

FOCUS スパコン向け Winmostar インストールマニュアル

2022 年 10 月 28 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 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 ご担当者に直接連絡、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 スパコンへの接続の方法には、VPN 方式と公開鍵認識接続方式があります。本書では基本的に VPN 方式の手順を示しますが、公開鍵認識接続方式の場合も「6. 多段 SSH 接続の手順」を参考に接続可能です。

VPN 方式の際には 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。

- [インストール方法](#) の【手順 10】は不要です。FOCUS 主催講習会を受講する場合または 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、V11 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。LAMMPS のインスト

ール時には MPICH もインストールしてください。【手順 10、11】は不要です。

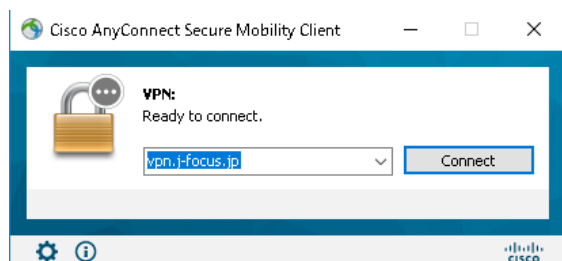
- **FOCUS 主催の Quantum ESPRESSO 講習会を受講される方は**、Winmostar 本体だけでなく、【手順 6】の CygwinWM、【手順 7】の Quantum ESPRESSO も必ずインストールしてください。Quantum ESPRESSO のインストール時には MPICH もインストールしてください。【手順 10、11】は不要です。
- FOCUS スパコンシステムの更新に合わせるため、過去にインストールした Winmostar および CygwinWM をご利用中の方は、[Winmostar の安定版最新バージョン](#)と [CygwinWM の最新バージョン](#)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。


LAMMPS 講習会を受講される方は「4. 動作確認 (LAMMPS の場合)」を実施してください。Quantum ESPRESSO 講習会のみ受講される方は、「5. 動作確認 (Quantum ESPRESSO の場合)」までスキップしてください。

4. 動作確認 (LAMMPS の場合)

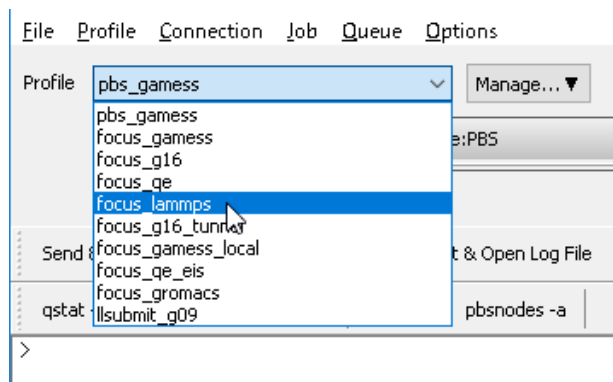
ここでは VPN 接続の場合の方法のみ示します。SSH 多段接続の場合は 6 を参照してください。

- 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。

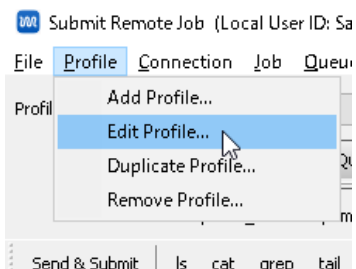


- ② Winmostar を起動し、ツールバーの  リモートジョブ投入をクリックしてください。

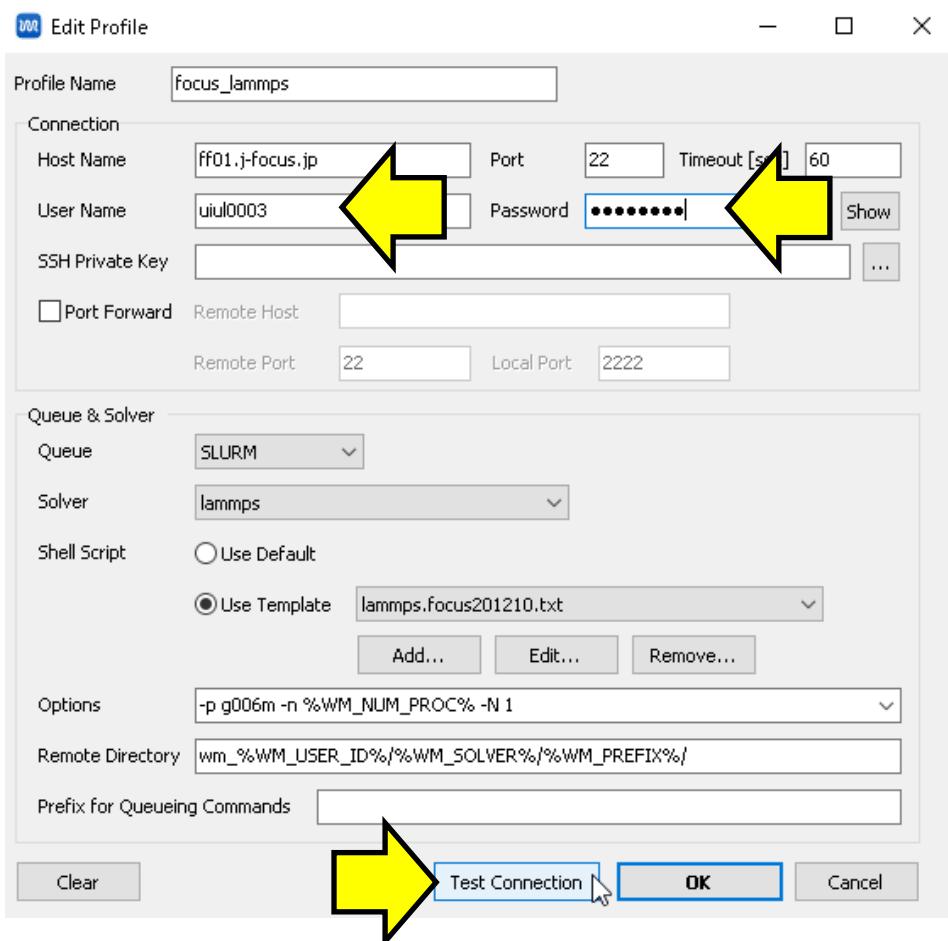
- ③ **Submit Remote Job** ウィンドウの **Profile** で「focus_lammps」を選択してください。



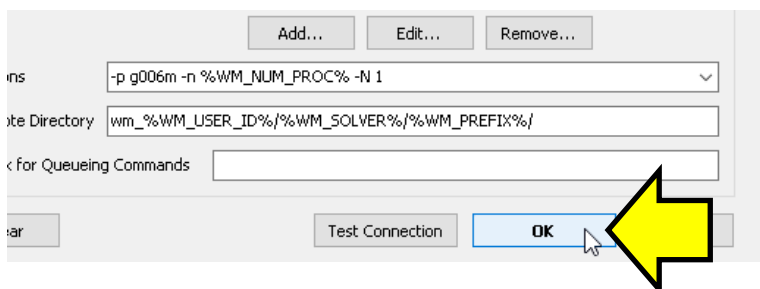
- ④ **Submit Remote Job** ウィンドウで **Profile | Edit Profile** をクリックしてください。



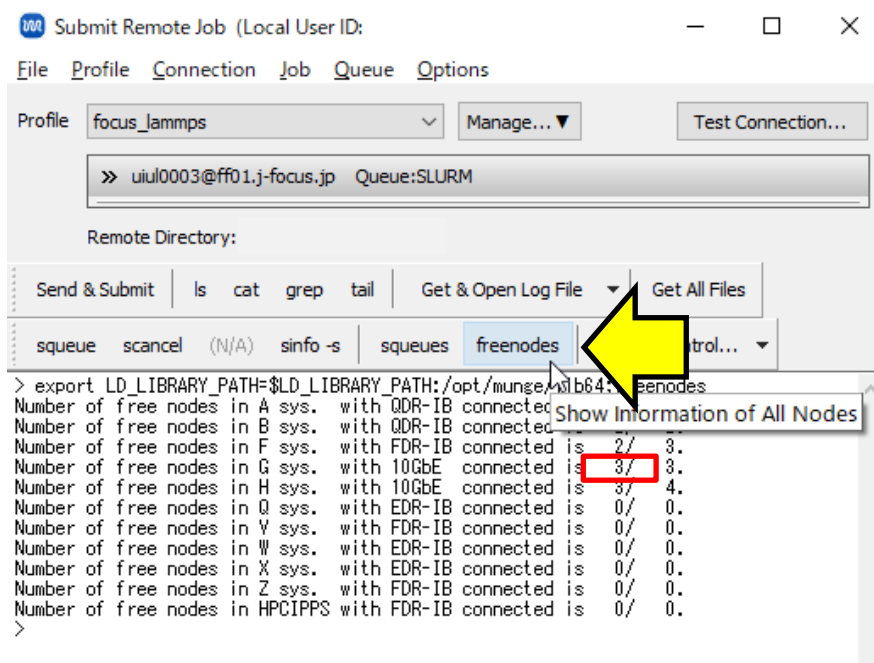
- ⑤ **Edit Profile** ウィンドウで **User Name** と **Password** に FOCUS から配布されたアカウントを入力してください (必ず半角英数字で)。その後、ウィンドウ下部の **Test Connection** ボタンをクリックします。「接続テストとリモートサーバ上でのジョブスケジューラの動作テストを実行しますか?」と表示されたら **接続テストのみ** をクリックします。「テストが正常に終了しました。」と表示されたら正常に接続設定ができたことになります。そうでない場合は **User Name** と **Password** を注意深く再入力してください。



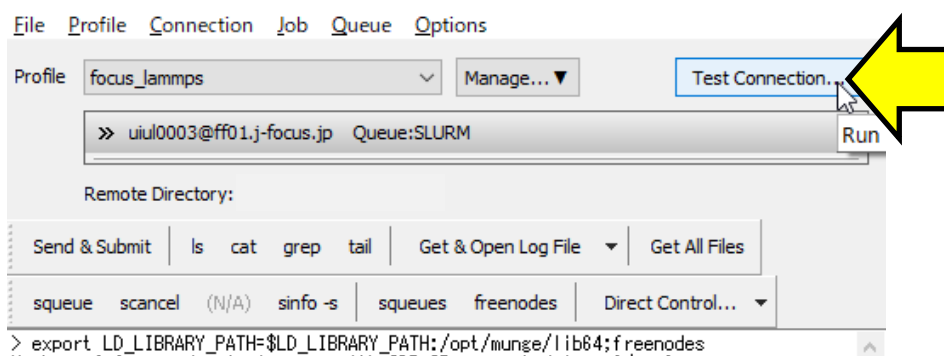
- ⑥ **Edit Profile** ウィンドウで **OK** をクリックしてください。



- ⑦ G システム (デバッグ用ノード) で動作確認を行うため、**Submit Remote Job** ウィンドウで中断の **freenodes** ボタンをクリックし、ノードの空き状況を確認します。下図に結果の一例を示しますがタイミングによって表示内容は変化します。「Number of free nodes in G sys.」の行の右端で分子 (下図の場合は赤枠内の「3」) が 0 でない状態になるまで何度か **freenodes** をクリックします。0 の場合は他のユーザが G システムを利用中ということになります。



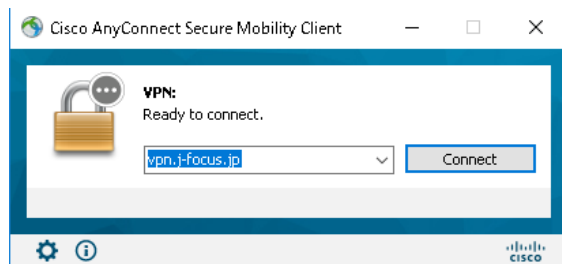
- ⑧ **Test Connection** をクリックします。「接続テストとリモートサーバ上でのジョブスケジューラの動作テストを実行しますか？」と表示されたら**両方実行**をクリックします。「ジョブスケジューラの動作テストの待ち時間を入力」と表示されたら **OK** をクリックします。「リモートサーバ上での LAMMPS のテストも実行しますか? ...」と表示されたら**はい**をクリックします。しばらく処理が流れたのち、「テストが正常に終了しました」と表示されることを確認します。されない場合は Winmostar およびローカルマシンの LAMMPS を再インストールしてください。



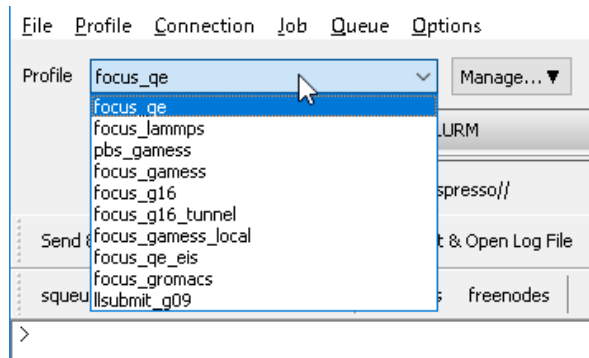
5. 動作確認 (Quantum ESPRESSO の場合)

ここでは VPN 接続の場合の方法のみ示します。SSH 多段接続の場合は 6 を参照してください。

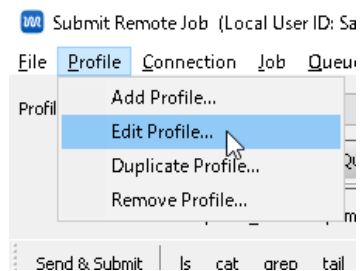
- ① FOCUS から案内のあった方法に従い、Cisco AnyConnect Secure Mobility Client で FOCUS に接続してください。下図は本書作成時点での参考画面です。



- ② Winmostar を起動し、ツールバーの  リモートジョブ投入をクリックしてください。
- ③ **Submit Remote Job** ウィンドウの **Profile** で「focus_qe」を選択してください。



- ④ **Submit Remote Job** ウィンドウで **Profile | Edit Profile** をクリックしてください。



- ⑤ **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ます。「接続テストとリモートサーバ上のジョブスケジューラの動作テストを実行しますか？」と表示されたら **接続テストのみ** をクリックします。「テストが正常に終了しました。」と表示されたら正常に接続設定ができたことになります。そうでない場合は **User Name** と **Password** を注意深く再入力してください。

The screenshot shows the 'Edit Profile' window with the following configuration:

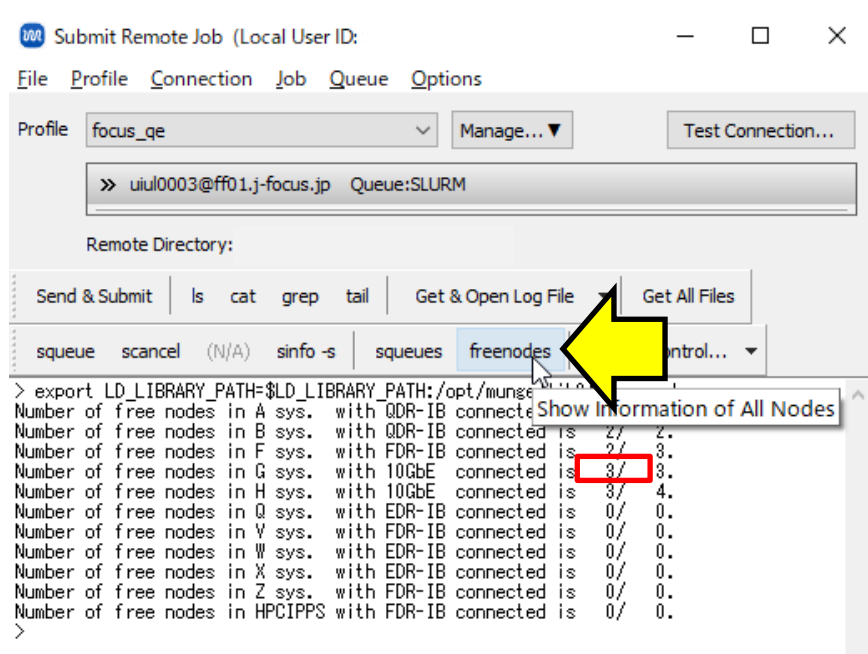
- Profile Name: focus_qe
- Connection:
 - Host Name: ff01.j-focus.jp
 - Port: 22
 - Timeout [sec]: 60
 - User Name: uiul0003
 - Password: [masked]
 - SSH Private Key: [empty]
 - Port Forward: Remote Host: [empty] Remote Port: 22 Local Port: 2222
- Queue & Solver:
 - Queue: SLURM
 - Solver: quantumespresso
 - Shell Script: Use Template: quantumespresso.focus210524.txt
 - Options: -p g006m -n %WM_NUM_PROC% -N 1
 - Remote Directory: wm_%WM_USER_ID%/%WM_SOLVER%/%WM_PREFIX%/
 - Prefix for Queueing Commands: [empty]

Buttons at the bottom: Clear, Test Connection, OK, Cancel. A yellow arrow points to the 'Test Connection' button.

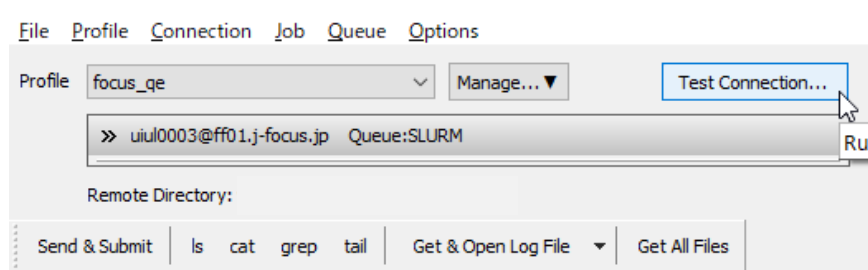
- ⑥ **Edit Profile** ウィンドウで **OK** をクリックしてください。

This is a close-up of the bottom of the 'Edit Profile' window, showing the 'Test Connection', 'OK', and 'Cancel' buttons. A yellow arrow points to the 'OK' button.

- ⑦ G システム (デバッグ用ノード) で動作確認を行うため、**Submit Remote Job** ウィンドウで中断の **freenodes** ボタンをクリックし、ノードの空き状況を確認します。下図に結果の一例を示しますがタイミングによって表示内容は変化します。「Number of free nodes in G sys.」の行の右端で分子 (下図の場合は赤枠内の「3」) が 0 でない状態になるまで何度か **freenodes** をクリックします。0 の場合は他のユーザが G システムを利用中ということになります。



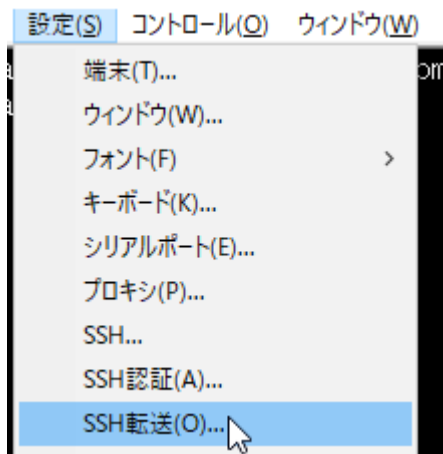
- ⑧ **Test Connection** をクリックします。「接続テストとリモートサーバ上でのジョブスケジューラの動作テストを実行しますか?」と表示されたら**両方実行**をクリックします。「ジョブスケジューラの動作テストの待ち時間を入力」と表示されたら **OK** をクリックします。「リモートサーバ上での Quantum ESPRESSO のテストも実行しますか?…」と表示されたら**はい**をクリックします。しばらく処理が流れたのち、「テストが正常に終了しました」と表示されることを確認します。されない場合は Winmostar およびローカルマシンの Quantum ESPRESSO を再インストールしてください。



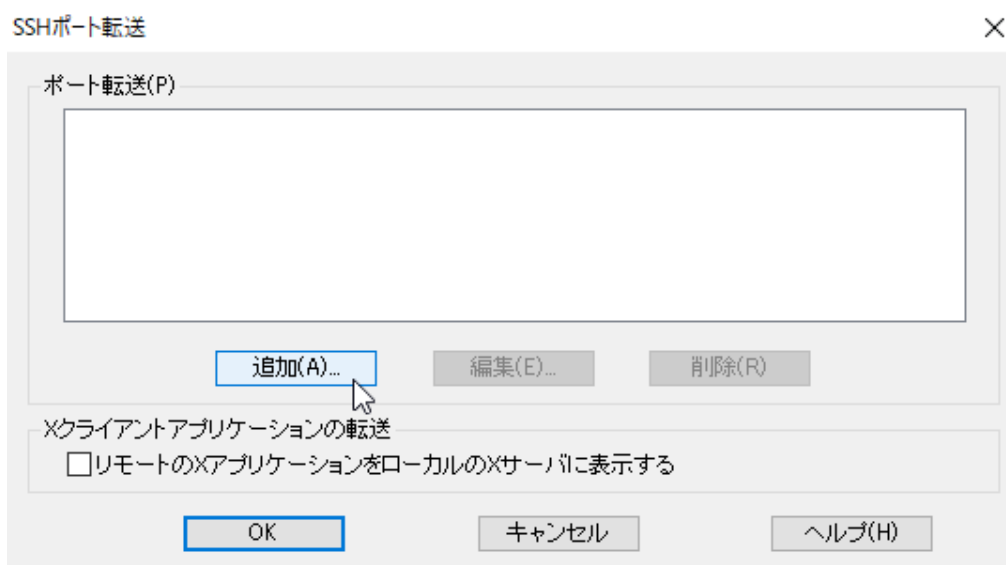
6. 多段 SSH 接続の手順

VPN 接続ができない場合、多段 SSH 接続を行います。

1. FOCUS スパコン HP の [「システムへのログイン」](#) → [「インターネットからの SSH 接続によるログイン」](#) の手順を参考に、TeraTerm を用いてログインサーバ (ssh.j-focus.jp) にログインします。
2. ログインサーバにログインした状態で TeraTerm の **設定 | SSH 転送** をクリックします。



3. **追加** をクリックします。



4. 以下のように入力し、**OK** をクリックします。**ローカルのポート**は、10335 が他の接続で使われている場合は適宜別のポートにしてください。

SSHポート転送

ポート転送を行う向きを選択:

ローカルのポート(L) 10335 リッスン(D)

リモート側ホスト(M) ff01.j-focus.jp ポート(P) 22

リモートサーバのポート(R) リッスン(S)

ローカル側ホスト(A) ポート(O)

ダイナミックポート(D) リッスン(T)

OK キャンセル

5. **OK** をクリックします。

SSHポート転送

ポート転送(P)

ローカルの "localhost" のポート 10335 からリモート側ホスト "ff01.j-focus.jp" のポート 22

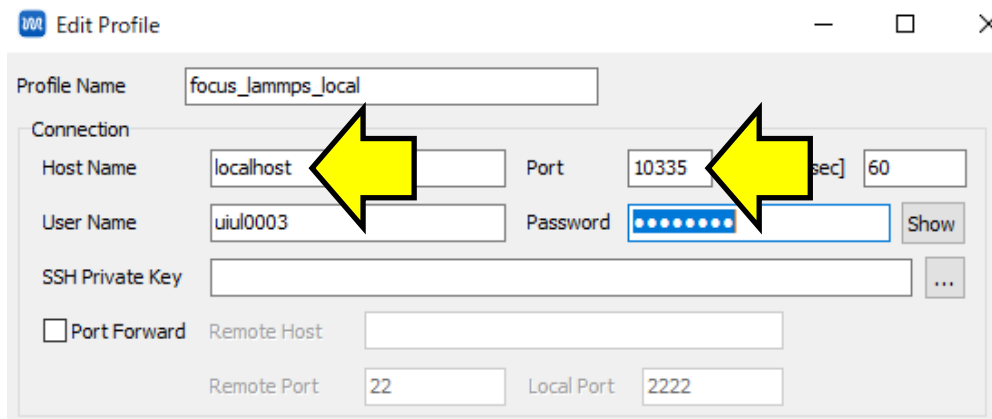
追加(A)... 編集(E)... 削除(B)

×クライアントアプリケーションの転送

リモートの×アプリケーションをローカルの×サーバに表示する

OK キャンセル ヘルプ(H)

6. 上記の状態です「4. 動作確認 (LAMMPS の場合)」または「5. 動作確認 (Quantum ESPRESSO の場合)」の手順を実施します。ただし、Cisco AnyConnect Secure Mobility Client の起動と接続は不要です。操作中は TeraTerm でログインサーバに接続している状態を維持してください。そして、Winmostar のツール | リモートジョブ投入 | Profile | Edit Profile のウィンドウで操作する際に、**Host Name** を「localhost」、**Port** を「10335」(4.でローカルのポートを変更したときはその番号) に変更します。



以上