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 <u>Winmostar の動作環境</u>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<u>こちら</u>でご確認できます。

3. Winmostar およびソルバのインストール

<u>インストール方法</u>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<u>お問い合わせフォーム</u>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。
 - 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。

🕙 Cisco AnyC	onnect Secure Mobility Client	_	•	×
	VPN: Ready to connect. Vpn.j-focus.jp	~	Connect	
۞ (i)				alialia cisco

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

브	le <u>P</u>	rotile	<u>C</u> onnection	Ţор	<u>U</u> ueue	Opt	tions
PI	ofile	pbs o	amess			~	Manage 🔻
		pbs_g focus focus	amess _gamess _g16				e:PBS
		focus focus	lammps				
******	Send	focus focus focus	_gamess_local _ge_eis				t & Open Log File 🕚
******	qstat	focus_ Ilsubm	_gromacs it_g09				pbsnodes -a C
>							

. . _

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

<u> </u>	Submit Re	emote Job (Lo	cal Use	er ID: Sa
<u>F</u> ile	<u>P</u> rofile	<u>C</u> onnection	Ţop	<u>O</u> ueu
Profil	Ac	ld Profile		_
	Ed	it Profile N		
	Du	uplicate Profile		Sr
	Re	move Profile		
			-	
Ser	nd & Subr	nit Is cat	arep	tail

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。

🚾 Edit Profile					_		×
Profile Name fo	ocus_lammps						
Connection							
Host Name	ff01.i-focus.ip		Port 2	22 Timeoul	(s /] 6	0	
	·····,						
User Name	uiulooo3		Password	•••••• <		Show	
SSH Private Key						-	
Port Forward	Remote Host						
	Remote Port 2	2	Local Port	2222			
Queue & Solver							
Queue	SLURM ~						
Solver	lammps		~				
Shell Script	🔿 Use Default						
	⊙Use Template	lammps.focus2	01210.txt		~		
		Add	Edit	Remove			
Options	-p g006m -n %WM	_NUM_PROC%	-N 1			~	
Remote Directory	wm_%WM_USER_I	D%/%WM_50L	.VER%/%WM	_PREFIX%/			
Prefix for Queuein	g Commands						
Clear		Test	: Connection	ОК		Cancel	

⑥ Edit Profile ウィンドウで OK をクリックしてください。

	Add Edit Remove
ns	-p g006m -n %WM_NUM_PROC% -N 1 🗸 🗸
)te Directory	wm_%WM_USER_ID%/%WM_SOLVER%/%WM_PREFIX%/
< for Queueing	Commands
ar	

 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。

🚥 Submit Remote Job (Local User ID:	-		\times
<u>File Profile Connection Job Queue Options</u>			
Profile focus_lammps ∨ Manage▼	Test C	onnection	n
>> uiul0003@ff01.j-focus.jp Queue:SLURM			
Remote Directory:			
Send & Submit Is cat grep tail Get & Open Log File 🔻 Ge	et All Files		
squeue scancel (N/A) sinfo-s squeues freenodes	itrol	-	
> export LD_LIBRARY_PATH=\$LD_LIBRARY_PATH:/opt/munge_vs1b64. Een Number of free nodes in A sys. with QDR-IB connected Number of free nodes in B sys. with QDR-IB connected is 2/ Number of free nodes in G sys. with FDR-IB connected is 3/ Number of free nodes in H sys. with 10GbE connected is 3/ Number of free nodes in Q sys. with 10GbE connected is 3/ Number of free nodes in Q sys. with EDR-IB connected is 0/ Number of free nodes in Y sys. with FDR-IB connected is 0/ Number of free nodes in Y sys. with FDR-IB connected is 0/ Number of free nodes in X sys. with FDR-IB connected is 0/ Number of free nodes in X sys. with FDR-IB connected is 0/ Number of free nodes in X sys. with FDR-IB connected is 0/ Number of free nodes in Z sys. with FDR-IB connected is 0/ Number of free nodes in HPCIPPS with FDR-IB connected is 0/	odes nation o 3. 3. 4. 0. 0. 0. 0. 0. 0.	f All No	des

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。

<u>File Profile Connection Job Queue</u>	Options	
Profile focus_lammps	✓ Manage▼ Test C	onnection.
>> uiul0003@ff01.j-focus.jp Que	ue:SLURM	Run
Remote Directory:		
Send & Submit Is cat grep tail	Get & Open Log File 🔻 🛛 Get All Files	
squeue scancel (N/A) sinfo-s s	queues freenodes Direct Control	•
<pre>> export_LD_LIBRARY_PATH=\$LD_LIBRARY_</pre>	PATH:/opt/munge/lib64;freenodes	~

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。

 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。

🕤 Cisco AnyC		-		×	
	VPN: Ready to connect. Vpn.j-focus.jp	~		Connect	-
¢ ()					cisco

- ② Winmostar を起動し、ツールバーの ひろう 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。

<u>F</u> ile <u>P</u>	rofile	<u>C</u> onnection	Ţор	<u>O</u> ueue	<u>O</u> pt	tions
Profile	focus	_qe	__		~	Manage 🔻
	focus focus pbs q	ge _lammps amess				URM
	focus focus	_gamess _g16 _g16_tuppel			5	presso//
Send	focus	_gamess_local _qe_eis				: & Open Log File
squeu	focus <u>.</u> Ilsubm	_gromacs it_g09				freenodes [
>						

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

<u> </u>	submit Re	emote Job (Lo	cal Use	er ID: Sa	
<u>F</u> ile	<u>P</u> rofile	<u>C</u> onnection	Ţор	<u>O</u> ueu	
Profil	Ac	ld Profile		-	
	Ed	Edit Profile			
	Du	plicate Profile	·	Sr	
	Re	move Profile			
			-		
Ser	nd & Subm	nit Is cat	ared	tail	

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。

🚧 Edit Profile	- 🗆 ×
Profile Name fo	icus_qe
Connection	
Host Name	ff01.j-focus.jp Port 22 Timeout [sc] 60
User Name	uiul0003 Password ••••••• Show
SSH Private Key	
Port Forward	Remote Host
	Remote Port 22 Local Port 2222
Queue & Solver	
Queue	SLURM V
Solver	quantumespresso \vee
Shell Script	O Use Default
	Use Template quantumespresso.focus210524.txt
	Add Edit Remove
Options	-p g006m -n %WM_NUM_PROC% -N 1
Remote Directory	wm_%WM_USER_ID%/%WM_SOLVER%/%WM_PREFIX%/
Prefix for Queuein	g Commands
Clear	
Edit Profile ウィ	✓ ンドウで OK をクリックしてください。

	Add Edit Remove
ins	-p g006m -n %WM_NUM_PROC% -N 1
)te Directory	wm_%WM_USER_ID%/%WM_SOLVER%/%WM_PREFIX%/
< for Queuein	g Commands
ar	Test Connection OK
	N

6

 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。

🚾 Submit Remote Job (Local User ID:	_		×
<u>File Profile Connection Job Queue Options</u>			
Profile focus_qe ∨ Manage▼	Test Co	onnection	
>> uiul0003@ff01.j-focus.jp Queue:SLURM			
Remote Directory:			
Send & Submit Is cat grep tail Get & Open Log File 🖌 Ge	t All Files		
squeue scancel (N/A) sinfo-s squeues freenodes	ontrol	•	
<pre>> export LD_LIBRARY_PATH=\$LD_LIBRARY_PATH:/opt/munset Number of free nodes in A sys. with QDR-IB connected Show Informa Number of free nodes in B sys. with QDR-IB connected is 2/2 Number of free nodes in G sys. with FDR-IB connected is 3/3 Number of free nodes in G sys. with IOGDE connected is 3/4 Number of free nodes in Q sys. with 10GDE connected is 3/4 Number of free nodes in Q sys. with EDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in W sys. with FDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in W sys. with EDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in X sys. with EDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in X sys. with EDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in Z sys. with EDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in Z sys. with FDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in HPCIPPS with FDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in HPCIPPS with FDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in Y sys. with EDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in Z sys. with FDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in HPCIPPS with FDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in HPCIPPS with FDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in HPCIPPS with FDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in HPCIPPS with FDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in HPCIPPS with FDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in HPCIPPS with FDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in HPCIPPS with FDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in HPCIPPS with FDR-IB connected is 0/0 Number of free nodes in HPCIPPS with FDR-IB connected is 0/0</pre>	ition of	All Nod	es

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。

<u>F</u> ile <u>P</u>	rofile	<u>C</u> onnec	tion <u>J</u>	ob 🤇	Queue	<u>O</u> ptio	ns					
Profile	focus	_qe				~	Manage	V		Test C	onnection	l
	» u	iul0003@1	ff01.j-fo	cus.jp	Queue	SLURM	1					∿ Ri
	Remot	e Director	y:									
Send	& Subm	iit Is	cat	grep	tail	Get &	Open Log	File 🔉	-	et All Files		

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<u>「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</u> <u>ログイン」</u>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。

SSHポート転送

ボート転送(P)			
道加(A)	編集(E)	削除(R)	
Xクライアントアプリケーションの転送 ロリモートのXアプリケーションをロー:	カルのXサーバに表示す [;]	3	
ОК	キャンセル	ヘルプ(H)	

 \times

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の選択:				
●ローカルのボート(L)	10335	~	リッスン(1)	
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(0)	~
○ダイナミックポート(D)			リッスン(T)	
	ок	キャ ン	ノセル	

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(<u>A</u>) 編集(<u>E</u>) 削除(<u>R</u>)
- Xクライアントアプリケーションの転送 □ リモートの <u>X</u> アプリケーションをローカルのXサーバに表示する
OK キャンセル ヘルプ(H)

Х

6. 上記の状態で「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。

🚾 Edit Profile					_		×
Profile Name	focus_lammps_loca	l		1			
Connection Host Name	localhost		Port	10335	sec]	60]
User Name	uiul0003		Password	······V		Show	
SSH Private Key							
Port Forward	Remote Host						
	Remote Port	22	Local Port	2222			