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23年度 課題種別 新規利用拡大 11INH

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。

昨年度の課題は、Windows アプリとしての機能開発 であったが、これとは別に、Web ブラウザだけで利用で きるWeb版Winmostar(Webmostar)を(株)アンクルと共 同開発している。今年度は、Webmostar からの TSUBAME 利用方法を中心に開発しすることを、主な目 的とした。さらに、実際のユーザーからの意見を取り入 れてWinmostar のジョブ投入機能の改良も行なった。 概要

Winmostar のサブセット版の Webmostar を Java アプ レットで開発し、Webmostar サーバーにインストールし た。Webmostar サーバーから TSUBAME には、SSH で 通信してジョブを投入できるようにした。ユーザーは、ブ ラウザだけで Webmostar を利用することができる。

Winmostar では、社内 LAN や FOCUS 等の様々な環 境に対応できるように、ジョブ投入方法を汎用化した。 結果および考察

現状の Webmostar は、Winmostar のサブセットとなっている。分子軌道表示等は Winmostar を併用する必要があるが、今後の開発では、Webmostar 単独で完結できる利用方法を目指す。

Winmostar については、汎用化によって、Gaussian と GAMESS 以外のアプリケーションへの対応の可能性を 示した。また、Webmostar の出力結果を PC に転送して、 Winmostar で分子軌道等の表示を可能にした。

まとめ、今後の課題

Webmostarと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。

Webmostar と Winmostar の普及と、TSUBAME 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

Webmostar マニュアル

1. Webmostar の立上げ

ブラウザで Webmostar サーバーに接続し、loginID と passwd を入力すると、Webmostar が立ち上がる。

Login Dialog 🛛 🗶	
2 hostname	
211,126,199,28	
loginID	
password	
ОК Сапсеі	va:
∕∂WebMostar V0.1 – Windows Internet Explorer	- ICI ×I
(C) - 11.126.199.28/webmostar/	
」ファイル(F) 編集(E) 表示(V) お気に入り(A) ツール(T) ヘルプ(H)	
」× Google ↓ ☆ 検索・ 👸 二□-ス・ 急上	昇 ・ <u> </u>
🚖 お気に入り 👍 🏉 おすすめサイト 🔹 🖉 Uperade Your Browser 🔹	
Ge WebMostar VD.1	│ 🏠 • 🗟 • 🖃 📾 • ページ(P) • セーフティ(S) • ツール(O) • 🎽
File Edit View Set Calc.	<u>*</u>
V0.178 http://211.126.199.2	
/ temp.com	No rep. n r ching
1-2-0-0 Leng= 1.1000 Ang= 0.00 Dihed= 0.00	
ページが表示されました	▲ 【100% ・ 2010年1月1日日日日日日日日日日日日日日日日日日日日日日日日日日日日日日日日日

2. 分子の構築方法

分子の構築方法は Winmostar と同様に、[Rep.]ボタンでの部品追加や、編集[Edit]メニューの中の、[Add Atom]、[Move Atom]、[Move Group]等が使用できる。ショートカットボタンによる、クリーンや水素付加、原子削除、結合付加等も可能である。

- 3. ファイルの保存
- メニューの File→Save/Save as で入力データを保存する。
- 4. 計算の実行

Calc→Submit Job で Job Maneger 画面が立ち上がる。[sub]の設定を TSUBAME 用にすると、 [sub]ボタンを押した時に、Webmostar サーバーから TSUBAME ヘジョブが転送される。

Ilsubmit	v johs h100 stat
indubrint hup	
SUD AND-94	aussos,queue=Pa,que_SCRIPT= Eustrejob1 ,INP= \$0
ž.	Is -n10 Is cat stkill strm

5. ファイルの入力

メニューの File→Open で様々な形式を読込みできる。Gaussian(log/out)を指定すると、Gaussian の計算結果を読込まれる。

構造最適化の場合はエネルギー図が表示され、[Read]ボタンを押すと最終構造が読み込まれる。

🚳 OptFrame opt.log	
./data/opttest/opt.log	
Reload	Read
-303.826975265	
-303.834446258	STEP11=-303.834446258

計算条件に pop=full gfprint が指定されていた場合は、エネルギー準位等の表示画面が立ち上がる。 [Show]ボタンによる分子軌道の表示機能は、現バージョンではまだ実装されていないので、分子 軌道の表示は、Webmostar サーバーからパソコンに計算結果ファイルを転送して、Winmostar を 利用する必要がある。

🐴 MOFi	rame	opt.log		_1012
./data	a/optte	st/opt.log		
Energy	(au)	-0.25175	1)	
Energy	(eV) [-6.85047]	
Spin				
Alp	ha	Beta		
C	hange	Level		
	U	0		
	LUN	10		
	HON	10		
	Dov	vn		
Show	w MO			
	Sho	w		
1.12	Invest	0.03		
ISO L	ever	0.03		

Winmostar Submit Job 機能マニュアル (TSUBAME-Gaussian 編)

- 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。

💦 Submit	Job
Profile	Copy Rename Delete default Default
Hostname	login-t2ggsic.titeck Queue T2SUB - Crsh timeout 60 port 22 Putty
LoginID	10XXXnnn LocalID: 38000800 key Browse
Passwd	**** View IDdir: 38000800 Test sftp OFF get put
Program	g09 🗾 g09 RemoteDir
Method -	-q S -l select=1:ncpus=12:mem=36gb -l walltime=12:00:00 -W group_list=t2g-10XXX 💽
stat	t-a stat-s stat stat-Q psall ps top group
sen	dsub send 🔽 Delete *.chk sendrun
ls	s qsub run
ge	et 🔽 *.fchk temp 💌 cat Edit log 💌 import
qd	lel kill
	Quit
	
	<u>_</u>
×.	

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.~11.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。 Winmostar Submit Job 機能マニュアル (Program 設定方法)

1. 標準の設定を使う方法

Gaussian の場合は、g03 又はg09 と指定する。

2. ホームディレクトリのスクリプトを使う方法

2. 1 ~/g09.sh と指定すると、ホームディレクトリに用意してあるスクリプトの g09.sh を実行 することになる。

2. 2 GAMESS の場合は、gamess 又は gmsrun と指定する。この場合は、ホームディレクトリ に用意してあるスクリプトの gamess 又は gmsrun を実行する。Method で"00 4 -q L0 -l nodes=1:ppn=4"等と指定することで、最初の"00 4"が gmsrun に与えるパラメータになる。

3 ~/gamess 又は~/gmsrun で、Method に"00 4;-q L0 -l nodes=1:ppn=4"と指定することで、
2 と同様な動作になる。00 4 の後に";"(セミコロン) があることで、00 4 が~/gamess 又は
~/gmsrun に与えられるパラメータになり、";"の後は qsub のパラメータになる。

gmsrun と内容が同じ gmsrun.sh を使う場合は、~/gmsrun.sh とすれば、[get]時の動作で Animation や MO 表示も可能である。

gmsrun と内容が同じ hoge.sh を使う場合は、~/hoge.sh とすれば実行はできるが、[get]時の動作は、*.out 又は*.log の Edit に限定される。

3. Windows 機で作成したテキストファイルを Linux 機にスクリプトとして転送して実行する方法

3.1 g09.txt(n)と指定する。(n)は任意の英数字である。例えば、g09.txt1 と指定すると、
Winmostar のインストールディレクトリ(デフォルトは c:¥winmos3) にある g09.txt1 を Linux
機にスクリプトとして転送して実行することになる。