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

Submit	t Job	13
Profile	New Copy Rename Delete default Default	
Hostname	A Review PBS Review 15 Port 22 Putty	Ĺ
LoginID	* LocalID: 38000800 key Browse	
Passwd	* Test sftp ON	
Program	€03 RemoteDir	
Method		Ŧ
stat	it-a stat-s stat stat-Q psall ps top nodes	
sen	ndsub send 🔽 Delete *.chk sendrun	
ls	s asub run	
	et Fdit log import	
qu		
	clear	
		1
	<u> </u>	

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	12s g09 n New Copy Rename Delete default Default
Hostname	login-t2ggsic.titect Queue T2SUB - Crish timeout 60 port 22 Putty
LoginID	10XXXnnn LocalID: 38000800 key Browse
Passwd	**** View Udir: 38000800 Test_sftp OFF get put
Program	€09 ▼ €09 RemoteDir
Method -	-q S -l select=1:ncpus=12:mem=36gb -l walltime=12:00:00 -W group_list=t2g-10XXX 💽
stat	r-a stat-s stat stat-Q psall ps top group
send	dsub send 🔽 Delete *.chk sendrun
ls	sqsubrun
ge	t 🔽 *.fchk temp 💌cat Edit log 💌 import
qde	el kill
	Quit
×	

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。