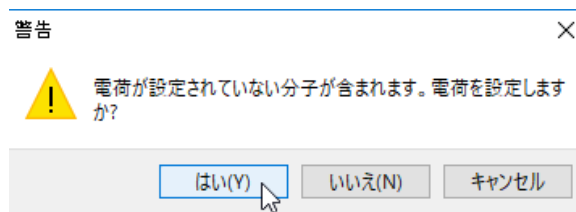
3. Winmostar メインウィンドウで **MD | LAMMPS | キーワード設定**をクリックしてください。



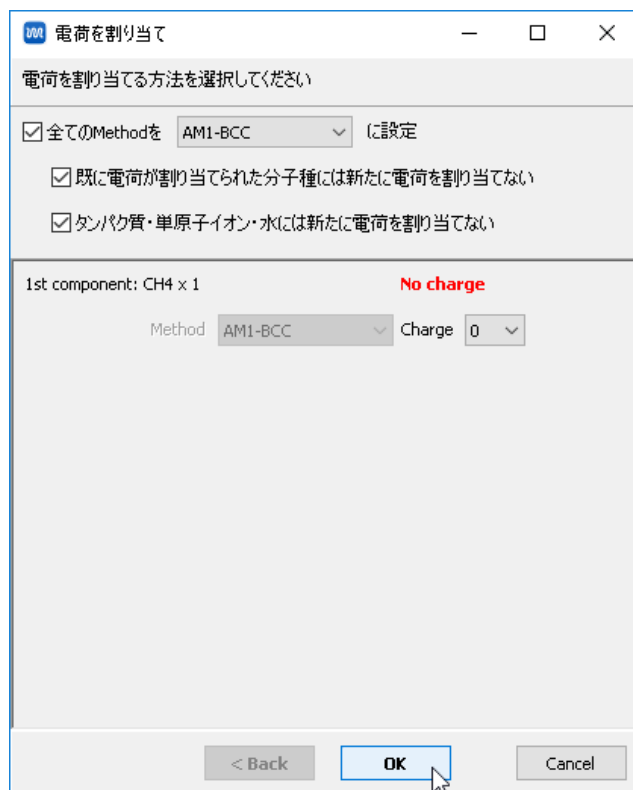
4. 次のダイアログでは**はい**をクリックしてください。



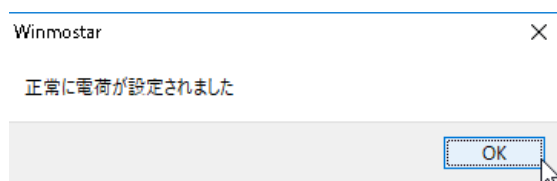
5. 次のダイアログでは**はい**をクリックしてください。



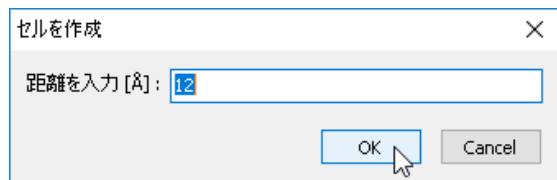
6. 次のウィンドウで **OK** をクリックしてください。



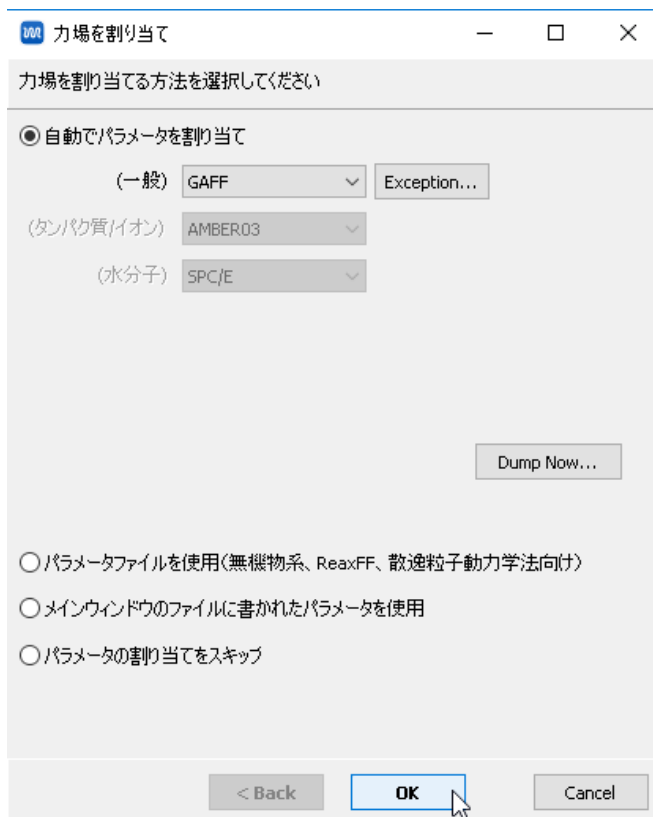
7. 黒いコンソールウィンドウが出現し数秒処理が流れた後、次のダイアログで **OK** をクリックしてください。



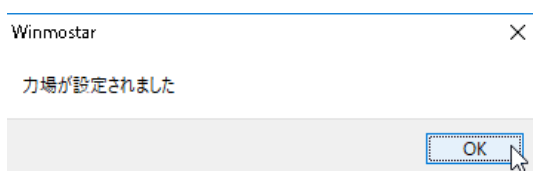
8. 次のダイアログで **OK** をクリックしてください。



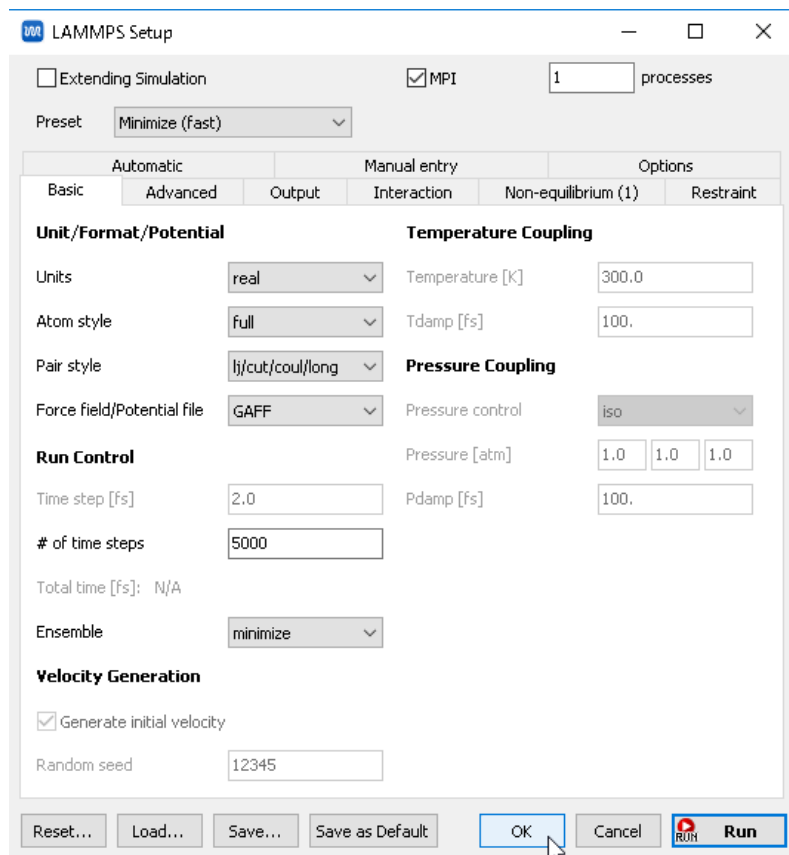
9. 次のウィンドウで **OK** をクリックしてください。



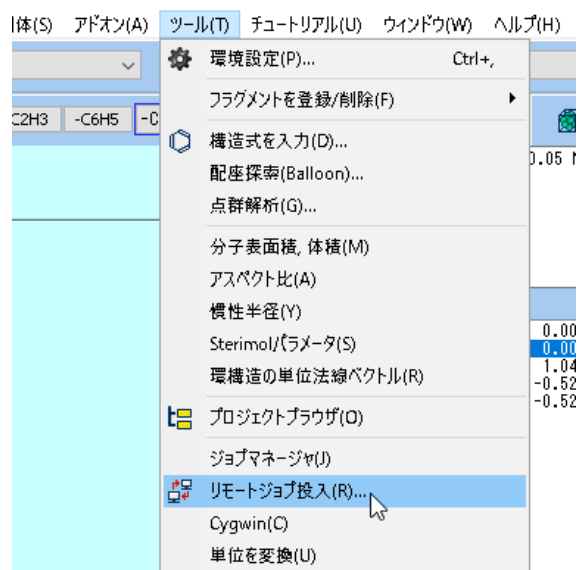
10. 黒いコンソールウィンドウが出現し数秒処理が流れた後、次のダイアログで **OK** をクリックしてください。



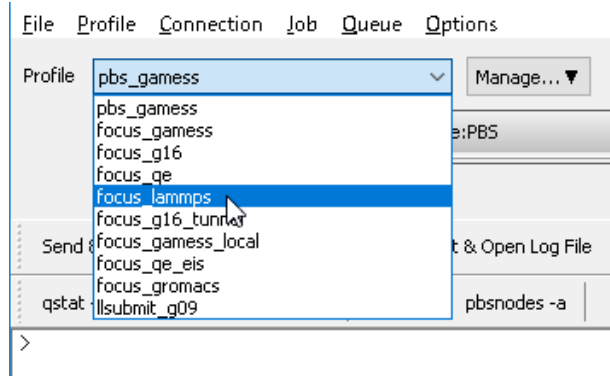
11. 次のウィンドウで **OK** (**Run** ではない) をクリックしてください。



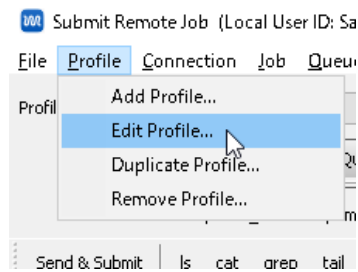
12. Winmostar メインウィンドウでツール | リモートジョブ投入をクリックしてください。



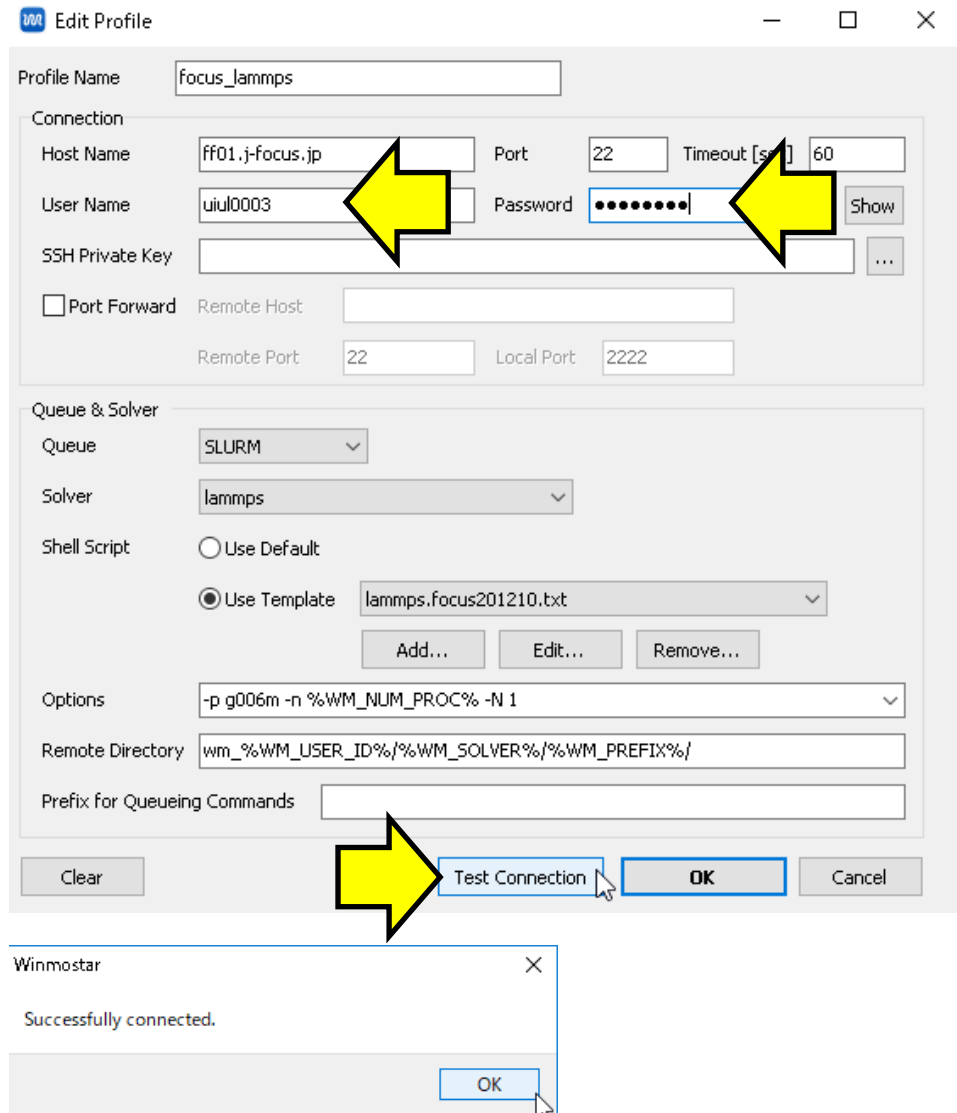
13. **Submit Remote Job** ウィンドウの **Profile** で「focus_lammps」を選択してください。



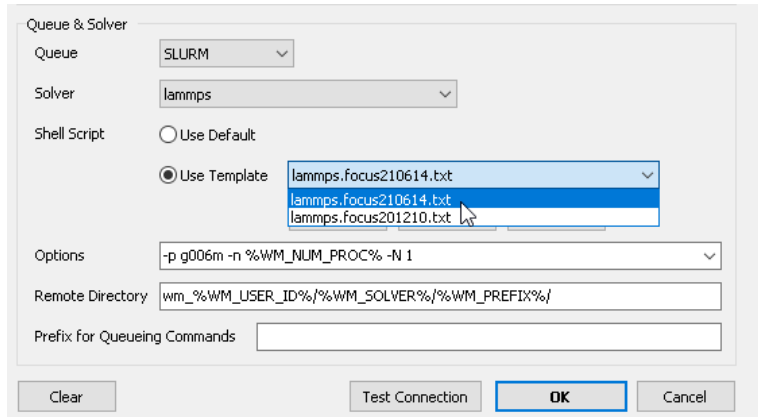
14. **Submit Remote Job** ウィンドウで **Profile | Edit Profile** をクリックしてください。



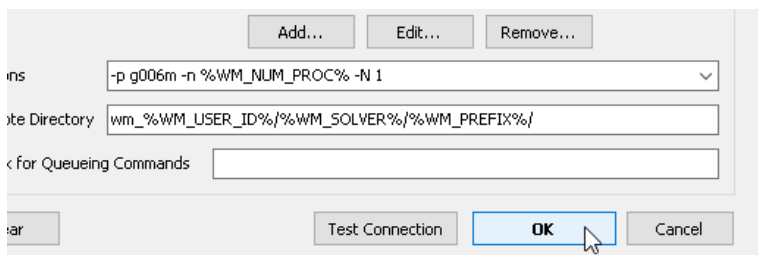
15. **Edit Profile** ウィンドウで **User Name** と **Password** に FOCUS から配布されたアカウントを入力してください（必ず半角英数字で）。その後、ウィンドウ下部の **Test Connection** ボタンをクリックし、「Successfully connected.」というダイアログが表示されたら正常に接続設定ができたこととなります。「Successfully connected.」が表示されなかったら **User Name** と **Password** を注意深く再入力してください。



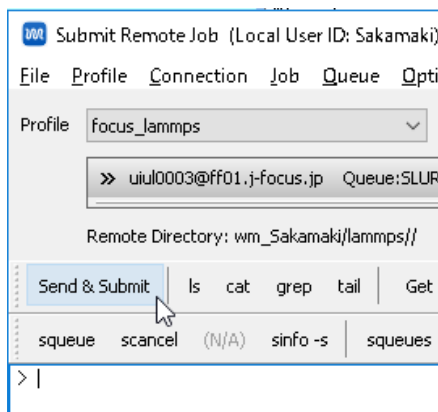
16. **Edit Profile** ウィンドウの **Queue&Solver** の **Shell Script** で「lammps.focus210614.txt」を選択してください。



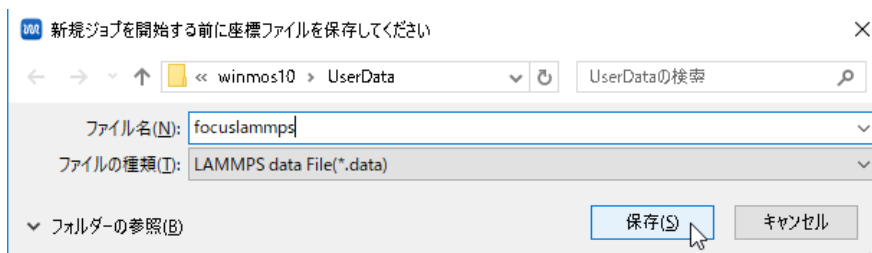
17. **Edit Profile** ウィンドウで **OK** をクリックしてください。



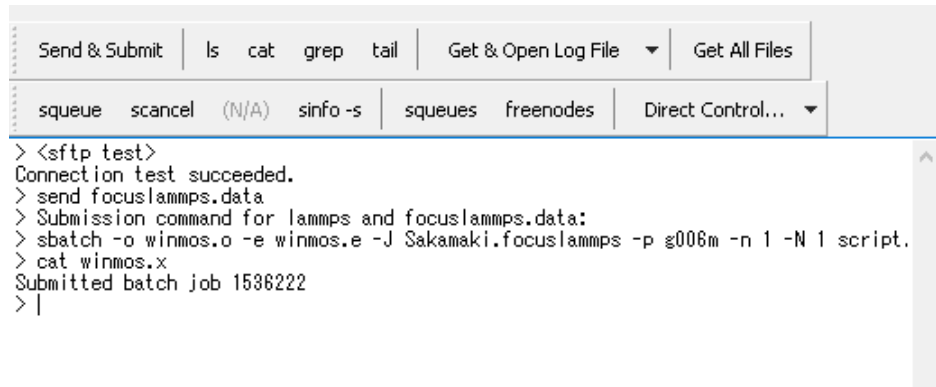
18. **Submit Remote Job** ウィンドウで **Send & Submit** ボタンをクリックしてください。



19. 次のダイアログが出現したらファイル名に「focuslammps」と入力し**保存**をクリックする。

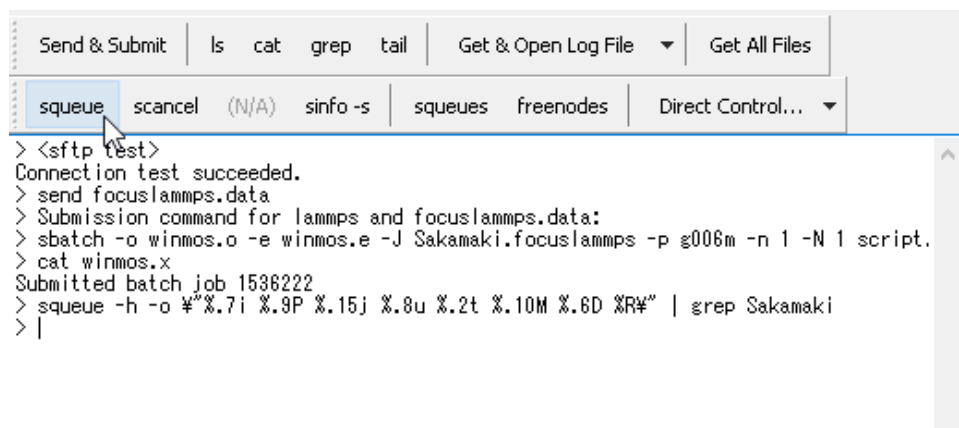


20. 数秒処理が流れた後、**Submit Remote Job** ウィンドウの下部に「Submitted batch job」と表示されることを確認します。



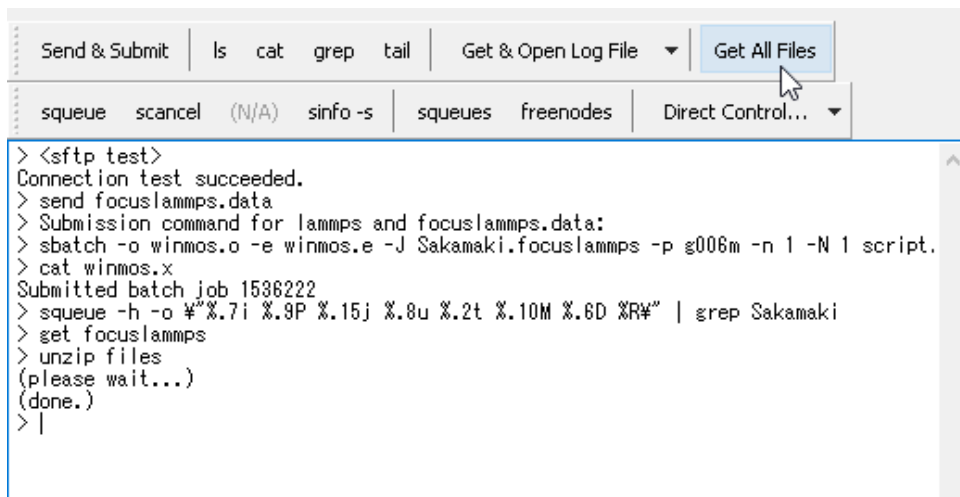
```
Send & Submit | ls cat grep tail | Get & Open Log File ▼ | Get All Files
squeue scancel (N/A) sinfo -s | squeues freenodes | Direct Control... ▼
> <sftp test>
Connection test succeeded.
> send focuslammps.data
> Submission command for lammps and focuslammps.data:
> sbatch -o winmos.o -e winmos.e -J Sakamaki.focuslammps -p g006m -n 1 -N 1 script.
> cat winmos.x
Submitted batch job 1536222
> |
```

21. **Submit Remote Job** ウィンドウの **squeue** ボタン (**squeues** ではない) をクリックし、ウィンドウ下部に「>」とだけ表示されることを確認します (ジョブが完了したことを意味します)。もし何らかのメッセージが表示される場合は、しばらく時間を置いて (数秒~数分) また **squeue** ボタンをクリックしてください。

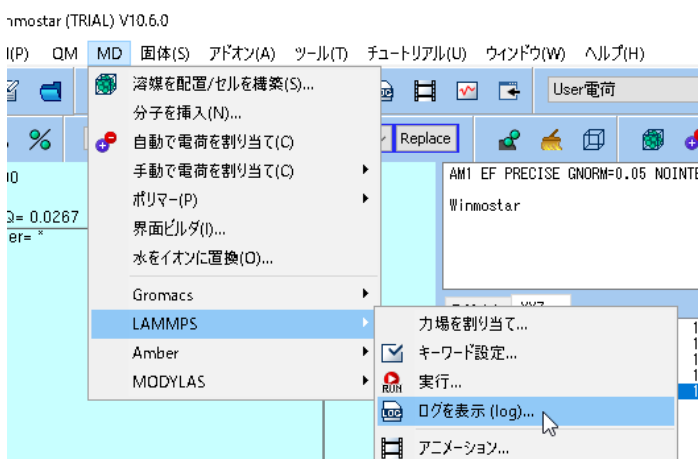


```
Send & Submit | ls cat grep tail | Get & Open Log File ▼ | Get All Files
squeue scancel (N/A) sinfo -s | squeues freenodes | Direct Control... ▼
> <sftp test>
Connection test succeeded.
> send focuslammps.data
> Submission command for lammps and focuslammps.data:
> sbatch -o winmos.o -e winmos.e -J Sakamaki.focuslammps -p g006m -n 1 -N 1 script.
> cat winmos.x
Submitted batch job 1536222
> squeue -h -o "%7i %9P %15j %8u %2t %10M %6D %R%" | grep Sakamaki
> |
```

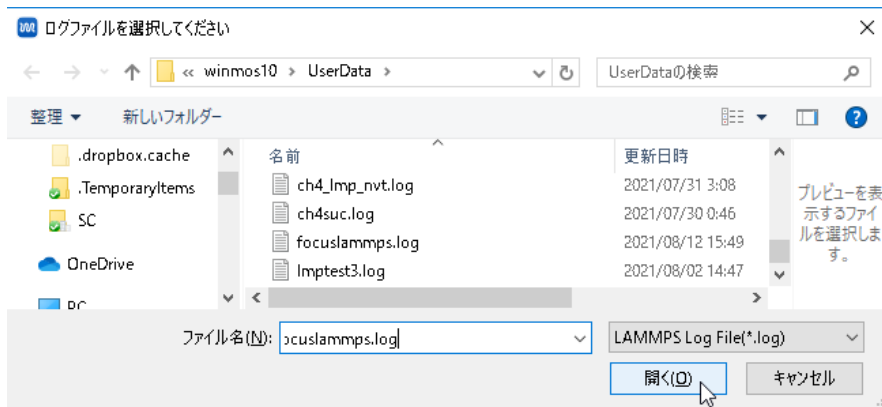
22. **Submit Remote Job** ウィンドウの **Get All Files** ボタンをクリックします。しばらく処理が流れた後、ウィンドウ下部に「(done.)」と表示されることを確認します。



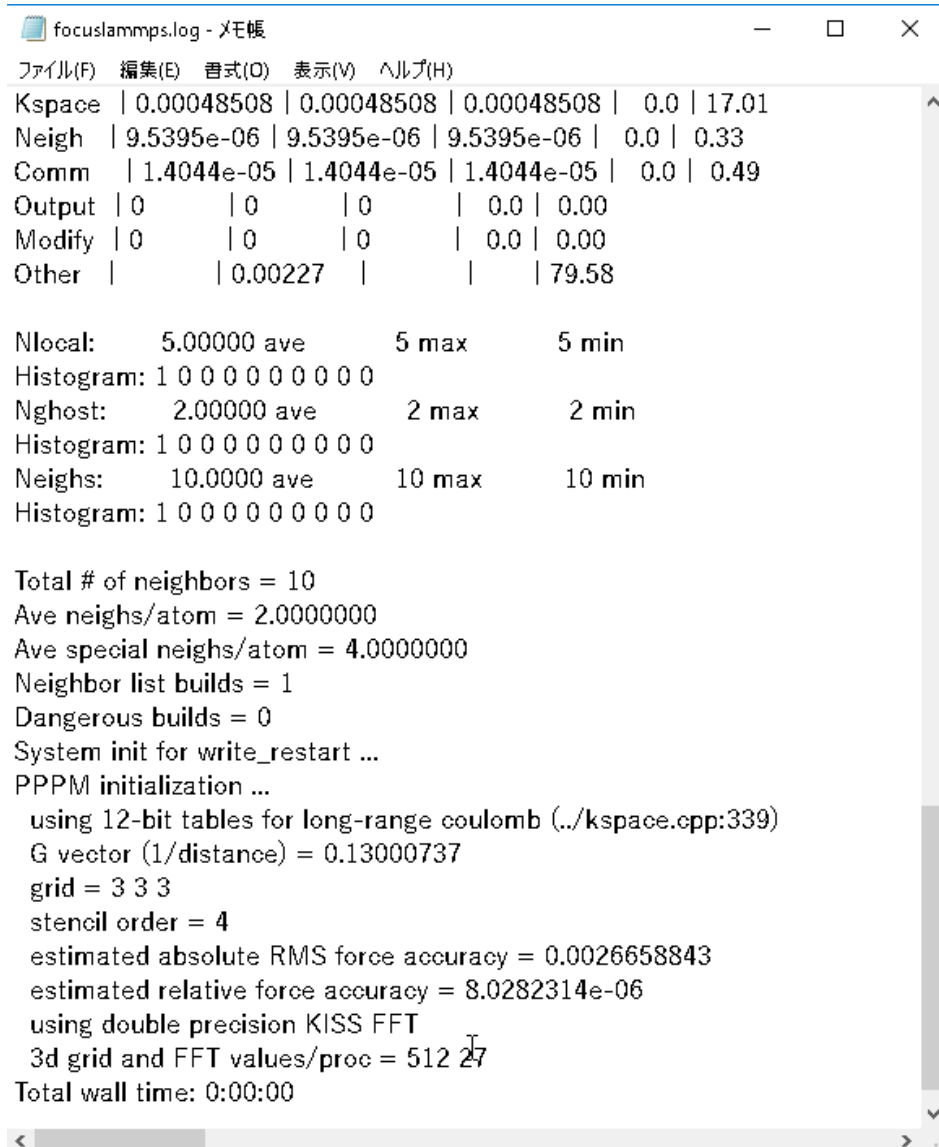
23. Winmostar のメインウィンドウに戻り、**MD | LAMMPS | ログを表示**をクリックします。



24. 次のダイアログで**開く**をクリックします。



25. メモ帳で先ほどの計算のログが開きます。下の方にスクロールし、下図と似たような内容になっていることを確認します。動作確認は以上です。



```
focuslammps.log - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
Kspace | 0.00048508 | 0.00048508 | 0.00048508 | 0.0 | 17.01
Neigh  | 9.5395e-06 | 9.5395e-06 | 9.5395e-06 | 0.0 | 0.33
Comm   | 1.4044e-05 | 1.4044e-05 | 1.4044e-05 | 0.0 | 0.49
Output | 0          | 0          | 0          | 0.0 | 0.00
Modify | 0          | 0          | 0          | 0.0 | 0.00
Other  |           | 0.00227   |           |     | 79.58

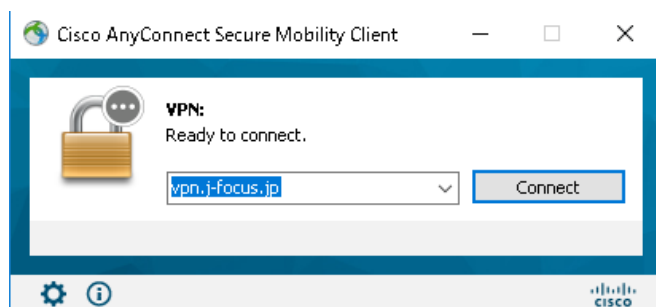
Nlocal:    5.00000 ave      5 max      5 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
Nghost:    2.00000 ave      2 max      2 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
Neighs:    10.0000 ave     10 max     10 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 10
Ave neighs/atom = 2.0000000
Ave special neighs/atom = 4.0000000
Neighbor list builds = 1
Dangerous builds = 0
System init for write_restart ...
PPPM initialization ...
  using 12-bit tables for long-range coulomb (../kspace.cpp:339)
  G vector (1/distance) = 0.13000737
  grid = 3 3 3
  stencil order = 4
  estimated absolute RMS force accuracy = 0.0026658843
  estimated relative force accuracy = 8.0282314e-06
  using double precision KISS FFT
  3d grid and FFT values/proc = 512 27
Total wall time: 0:00:00
```

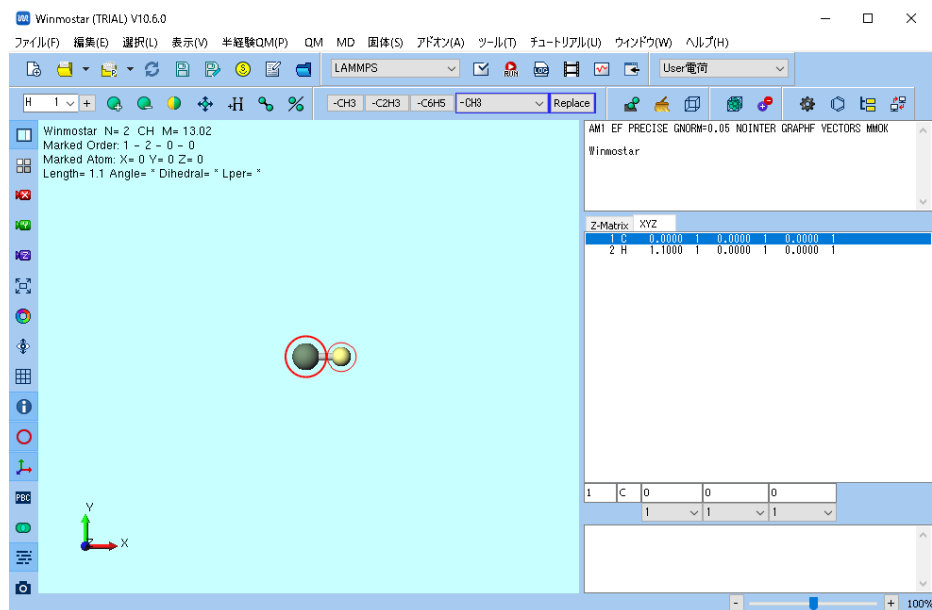
5. 動作確認 (Quantum ESPRESSO の場合)

ここでは VPN 接続の場合の方法のみ示します。

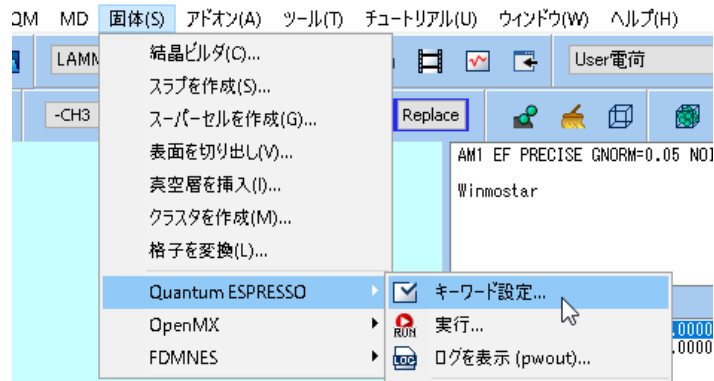
1. FOCUS から案内のあった方法に従い、Cisco AnyConnect Secure Mobility Client で FOCUS に接続してください。下図は本書作成時点での参考画面です。



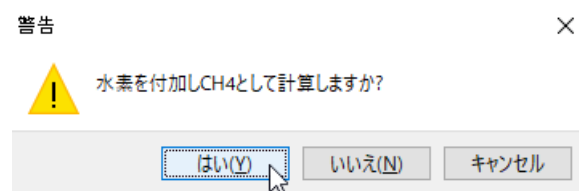
2. Winmostar を起動してください。



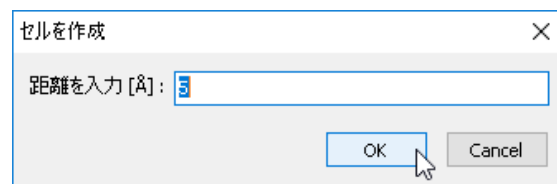
3. Winmostar メインウィンドウで**固体** | **Quantum ESPRESSO** | キーワード設定をクリックしてください。



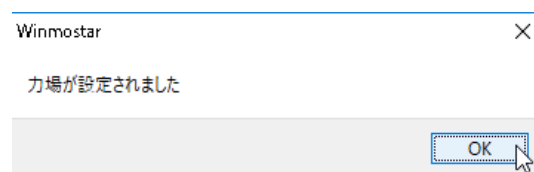
4. 次のダイアログで**はい**をクリックしてください。



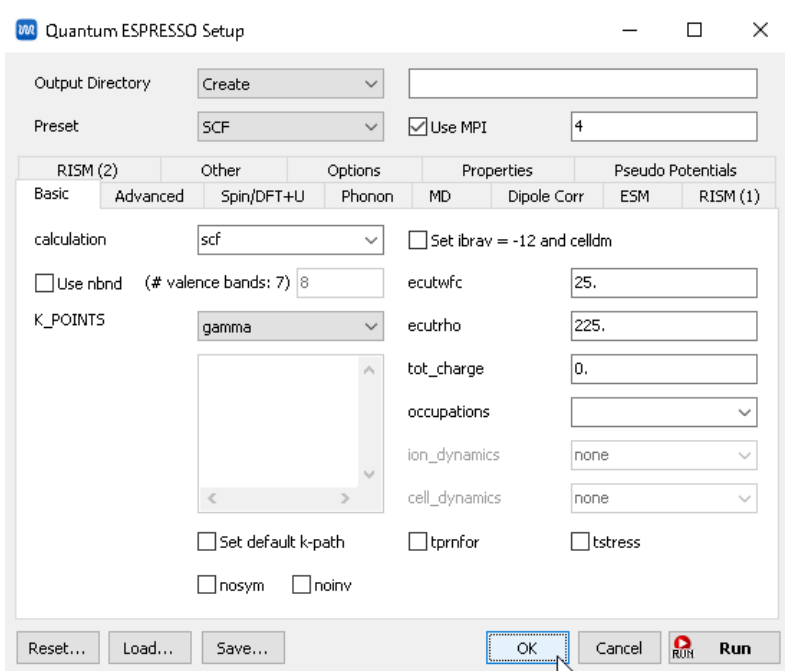
5. 次のダイアログで**OK**をクリックしてください。



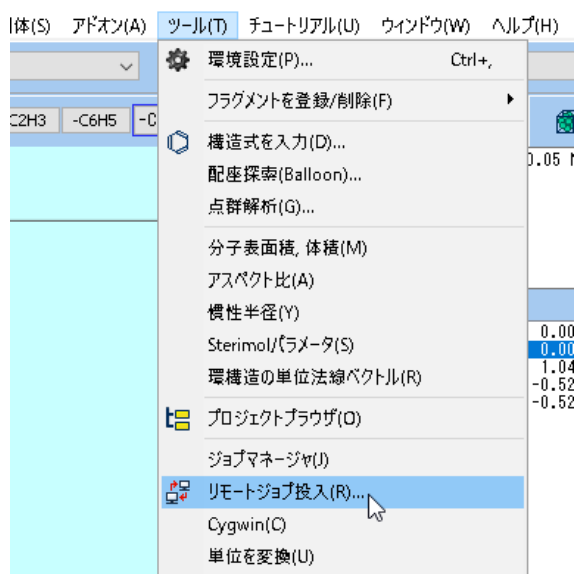
6. 「Analyzing symmetry using Spglib...」というダイアログが出現し数秒処理が流れた後、次のダイアログで**OK**をクリックしてください。



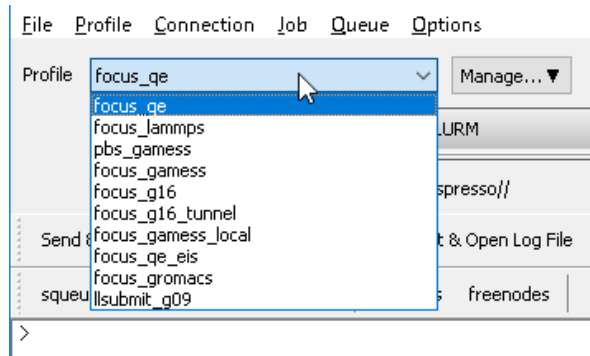
7. 次のウィンドウで **OK** (**Run** ではない) をクリックしてください。



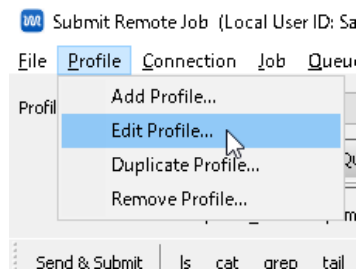
8. Winmostar メインウィンドウでツール | リモートジョブ投入をクリックしてください。



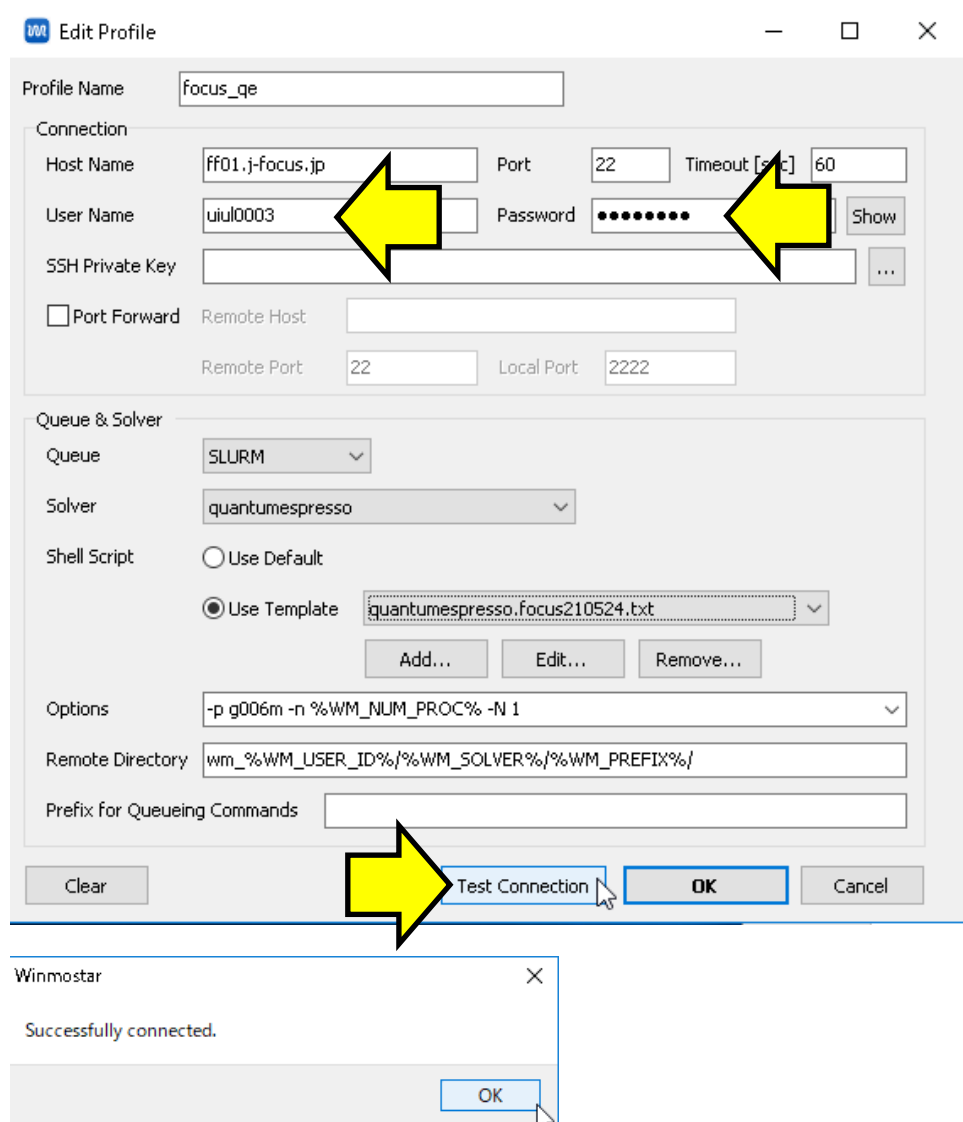
9. **Submit Remote Job** ウィンドウの **Profile** で「focus_qe」を選択してください。



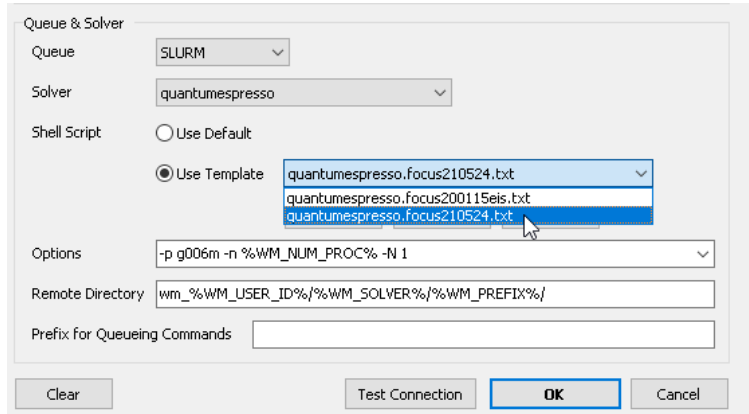
10. **Submit Remote Job** ウィンドウで **Profile | Edit Profile** をクリックしてください。



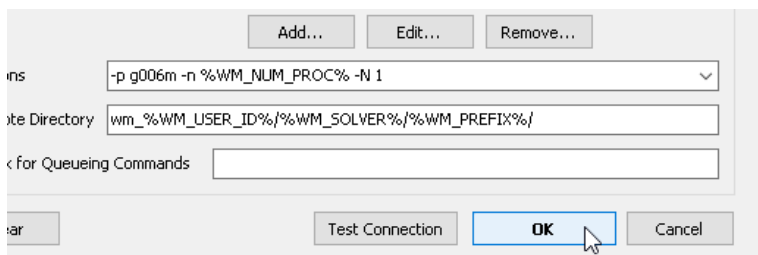
11. **Edit Profile** ウィンドウで **User Name** と **Password** に FOCUS から配布されたアカウントを入力してください（必ず半角英数字で）。その後、ウィンドウ下部の **Test Connection** ボタンをクリックし、「Successfully connected.」というダイアログが表示されたら正常に接続設定ができたこととなります。「Successfully connected.」が表示されなかったら **User Name** と **Password** を注意深く再入力してください。



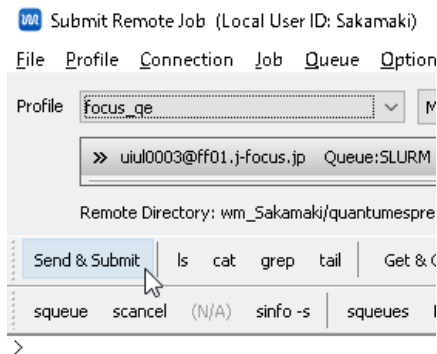
12. **Edit Profile** ウィンドウの **Queue&Solver** の **Shell Script** で「quantumpresso.focus210524.txt」を選択してください。



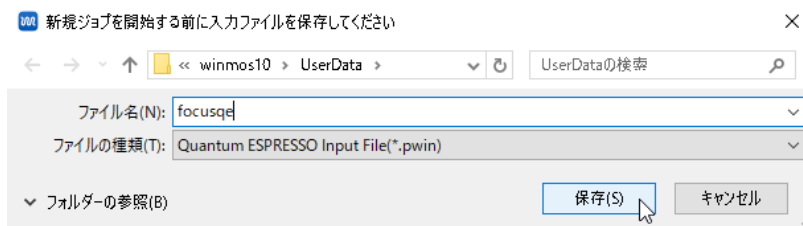
13. **Edit Profile** ウィンドウで **OK** をクリックしてください。



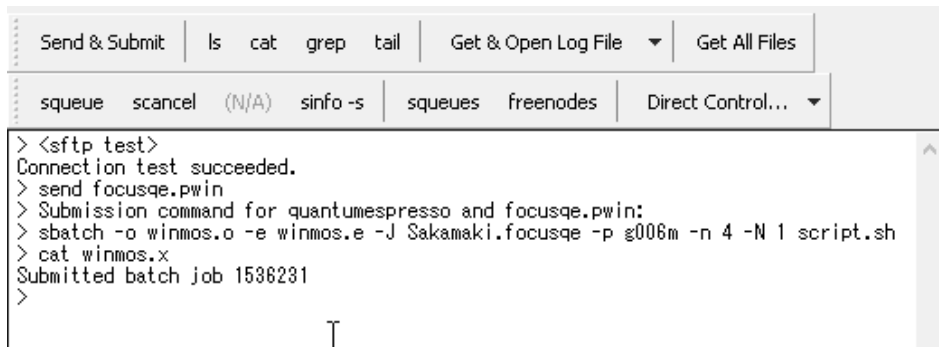
14. **Submit Remote Job** ウィンドウで **Send & Submit** ボタンをクリックしてください。



15. 次のダイアログが出現したらファイル名に「focusqe」と入力し**保存**をクリックする。

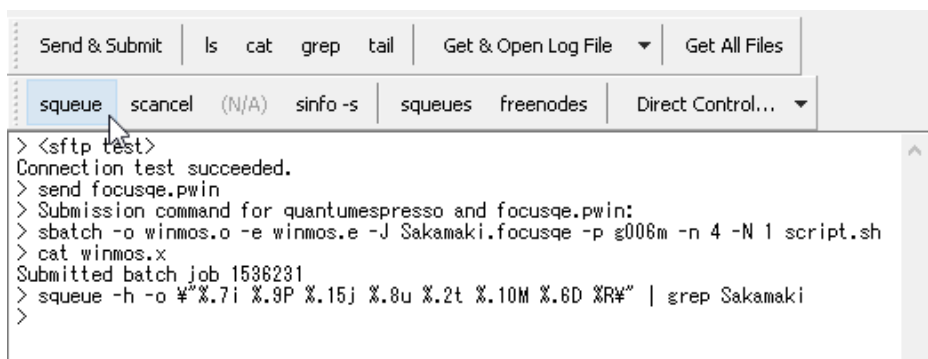


16. 数秒処理が流れた後、**Submit Remote Job** ウィンドウの下部に「Submitted batch job」と表示されることを確認します。



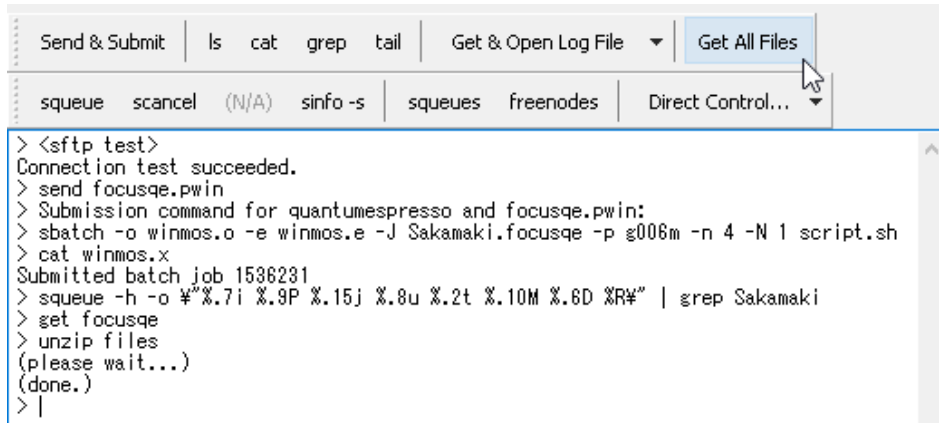
```
Send & Submit | ls cat grep tail | Get & Open Log File | Get All Files
squeue scancel (N/A) sinfo -s | squeues freenodes | Direct Control...
> <sftp test>
Connection test succeeded.
> send focusqe.pwin
> Submission command for quantumespresso and focusqe.pwin:
> sbatch -o winmos.o -e winmos.e -J Sakamaki.focusqe -p g006m -n 4 -N 1 script.sh
> cat winmos.x
Submitted batch job 1536231
>
```

17. **Submit Remote Job** ウィンドウの **squeue** ボタン (**squeues** ではない) をクリックし、ウィンドウ下部に「>」とだけ表示されることを確認します (ジョブが完了したことを意味します)。もし何らかのメッセージが表示される場合は、しばらく時間を置いて (数秒~数分) また **squeue** ボタンをクリックしてください。

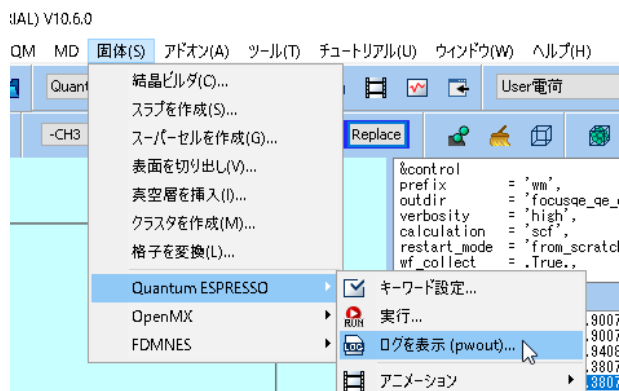


```
Send & Submit | ls cat grep tail | Get & Open Log File | Get All Files
squeue scancel (N/A) sinfo -s | squeues freenodes | Direct Control...
> <sftp test>
Connection test succeeded.
> send focusqe.pwin
> Submission command for quantumespresso and focusqe.pwin:
> sbatch -o winmos.o -e winmos.e -J Sakamaki.focusqe -p g006m -n 4 -N 1 script.sh
> cat winmos.x
Submitted batch job 1536231
> squeue -h -o "%7i %9P %15j %8u %2t %10M %6D %R%" | grep Sakamaki
>
```

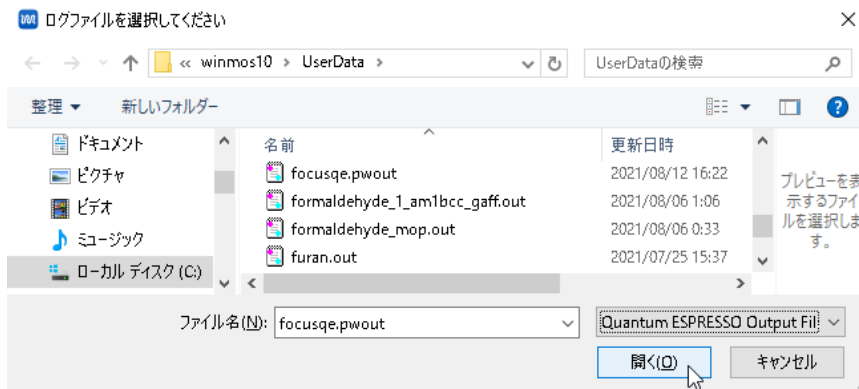
18. **Submit Remote Job** ウィンドウの **Get All Files** ボタンをクリックします。しばらく処理が流れた後、ウィンドウ下部に「(done.)」と表示されることを確認します。



19. Winmostar のメインウィンドウに戻り、**固体 | Quantum ESPRESSO | ログを表示** をクリックします。



20. 次のダイアログで**開く**をクリックします。



21. メモ帳で先ほどの計算のログが開きます。下の方にスクロールし、下図と似たような内容になっていることを確認します。動作確認は以上です。

```
focusqe.pwout - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
regterg:last : 0.00s CPU 0.00s WALL ( 24 calls)
h_psi      : 0.35s CPU 0.36s WALL ( 38 calls)
s_psi      : 0.00s CPU 0.00s WALL ( 38 calls)
g_psi      : 0.00s CPU 0.00s WALL ( 24 calls)

Called by h_psi:
h_psi:calbec : 0.01s CPU 0.01s WALL ( 38 calls)
vloc_psi    : 0.34s CPU 0.35s WALL ( 38 calls)
add_vuspsi  : 0.00s CPU 0.00s WALL ( 38 calls)

General routines
calbec      : 0.01s CPU 0.01s WALL ( 51 calls)
fft         : 2.54s CPU 2.72s WALL ( 151 calls)
ffts        : 0.09s CPU 0.09s WALL ( 27 calls)
fftw        : 0.34s CPU 0.35s WALL ( 182 calls)
interpolate : 0.28s CPU 0.29s WALL ( 14 calls)

Parallel routines
fft_scatt_xy : 0.25s CPU 0.26s WALL ( 360 calls)
fft_scatt_yz : 0.67s CPU 0.80s WALL ( 360 calls)

PWSCF      : 5.78s CPU 6.72s WALL

This run was terminated on: 16:21:15 12Aug2021

-----
JOB DONE.
-----
```

以上