共同利用(産業利用トライアルユース:先端研究施設共用促進事業『みんなのスパコン』TSUBAMEによるペタスケールへの飛翔) 成果報告書 平成22年度 産業利用トライアルユース i10nf

利用課題名 Gaussian と GAMESS の実行を支援する GUI ソフトの開発 英文: GUI software development for Gaussian and GAMESS

千田 範夫 Norio Senda

株式会社テンキューブ研究所 TENCUBE Institute,Ltd. http://winmostar.com/

Gaussian と GAMESS の実行を支援する GUI ソフトを開発した。これによって、ファイル転送やターミナルソフトは不要で、簡単な操作でジョブの実行が可能になり、計算機システムに不慣れな実験研究者でも、TSUBAME で大規模分子科学計算を実行できるようになった。

A GUI software for the execution of Gaussian or GAMESS has been created. This software provides simple and easy operational environment for the computation software without using ordinary file transport utilities or terminal utilities. This will be of great support for the laboratory scientists who are not familiar with computer system in executing large scale calculations of computational chemistry.

Keywords: Gaussian, GAMESS, GUI, Winmostar

背景と目的

分子科学計算を普及させるには、計算機システムや 理論化学に不慣れな実験研究者でも手軽に、Gaussian や GAMESS の計算を実行できる環境が不可欠である。

WindowsPC で動作する分子科学計算用GUIの Winmostar[1]はアカデミックフリーで公開されており、その使い易さから、教育研修用として広く利用されている。 商用版は企業の研究開発用途としても充分な機能を有しており、数多くの導入実績がある。

Winmostar の現在の利用方法は、Windows 版の計算ソルバーの利用が主体であるが、PC では計算が出来ないような大規模系の分子科学計算ニーズも高まっている。Winmostar 自体は、大規模分子の取り扱いも可能であり、Linux 機等の計算サーバーへジョブをサブミットする機能も有している。しかし、現状のWinmostarのジョブサブミット機能は汎用的ではなく、多様な計算ソルバーとジョブスケジューラには対応していないので、利用可能な範囲は限られていた。

本利用課題では、Winmostar から計算サーバーへの ジョブサブミット機能を改良し、汎用的な機能を開発す ることで、PC から スパコンまでシームレスな利用方法 を提案することを目標とした。

概要

Winmostar が内蔵している SSH を用いて、Linux 機又は UNIX 機の計算サーバーへ、Gaussian や GAMESS のジョブをサブミットする汎用的な機能を開発した。これによって、ファイル転送やターミナルソフトは不要になり、ボタンひとつで計算サーバーにファイル転送とジョブの起動、監視、結果の取得が可能になった。

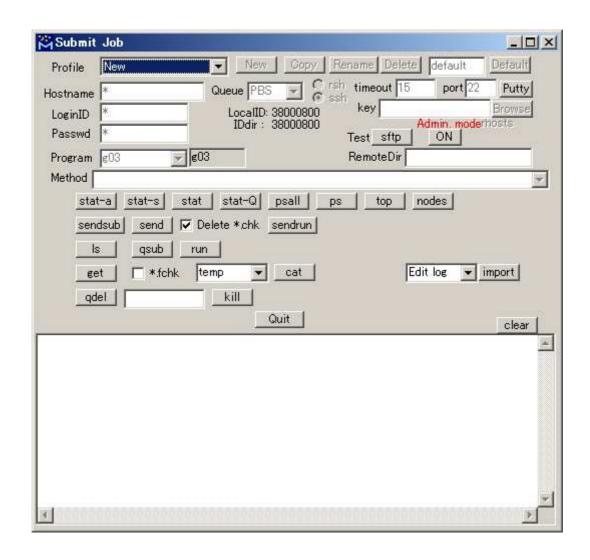
結果および考察

Winmostar を用いることで、計算機システムに不慣れな実験研究者でも、簡単に大規模分子科学計算を実行できるようになった。TSUBAME を手軽に利用できる環境によって、共用促進事業への貢献も期待できる。まとめ、今後の課題

Winmostarのジョブサブミット機能を汎用的に改良し、TSUBAME 上の Gausian と GAMESS を手軽に利用できる環境を構築した。今後の TSUBAME と Winmostar の利用を促進するために、マニュアルを作成したので以下に添付する。

文献

[1] Winmostar 公開ページ、http://winmostar.com



- 1. 計算→UNIX Server で Submit Job の画面が立ち上がる。
- 2. Submit Job の初期画面で、Admin mode の[ON]を押し、Password で"0204"を入力する。
- 3. 右上に default が表示されているのを確認して[Default]を押す。

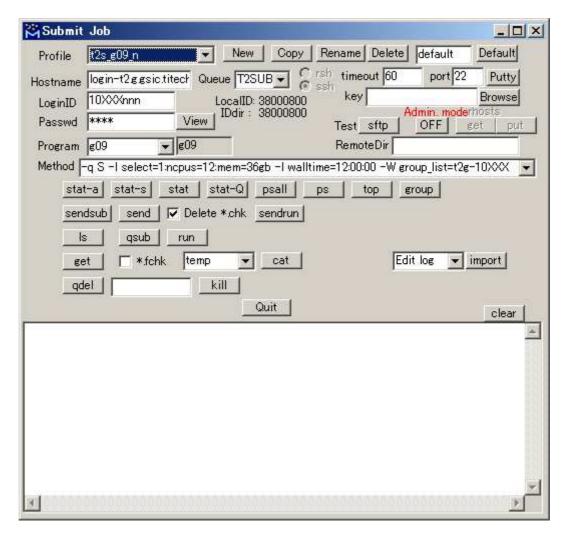
これで、default_server.iniの内容が winmos_server.ini にコピーされ、以降は winmos_server.ini に設定変更の内容が保存される。

default_server.iniの内容は、エディターで変更できる。

winmos_server.ini は Submit Job 画面で変更できるが、エディターで変更することもできる。

4. Admin mode では、Queue(LSF,PBS,SGE,T2SUB,ST)でスケジューラの設定ができる。 TSUBAMEでは、T2SUBを選択する。

T2SUB の設定では、次の図のようになる。



5. Hostname(login-t2.g.gsic.titech.ac.jp 等)や LoginID、Passwd の設定を行う。

key に、フルパスでプライベートキーを設定する。Program で g09 や g03 の選択、Method で PBS のオプションを指定する。

6. Test の横の[sftp]ボタンでテストする。

最初の接続時は、以下のメッセージがでるので、yを入力する、

If you want to carry on connecting just once, without adding the key to the cache, enter "n".

If you do not trust this host, press Return to abandon the connection.

Store key in cache? (y/n)

このテストが OK になれば、 $7. \sim 1.1.$ を行う。この時は、Admin mode を OFF にしても良い。 通常は Admin mode を OFF にしておく方が、誤って設定を変えてしまう恐れが少ない。

- 7. [stat-Q]や[group]でマシンの状況を確認する。
- 8. [sendsub]でTSUBAME にデータが転送されて、ジョブが投入され Submitting a job to PBS... NNNNN.t2xxxxxxx と表示される。
- (注)システムの負荷が高い時は、ジョブの投入に失敗することがある。この場合は、ls で転送したデータ(filenema.gjf)と script.pbs の存在が確認できたら、[qsub]ボタンで再投入する。

filename.gjfの計算は RemoteDir で設定したディレクトリで実行されるが、RemoreDir が空白の

場合は、Linux 機の LoginID のホームディレクトリ/Windows のユーザーID/g09/filename/のディレクトリで実行される。Windows のユーザーID は、画面上の LocalID で表示されている。Windows のユーザーID に漢字が含まれている場合は、下の IDdir で表示される 16 進数を含む文字列で代用される。例えば、"12 千田 AB"は" 1290E79363AB"になる。

Submit Job 画面や Winmostar の画面を終了してもよいが、再度立ち上げた場合は、filename.gjf を呼び出して[ls]することで、計算結果の出力ファイル(filename.log)を確認することができる。

9. [ls]で、その他の出力ファイルの存在も確認できる。winmos.x はジョブの起動を示し、winmos.o と winmos.e はジョブの終了を示している。

[stat-a]等で実行状況を確認する。

- 10. 出力ファイルが確認できたら、[get]する。途中結果を[get]することもできる。 [import]の左のボックスに[get]後の動作(ファイルを開く等)を指定することができる。PC上に一度[get]したファイルは、[get]しなくても[import]で別の動作をすることができる。
- 計算→Import→Animation 等で、様々な図示ができる。MO 表示は、計算→Import→MO,UV,Charge...で行なう。
- 11. ジョブのキャンセルは、[qdel]の横の窓に[stat-a]で確認したジョブ ID を入れて[qdel]を押す。
- (注) 同一ディレクトリでのジョブの二重投入は異常終了する。Windows のユーザーID 等が異なれば、同一ディレクトリにはならないので問題はない。