

2024/6/10

FMODDスタートアップ講習会

第4回

富岳でのFMO計算の実行

加藤 幸一郎

九州大学 大学院工学研究院 応用化学部門

分子システム科学センター(CMS)

データ駆動イノベーション推進本部

デジタル社会創造研究部門/医療DX推進部門



1

事前準備

1. 「富岳」へのクライアント証明書インストールと接続確認

- r-ccs-cert-issue@ml.riken.jp から届く “Notification of client certificate for the Supercomputer Fugaku” という件名のメールにクライアント証明書が添付
- 以下のスタートアップガイドに沿って富岳へのログイン環境を設定
<https://www.hpci-office.jp/fugaku/user-info/index.html>

2. 必要なソフトウェアのインストール

* 初学者向けということで、ソフトを使って説明します。
慣れている人は、自身の慣れた環境で実施して下さい。
加藤は普段はwsl2でubuntuを使っています。
Macの人は最初からterminalが使えます。

- winSCP
<https://forest.watch.impress.co.jp/library/software/winscp/>
- putty.exe
<https://www.chiark.greenend.org.uk/~sgtatham/putty/latest.html>

WinSCP

WinSCP v5.21 (22/06/15) インストールアプリ

SCP/SFTP/FTPS対応のFTPクライアント

無料 (寄付歓迎)

対応環境: Windows XP/Server 2003からWindows 10/Server 2016まで

WinSCP (ストアアプリ版) v5.19.2.0 インストールアプリ

SCP/SFTP/ダウンロード 対応環境: Win

Package files

You probably want one of these. They include versions of all the PuTTY utilities (except PuTTY itself). (Not sure whether you want the 32-bit or the 64-bit version? Read the [FAQ entry](#).)

MSI ("Windows Installer")

64-bit x86: [putty-8&bit-0.77-installer.msi](#) (or by FTP) (signature)

64-bit Arm: [putty-arm64-0.77-installer.msi](#) (or by FTP) (signature)

32-bit x86: [putty-0.77-installer.msi](#) (or by FTP) (signature)

Unix source archive

.tar.gz: [putty-0.77.tar.gz](#) (or by FTP) (signature)

Alternative binary files

The installer packages above include versions of all of these (except PuTTYtel and PuTTYtel). (Not sure whether you want the 32-bit or the 64-bit version? Read the [FAQ entry](#).)

putty.exe (the SSH and Telnet client itself)

64-bit x86: [putty.exe](#) (or by FTP) (signature)

64-bit Arm: [putty.exe](#) (or by FTP) (signature)

32-bit x86: [putty.exe](#) (or by FTP) (signature)

pscp.exe (an SCP client, i.e. command-line secure file copy)

64-bit x86: [pscp.exe](#) (or by FTP) (signature)

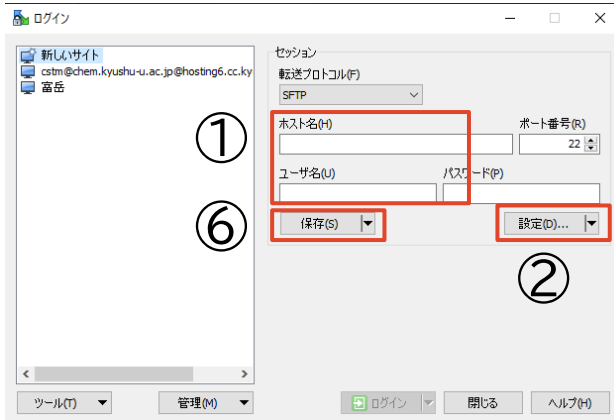
64-bit Arm: [pscp.exe](#) (or by FTP) (signature)

32-bit x86: [pscp.exe](#) (or by FTP) (signature)

事前準備

3. winSCPの設定

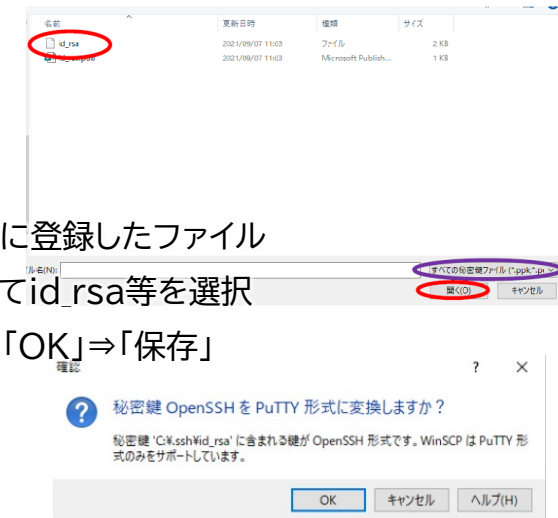
- インストールはダウンロードしたインストーラーを実施するだけでOKです。
- 「富岳」への接続は、以下の様に設定します。



- ① ホスト名とユーザ名を入力
 ホスト名: login.fugaku.r-ccs.riken.jp
 ユーザー名: 自分のユーザー名(例: u 01501)

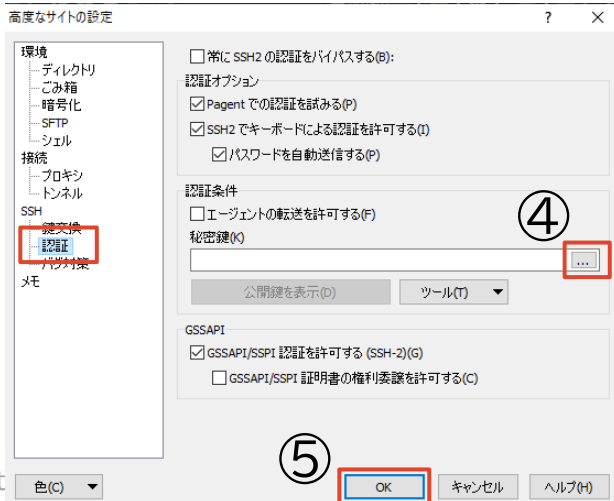
- ② 設定
- ③ 認証

- ④ 秘密鍵ファイルを指定
 前スライドで「富岳」ポータルに登録したファイル
 すべての秘密鍵ファイルにしてid_rsa等を選択
 ファイル変換の確認が出たら「OK」⇒「保存」



- ⑤ OK

- ⑥ 保存
 セッション名は「Fugaku」などご自由に

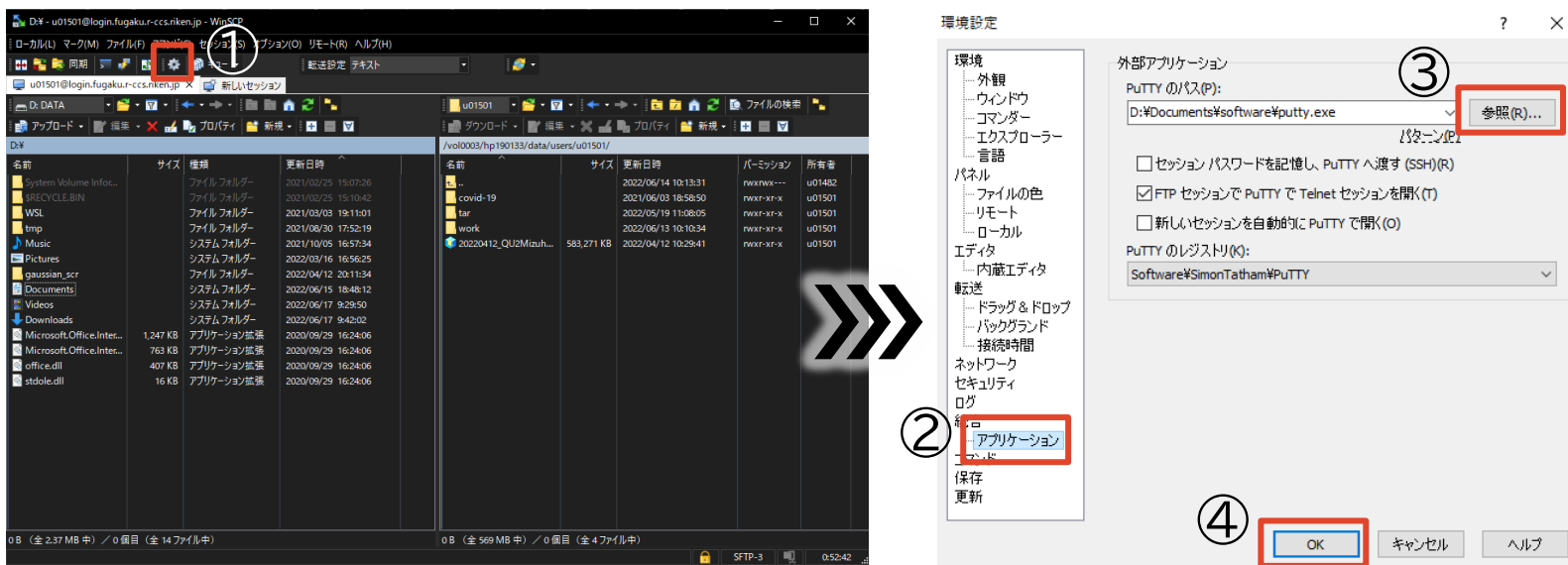


1

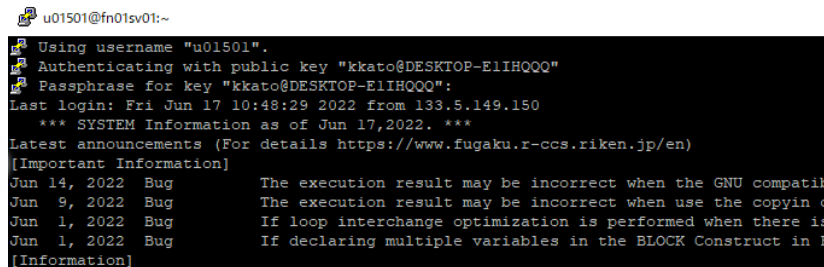
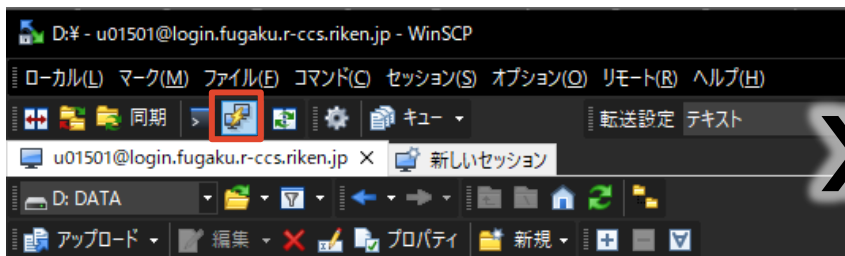
事前準備

3. winSCPの設定

PuTTYとの連携⇒アプリケーション⇒ダウンロードした“putty.exe”の場所を指定



「富岳」に接続後、以下をクリックするとPuTTYが立ち上がる:計算の投入時に使用



事前準備

3. BioStation Viewerのインストール

FMODDのメンバーページからインストーラーのダウンロード⇒インストール



FMO創薬コンソーシアム

- ホーム
- 研究内容
- メンバー
- イベント情報
- 研究成果
- 論文リスト
- 入会案内・お問い合わせ
- リンク



メンバーページ新規登録



メンバー限定掲示板

ホーム > メンバー専用ページ

メンバー専用ページ

- FMO データベース: FMO計算結果を格納したデータベースです。
 - [FMO データベース](#)
 - [FMOデータベース \(非公開版\)](#)
- BioStationViewer
 - [利用方法](#)
 - [安定版 \(Open 1.0 rev23_018_002\) インストーラ](#)
 - [最新版 \(Open 1.0 rev23_019_b003\) インストーラ](#)
- マニュアル類: FMO 計算に関わるマニュアル
- 関連ツール: FMO 計算結果の解析やデータ処理など
- [チュートリアル&セミナー](#): FMO 計算に関するチュートリアルやセミナーなどの公開資料
- [FAQ](#): よくある質問やトラブルシューティング
- [FMO 創薬コンソーシアム メンバー専用掲示板](#) (登録ユーザーのみ閲覧&投稿可能)
- [謝辞の記載方法](#): 論文や学会発表の際には記載してください

2

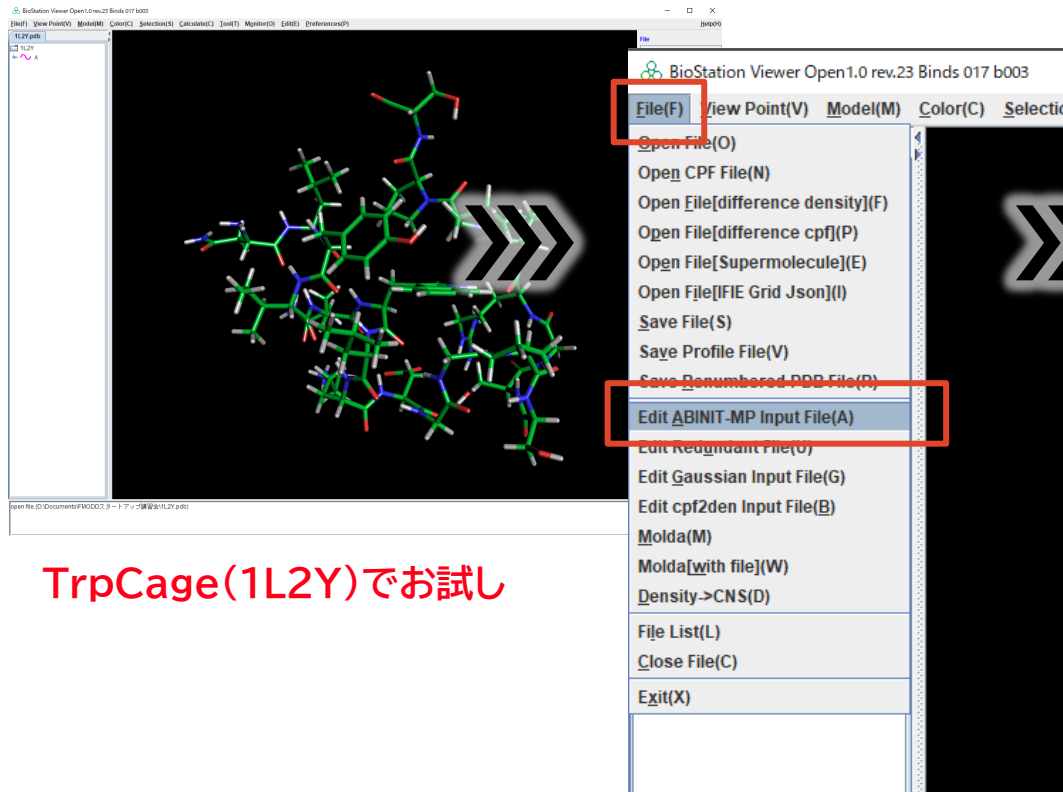
ABINIT-MPの入力ファイル作成

abinit-mp job file

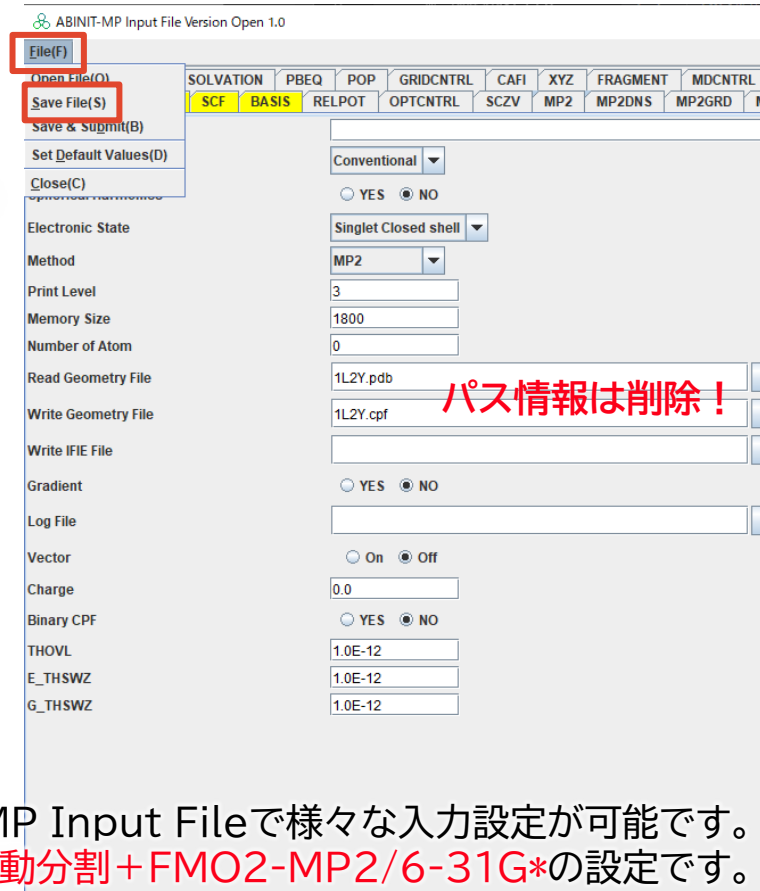
①BioStation ViewerでFile⇒Openもしくはファイルのドラッグ&ドロップ

②File⇒Edit ABINIT-MP Input File

③File⇒Save File(1L2Y.ajfなど)



TrpCage(1L2Y)でお試し



Edit ABINIT-MP Input Fileで様々な入力設定が可能です。デフォルトでは、自動分割+FMO2-MP2/6-31G*の設定です。

2

ABINIT-MPの入力ファイル作成

作成したajfの中身を見てみよう(メモ帳など)

```
&CNTRL
ElecState='S1'
Method='MP2'
Nprint=3
Memory=1800
Natom=0
ReadGeom='1L2Y.pdb'
WriteGeom='1L2Y.cpf'
Gradient='NO'
Vector='OFF'
CPFBIN='NO'
THOVL=1.0E-12
E_THSWZ=1.0E-12
G_THSWZ=1.0E-12
/

&FMOCNTRL
FMO='ON'
NBody=2
AutoFrag='ON'
FragSizeResidue=1
FragSizeNucleotide='+base'
FragSizeAminoacid='+amino'
Frag_Carbon='sp3'
LMOTYP='ANO'
Laoc=0.0
Lptc=2.0
esp_ptc_multipole='NO'
Ldimer=2.0
Dimer_es_multipole='NO'
NP=1
MaxSCCcyc=250
MaxSCCenergy=5.0E-7
/
```

```
&SCF
MaxSCFenergy=1.0E-8
MaxSCFdensity=1.0E-6
MaxSCFcyc=150
DIISTYPE='C2_OLD'
THINTEG=1.0E-12
IFCD='NO'
/

&BASIS
BasisSet='6-31G*'
DiffuseOn='NO'
/

&RELPO
CHKRPOT='NO'
/

&OPTCNTRL
OPT='OFF'
/

&MFMO
/

&SCZV
DimerResponseTerm='NO'
/

&XUFF
/
```

```
&MP2
NP_MP2_IJ=1
NP_MP2_S=0
MemoryMP2=0
IFSCS='YES'
OSSCAL=1.0
PSSCAL=1.0
NBODY=2
CHKFZC='YES'
LPRINT=2
/

&MP2DNS
/

&MP2GRD
/

&MP3
/

&LMP2
/

&LRD
/

&DFT
/

&ANALYSIS
PIEDA='NO'
PrintNeighbor='NO'
/
```

```
&BSSE
CP='OFF'
/

&FRAGPAIR
/

&SOLVATION
EFFECT='OFF'
/

&PBEQ
MAXITR=1000
JDGCNV='RMS'
THRCNV=1.0E-5
/

&POP
ESPFIT='OFF'
NBOANL='ON'
ESP_PTC='MK'
/

&GRIDCNTRL
GRID='NO'
/

&MCP
/
```

```
&CAFI
METLOC='PIPE'
IFLOC='OCC'
CHKFZC='NO'
LPRINT=2
/

&GF2
/

&CCPT
/

&XYZ
/

&FRAGMENT
/

&MDCNTRL
MD='OFF'
/

&VEL
/

&NHC
/

&TYPFRAG
/
```


2

ABINIT-MPの入力ファイル作成

作成したajfの中身を見てみよう(メモ帳など)

```
&CNTRL
ElecState='S1'
Method='MP2'
Nprint=3
Memory=1800
Natom=0
ReadGeom='1L2Y.pdb'
WriteGeom='1L2Y.cpf'
Gradient='NO'
Vector='OFF'
CPFBIN='NO'
THOVL=1.0E-12
E_THSWZ=1.0E-12
G_THSWZ=1.0E-12
/

&FMOCNTRL
FMO='ON'
NBody=2
AutoFrag='ON'
FragSizeResidue=1
FragSizeNucleotide='+base'
FragSizeAminoacid='+amino'
Frag_Carbon='sp3'
LMOTYP='ANO'
Laoc=0.0
Lptc=2.0
esp_ptc_multipole='NO'
Ldimer=2.0
Dimer_es_multipole='NO'
NP=1
MaxSCCccyc=250
MaxSCCenergy=5.0E-7
/
```

- ◆ &OO から / まだが1つのカタマリ：namelist
 - &CNTRLから/まだが“コントロール ネームリスト”
 - &FMOCNTRLから/まだが“FMOコントロール ネームリスト”

- ◆ 各namelistの個々の変数の説明はマニュアル参照

The screenshot shows the FMO Consortium website. The header includes the logo and the text "FMO創薬コンソーシアム". The left sidebar contains navigation links: ホーム, 研究内容, メンバー, イベント情報, 研究成果, 論文リスト, 入会案内・お問い合わせ, リンク, ログアウト. The main content area is titled "マニュアル類" and lists various manuals. A red box highlights the "ABINIT-MP マニュアル" section, which includes links for the latest version (Open Ver.1 Rev.23Q2), Ver. 7.0, and the cpf file format. Other manuals listed include BioStation, FMO Database, and calculation methods.

2

ABINIT-MPの入力ファイル作成

作成したajfの中身を見てみよう(メモ帳など)

```
&CNTRL
ElecState='S1'
Method='MP2'
Nprint=3
Memory=1800
Natom=0
ReadGeom='1L2Y.pdb'
WriteGeom='1L2Y.cpf'
Gradient='NO'
Vector='OFF'
CPFBIN='NO'
THOVL=1.0E-12
E_THSWZ=1.0E-12
G_THSWZ=1.0E-12
/
```

```
&FMOCNTRL
FMO='ON'
NBody=2
AutoFrag='ON'
FragSizeResidue=1
FragSizeNucleotide='+base'
FragSizeAminoacid='+amino'
Frag_Carbon='sp3'
LMOTYP='ANO'
Laoc=0.0
Lptc=2.0
esp_ptc_multipole='NO'
Ldimer=2.0
Dimer_es_multipole='NO'
NP=1
MaxSCCcyc=250
MaxSCCenergy=5.0E-7
/
```

```
&SCF
MaxSCFenergy=1.0E-8
MaxSCFdensity=1.0E-6
MaxSCFcyc=150
DIISTYPE='C2_OLD'
THINTEG=1.0E-12
IFCD='NO'
/
```

```
&BASIS
BasisSet='6-31G*'
DiffuseOn='NO'
/
```

```
&RELPOUT
CHKRPOT='NO'
/
```

```
&OPTCNTRL
OPT='OFF'
/
```

```
&MFMO
/
```

```
&SCZV
DimerResponseTerm='NO'
/
```

```
&XUFF
/
```

```
&MP2
NP_MP2_IJ=1
NP_MP2_S=0
MemoryMP2=0
IFSCS='YES'
OSSCAL=1.0
PSSCAL=1.0
NBODY=2
CHKFZC='YES'
LPRINT=2
/
```

```
&MP2DNS
/
```

```
&MP2GRD
/
```

```
&MP3
/
```

```
&LMP2
/
```

```
&LRD
/
```

```
&DFT
/
```

```
&ANALYSIS
PIEDA='NO'
PrintNeighbor='NO'
/
```

```
&BSSE
CP='OFF'
/
&FRAGPAIR
/
&SOLVATION
EFFECT='OFF'
/
&PBEQ
MAXITR=1000
JDGCNV='RMS'
THRCNV=1.0E-5
/
```

```
&POP
ESPFIT='OFF'
NBOANL='ON'
ESP_PTC='MK'
/
```

```
&GRIDCNTRL
GRID='NO'
/
```

```
&MCP
/
```

```
&CAFI
METLOC='PIPE'
IFLOC='OCC'
CHKFZC='NO'
LPRINT=2
/
```

```
&GF2
/
```

```
&CCPT
/
```

```
&XYZ
/
```

```
&FRAGMENT
/
```

```
&MDCNTRL
MD='OFF'
/
```

```
&VEL
/
```

```
&NHC
/
```

```
&TYPFRAG
/
```

2

ABINIT-MPの入力ファイル作成

作成したajfの中身を見てみよう(メモ帳など)

```
&CNTRL
ElecState='S1'
Method='MP2'
Nprint=3
Memory=1800
Natom=0
ReadGeom='1L2Y.pdb'
WriteGeom='1L2Y.cpf'
Gradient='NO'
Vector='OFF'
CPFBIN='NO'
THOVL=1.0E-12
E_THSWZ=1.0E-12
G_THSWZ=1.0E-12
/
```

HF or MP2 (他にもMP2Dとか)

計算で使うメモリを指定:後で詳しく説明します

読み込むpdb, 書き出すcpfの名前を指定

```
&FMOCNTRL
FMO='ON'
NBody=2
AutoFrag='ON'
FragSizeResidue=1
FragSizeNucleotide='+base'
FragSizeAminoacid='+amino'
Frag_Carbon='sp3'
LMOTYP='ANO'
Laoc=0.0
Lptc=2.0
esp_ptc_multipole='NO'
Ldimer=2.0
Dimer_es_multipole='NO'
NP=1
MaxSCCcyc=250
MaxSCCenergy=5.0E-7
/
```

ON or OFF

2 or 3 or 4(通常は2でよい)

ON or OFF
OFFの場合には
フラグメント分割情報を
&FRAGMENTに記載

1つのフラグメントに割り当てるコア数を指定

富岳の場合には1でよい。

ローカル計算機でmpi並列の場合には、計算機に合わせて指定

2

ABINIT-MPの入力ファイル作成

作成したajfの中身を見てみよう(メモ帳など)

```
&SCF
MaxSCFenergy=1.0E-8
MaxSCFdensity=1.0E-6
MaxSCFcyc=150
DIISTYPE='C2_OLD'
THINTEG=1.0E-12
IFCD='NO'
/
```

```
&BASIS
BasisSet='6-31G*'
DiffuseOn='NO'
/
```

```
&RELPO
CHKRPOT='NO'
/
```

```
&OPTCNTRL
OPT='OFF'
/
```

```
&MFMO
/
```

```
&SCZV
DimerResponseTerm='NO'
/
```

```
&XUFF
/
```

基底関数を指定
使用可能な種類はマニュアル参照

```
&MP2
NP_MP2_IJ=1
NP_MP2_S=0
MemoryMP2=0
IFSCS='YES'
OSSCAL=1.0
PSSCAL=1.0
NBOY=2
CHKFZC='YES'
LPRINT=2
/
```

```
&MP2DNS
/
```

```
&MP2GRD
/
```

```
&MP3
/
```

```
&LMP2
/
```

```
&LRD
/
```

```
&DFT
/
```

```
&ANALYSIS
PIEDA='NO'
PrintNeighbor='NO'
/
```

YES or NO
YESになっていることを確認。

3

「富岳」へのジョブ投入ファイルの準備

- 「富岳」ではジョブ管理システムによって多数ユーザーからのジョブを管理
- ジョブ管理システムへジョブを投入するためのスクリプトファイルが必要

```
#!/bin/bash
#----- pjsub option -----#
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=12"
#PJM --mpi "proc=24,max-proc-per-node=2"
#PJM -L "elapse=00:20:00"
#PJM -g "hp190133"
#PJM -L freq=2200,eco_state=2
#PJM -j

module switch lang/tcsds-1.2.39

export OMP_NUM_THREADS=24
export OMP_STACKSIZE=256M

#----- ABINIT-MP option -----#
ABINIT_DIR='/vol0003/hp190133/data/programs/ABINIT-MP/open/rev23bindv1-20230712/lang-tcsds-1.2.39'
BINARY_NAME=abinitmp_smp
#BINARY_NAME=abinitmp_smp_fint # Znを 6-31G*で計算したいときにのみ指定

#ここに ajfの 拡張子の 前までを入力
FILE_NAME=2rgp_tether05

AJF_NAME=${FILE_NAME}.ajf
OUT_NAME=${FILE_NAME}.log
ERR_NAME=${FILE_NAME}.err

rm -f $OUT_NAME
#----- Program execution -----#
${ABINIT_DIR}/mkinp_bindsv1.py < ${AJF_NAME} > ${FILE_NAME}.inp
mpiexec -stdin ${FILE_NAME}.inp -stdout-proc ${OUT_NAME} -stderr-proc ${ERR_NAME} ${ABINIT_DIR}/${BINARY_NAME}
mv -f ${OUT_NAME}.1.0 ${OUT_NAME}
cat ${ERR_NAME}.1.* > ${ERR_NAME} 2>/dev/null
rm -f ${ERR_NAME}.1.*
rm -f ${OUT_NAME}.1.*
```

runsh-template.shの中身

計算に必要なリソースを指定

使用するABINIT-MPを指定

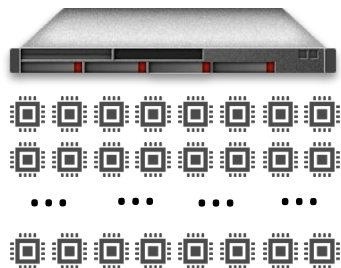
計算対象を指定

3

「富岳」へのジョブ投入ファイルの準備

● 並列設定およびメモリ指定方法

富岳全体では 414 Rack !



富岳のノードあたりの仕様

- ・搭載コア数:48コア
- ・搭載メモリ:32GB

※メモリは搭載量すべてを振り分けられるわけではない点に注意。

以下の単位がシステム上効率が良いとされている

16 node = 1 BoB

48 node = 1 Shelf

384 node = 1 Rack

```
#!/bin/bash
#----- pjsub option -----#
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=12"
#PJM --mpi "proc=24,max-proc-per-node=2"
#PJM -L "elapsed=00:20:00"
#PJM -g "hp190133"
#PJM -L freq=2200,eco_state=2
#PJM -j
```

nodeで使用するノード数を指定
 $proc = node * max\text{-}proc\text{-}per\text{-}node$

```
module switch lang/tcsds-1.2.39
```

```
export OMP_NUM_THREADS=24
export OMP_STACKSIZE=256M
```

$OMP_NUM_THREADS = 48 / max\text{-}proc\text{-}per\text{-}node$

メモリ指定

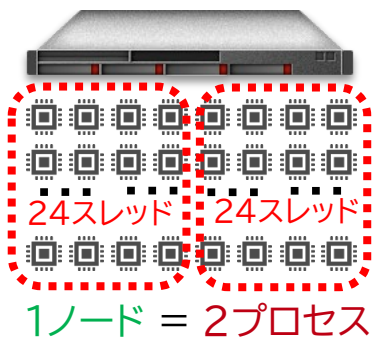
- **AJFファイル内**のメモリ設定を以下の式に従って書き換える
 $Memory = 12000 \sim 16000 / max\text{-}proc\text{-}per\text{-}node$
- OMP_STACKSIZEは256Mで固定

3

「富岳」へのジョブ投入ファイルの準備

● 並列設定およびメモリ指定方法

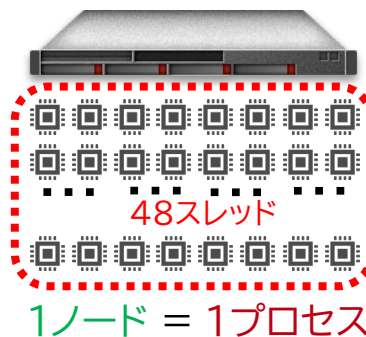
ベース設定①(1ノードあたり2プロセス)



♠ 想定される状況 ♠

- すべてのフラグメントが同程度のサイズとして扱え、メモリ要求量が大きくない場合
- タンパク質のみや、小さめのリガンドを含む場合など

ベース設定②(1ノードあたり1プロセス)



♠ 想定される状況 ♠

- 大きなリガンドを1フラグメントとして扱う必要があり、メモリ要求量が大きい場合
- 大きなリガンドが分割できない場合など

ジョブスクリプト

```
#----- psub option -----#
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=16"
#PJM --mpi "proc=32,max-proc-per-node=2"
#PJM -L "elapsed=00:30:00"
#PJM -g hp190133
#PJM -j
```

```
export OMP_NUM_THREADS=24
export OMP_STACKSIZE=256M
```

AJFファイル

```
&CNTRL
Memory=8000
```

ジョブスクリプト

```
#----- psub option -----#
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=16"
#PJM --mpi "proc=16,max-proc-per-node=1"
#PJM -L "elapsed=00:30:00"
#PJM -g hp190133
#PJM -j
```

```
export OMP_NUM_THREADS=48
export OMP_STACKSIZE=256M
```

AJFファイル

```
&CNTRL
Memory=12000
```


3

「富岳」へのジョブ投入ファイルの準備

- ベース設定①(1ノードあたり2プロセス)でファイルを書き換えよう

```
#! /bin/bash

#----- pjsub option -----#
#PBS -q "program-small"
#PBS -L "node=16"
#PBS --mpi "proc=32,max-proc-per-node=2"
#PBS -L "elapsed=01:00:00"
#PBS -S /bin/bash
#PBS -j

export OMP_NUM_THREADS=24
export OMP_STACKSIZE=256M

#----- ABINIT-MP option -----#
ABINIT_DIR=/data/hp190133/programs/ABINIT-MP/open/ver1rev23q2/lang-tcsds-1.2.34
BINARY_NAME=abinitmp_smp

FILE_NAME=1L2Y

AJF_NAME=${FILE_NAME}.ajf
OUT_NAME=${FILE_NAME}.log
ERR_NAME=${FILE_NAME}.err

#----- Program execution -----#
${ABINIT_DIR}/mkinp_openver1rev20.py < ${AJF_NAME} > ${FILE_NAME}.inp
mpiexec -stdin ${FILE_NAME}.inp -stdout ${OUT_NAME} -stderr ${ERR_NAME} ${ABINIT_DIR}/${BINARY_NAME}
```

```
&CNTRL
ElecState='S1'
Method='MP2'
Nprint=3
Memory=8000
Natom=0
ReadGeom='1L2Y.pdb'
WriteGeom='1L2Y.cpf'
Gradient='NO'
Vector='OFF'
CPFBIN='NO'
THOVL=1.0E-12
E_THSWZ=1.0E-12
G_THSWZ=1.0E-12
/
```

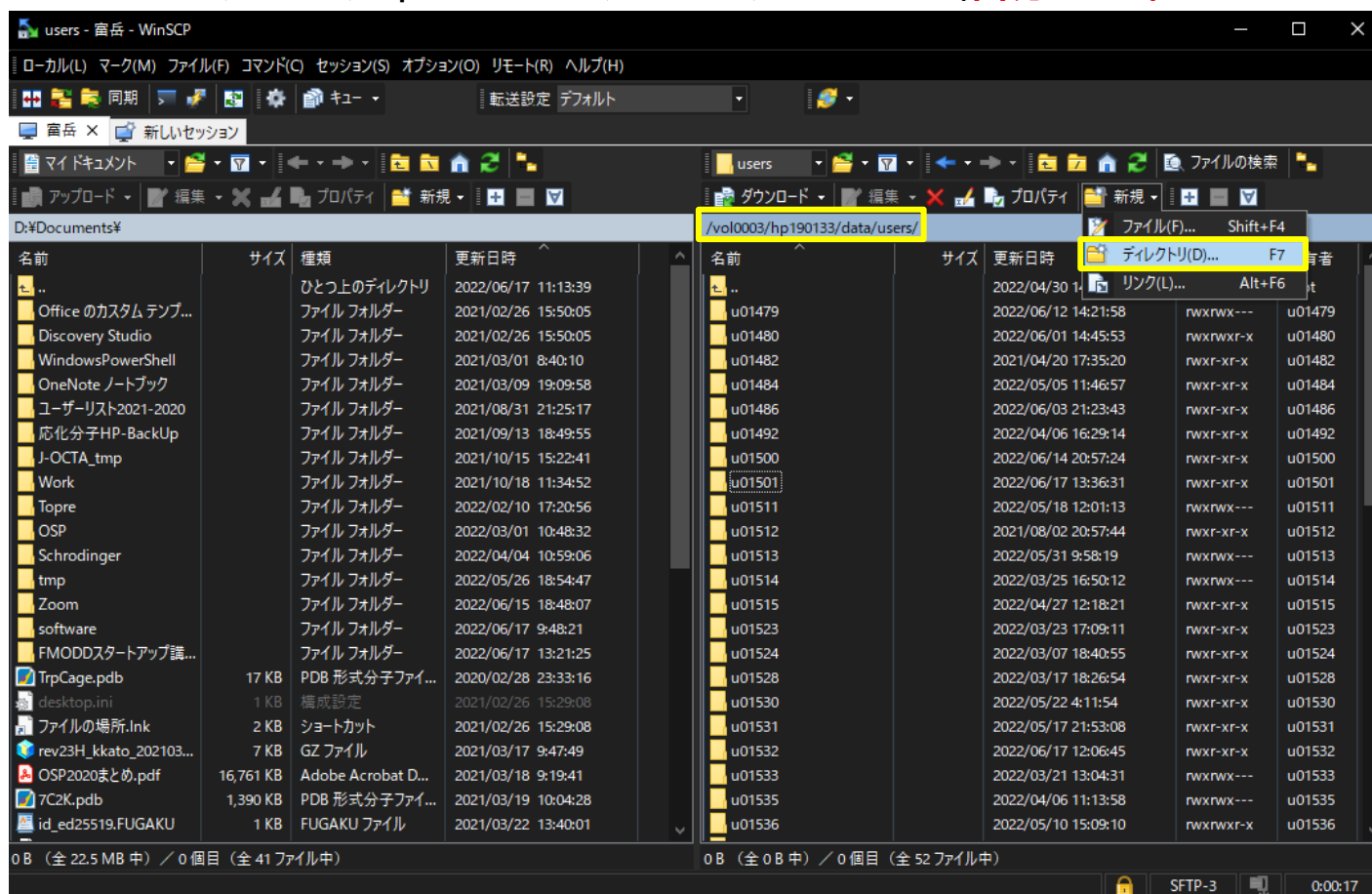
- elapseは最大72時間です。
- この指定時間が短いほど、計算待ち時間が短くなります。

4

「富岳」へのファイル転送とジョブ投入

- winSCPでファイル転送: **ホームフォルダでは計算しない！！**
⇒ **計算用のディレクトリを最初に作る！！**

/data/hp190133/users/u01501(自分のID)



4

「富岳」へのファイル転送とジョブ投入

- winSCPでファイル転送: **ホームフォルダでは計算しない！！**

The screenshot displays the WinSCP interface with two panels. The left panel shows the local PC's file system (D:\Documents\FMODDスタートアップ講習会), and the right panel shows the remote server's file system (/vol0003/hp190133/data/users/u01501/). A dialog box titled 'ディレクトリを開く' (Open Directory) is open, showing the path '/vol0003/hp190133/data/users/u01501' and a red text prompt '最後は自分のID' (Finally, your own ID).

名前	サイズ	種類	更新日時
ひとつ上のディレクトリ			2022/06/17 13:21:25
4J0P.pdb	543 KB	PDB 形式分子ファイ...	2022/06/17 11:10:29
1L2Y.pdb	25 KB	PDB 形式分子ファイ...	2022/06/17 11:12:30
1L2Y.ajf~	2 KB	AJF~ ファイル	2022/06/17 11:34:59
1L2Y.sh~	1 KB	SH~ ファイル	2022/06/17 12:09:25
1L2Y.sh	1 KB	SH ファイル	2022/06/17 13:21:02
1L2Y.ajf	2 KB	AJF ファイル	2022/06/17 13:21:25

名前	サイズ	更新日時	パーミッション	所有者
..		2022/06/14 10:13:31	rw-rw-r--	u01482
covid-19		2021/06/03 18:58:50	rw-r--r-x	u01501
tar		2022/05/19 11:08:05	rw-r--r-x	u01501
work		2022/06/13 10:10:34	rw-r--r-x	u01501
20220412_QU2Mizuh...	583,271 KB	2022/06/13 10:10:34		u01501

Dialog Box: ディレクトリを開く

最後は自分のID

ディレクトリを開く(O)

/vol0003/hp190133/data/users/u01501

セッション ブックマーク 共有ブックマーク

/data/hp190133/users/u01501

追加(A) 削除(R) 上へ(U) 下へ(D)

位置情報の設定(L)... 開く キャンセル ヘルプ(H)

4

「富岳」へのファイル転送とジョブ投入

● winSCPでファイル転送

The screenshot shows the WinSCP interface with two panes. The left pane shows the local file system at 'D:\Documents\FMODDスタートアップ講習会'. The right pane shows the remote file system at '/vol0003/hp190133/data/users/u01501/'.

名前	サイズ	種類	更新日時
..		ひとつ上のディレクトリ	2022/06/17 13:21:25
4J0pdb	543 KB	PDB 形式分子ファイ...	2022/06/17 11:10:29
1L2Y.pdb	25 KB	PDB 形式分子ファイ...	2022/06/17 11:12:30
1L2Y.ajf~	2 KB	AJF~ ファイル	2022/06/17 11:34:59
1L2Y.sh~	1 KB	SH ファイル	2022/06/17 12:09:25
1L2Y.sh	1 KB	SH ファイル	2022/06/17 13:21:02
1L2Y.ajf	2 KB	AJF ファイル	2022/06/17 13:21:25

名前	サイズ	更新日時	権限	所有者
..		2022/06/14 11:10:25		
covid-19		2021/06/03 18:58:50	rwxr-xr-x	u01501
tar		2022/05/19 11:08:05	rwxr-xr-x	u01501
Test		2022/06/17 13:36:31	rwxr-xr-x	u01501
work		2022/06/13 10:10:34	rwxr-xr-x	u01501
20220412_QU2Mizuh...	583,271 KB	2022/04/12 10:29:41	rwxr-xr-x	u01501

Annotations in the image:

- ①: Transfer mode set to 'Text' in the top toolbar.
- ②: A new directory 'Test' is created in the remote file system.
- ③: Files '4J0pdb', '1L2Y.pdb', '1L2Y.ajf~', '1L2Y.sh~', '1L2Y.sh', and '1L2Y.ajf' are selected in the local pane.
- ④: The 'Test' directory is double-clicked in the remote pane.

①転送設定を“テキスト”にする

②計算用のディレクトリを作る(例えばTest)

③計算に必要なファイルを送る(ajf, pdb, sh)

④Testディレクトリにダブルクリックして入る

4

「富岳」へのファイル転送とジョブ投入

● PuTTYを起動してジョブ投入

The image shows two overlapping windows. The left window is WinSCP, displaying a file list for the local directory 'D:\Documents\FMODDスタートアップ講習会'. The right window is a PuTTY terminal session connected to 'u01501@fn01sv03:vol0003/hp190133/data/users/u01501/Test'.

WinSCP File List:

名前	サイズ	種類	更新日時
ひとつ上のディレクトリ			2022/06/17 13:21:25
Al09.pdb	543 KB	PDB 形式分子ファイ...	2022/06/17 11:10:29
1L2Y.pdb	25 KB	PDB 形式分子ファイ...	2022/06/17 11:12:30
1L2Y.ajf~	2 KB	AJF-ファイル	2022/06/17 11:34:59
1L2Y.sh~	1 KB	SH-ファイル	2022/06/17 12:09:25
1L2Y.sh	1 KB	SH ファイル	2022/06/17 13:21:02
1L2Y.ajf	2 KB	AJF ファイル	2022/06/17 13:21:25

PuTTY Terminal Output:

```

u01501@fn01sv03:vol0003/hp190133/data/users/u01501/Test
Using username "u01501".
Authenticating with public key "kkato@DESKTOP-E1IHQQQ"
Passphrase for key "kkato@DESKTOP-E1IHQQQ":
Last login: Tue Feb  8 14:24:39 2022 from 133.5.149.150
*** SYSTEM Information as of Jun 17,2022. ***
Latest announcements (For details https://www.fugaku.r-ccs.riken.jp/en)
[Important Information]
Jun 14, 2022 Bug          The execution result may be incorrect when the GNU compatible option
Jun  9, 2022 Bug          The execution result may be incorrect when use the copyin clause in
Jun  1, 2022 Bug          If loop interchange optimization is performed when there is a loop i
ult may be incorrect.
Jun  1, 2022 Bug          If declaring multiple variables in the BLOCK Construct in Fortran,
errupted abnormally.
[Information]
Jun 16, 2022 Failure     Occurrence of inaccessibility and poor response at login nodes and
Jun 16, 2022 Failure     Occurrence of inaccessibility and poor response at login nodes and
Jun 15, 2022 Operation   System Maintenance information [2022/10]

The schedule of operations for large scale jobs
schedule      :06/21 (Tue) 15:00 - 06/24 (Fri) 15:00 (JST)

[Resource Usage(%)]          [Disk Usage(%)] /Disk i-node(%)
Total Periodl                voll    vol2    vol3    vol4    vol5    vol6
hp190133      10      19          0/  -   -/  -   11/ 15  -/  -   -/  -

login3$ cd /vol0003/hp190133/data/users/u01501/Test/
login3$ pwd
/vol0003/hp190133/data/users/u01501/Test
login3$ ls
1L2Y.ajf 1L2Y.pdb 1L2Y.sh
login3$ █

```

Terminal Command Explanations:

- `cd` : ディレクトリの移動コマンド
- `pwd` : 現ディレクトリの表示
- `ls` : 現ディレクトリのファイル一覧表示

4

「富岳」へのファイル転送とジョブ投入

● PuTTYを起動してジョブ投入

```
login3$ cd /vol0003/hpl90133/data/users/u01501/Test/
login3$ pwd
/vol0003/hpl90133/data/users/u01501/Test
login3$ ls
1L2Y.ajf 1L2Y.pdb 1L2Y.sh
login3$ pjsub 1L2Y.sh ← pjsub : ジョブ投入コマンド
[INFO] PJM 0000 pjsub Job 15521733 submitted.
login3$ pjstat ← pjstat : ジョブ状態確認コマンド
JOB_ID      JOB_NAME    MD ST  USER      START_DATE      ELAPSE_LIM      NODE_REQUIRE    VNODE    CORE  V_MEM
15521733    J1L2Y.sh    NM QUE u01501     -                0001:00:00      16              -        -    -
login3$
```

↓一定時間経過

```
login3$ pjstat
JOB_ID      JOB_NAME    MD ST  USER      START_DATE      ELAPSE_LIM      NODE_REQUIRE    VNODE    CORE  V_MEM
15521733    J1L2Y.sh    NM QUE u01501     (06/18 20:42) < 0001:00:00      16              -        -    -
```

↓

QUEがRUNになったら計算実行中

↓

pjstatで何も表示されなくなったら計算終了

- ✓ 計算結果は1L2Y.logに出力される
- ✓ logファイルの末尾に“ABINIT-MP DONE”の記載があれば第一段階クリア
- ✓ cpfをダウンロードして解析

```
-----
ABINIT-MP - Open Ver. 1 Rev. 23Q2 / 20200603 (SMP)
-----

Ab initio Fragment Molecular Orbital (FMO) Method Program

Open Series: Rev. 5 (December 2016), Rev. 10 (February 2018),
              Rev. 15 (March 2019), Rev. 20 (March 2020)
```

```
Total time =          10620.3 seconds

## Memory allocation report (in bytes)
Rank           =                0
Reserved memory / node =    6291456000
Max. allocated memory =    129242848
Non-deallocated memory =                0

-----
ABINIT-MP DONE
-----
2022/06/13 20:58:53
```


4

「富岳」へのファイル転送とジョブ投入

● その他の重要コマンド

◆ ジョブの削除 : pjdel [JOB_ID]

下の画像のジョブを削除したい場合は pjdel 15521733

```
login3$ pjstat
JOB_ID   JOB_NAME   MD ST  USER      START_DATE      ELAPSE_LIM      NODE_REQUIRE    VNODE    CORE  V_MEM
15521733 J1L2Y.sh   NM QUE u01501    (06/18 20:42)< 0001:00:00      16         -      -      -
```

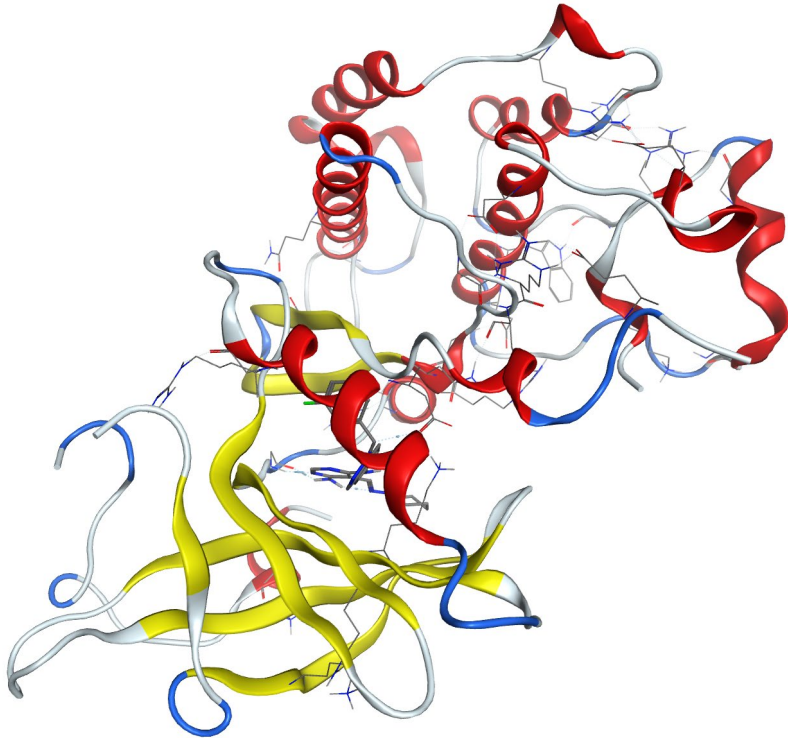
◆ グループ全体の計算資源(ノード時間積)利用状況確認 : accountj hp190133 -E -r 1 -h

```
login3$ accountj hp190133 -E -r 1 -h
COLLECTDATE : 2022-06-17 17:12:47   unit[Node Hour]
*-----[ THEME ]-----*
THEME                LIMIT                USAGE                RUNNING              AVAILABLE            USAGE_RATE
Y22HP31              2,777,777,777,777    4,897,749            386,687 2,777,772,493,340 0.000%
[20220401-20230331]
*-----[ THEME_PERIOD ]-----*
PERIOD              LIMIT                USAGE                ADVANCE              AVAILABLE            USAGE_TOTAL
20220401-20220930   1 1,388,888,888,888    4,897,749            0 1,388,883,991,139      4,897,749
20221001-20230331   2 1,388,888,888,888    ---                  ---                  ---                  ---
*-----[ SUBTHEME ]-----*
SUBTHEME            PARENT              LIMIT                USAGE                RUNNING              AVAILABLE            USAGE_RATE
hp220143            Y22HP31             6,800,000            649,309              171,080              5,979,610           9.549%
*-----[ SUBTHEME_PERIOD ]-----*
PERIOD              LIMIT                USAGE                ADVANCE              AVAILABLE            USAGE_TOTAL
hp220143            1 3,400,000            649,309              0 2,750,690              649,309
hp220143            2 3,400,000            ---                  ---                  ---                  ---
*-----[ GROUP ]-----*
GROUP              PARENT              LIMIT                USAGE                RUNNING              AVAILABLE            USAGE_RATE
hp190133            hp220143            unlimited            649,309              171,080              ---                  ---
*-----[ RESOURCE_GROUP ]-----*
RESOURCE_GROUP     LIMIT                USAGE                RUNNING              AVAILABLE            USAGE_RATE
```

4

「富岳」へのファイル転送とジョブ投入

- 2RGP(第2回でモデリング)でもやってみよう



1. BioStation Viewerで読み込み
ajfファイルの作成
2. メモ帳等でajfファイルの確認
3. ジョブ投入スクリプトファイルの編集
4. 「富岳」へのファイル転送
(2, 3は「富岳」で実施しても○)
5. 「富岳」での計算ディレクトリ作成
6. 「富岳」での計算ジョブ投入

5

「富岳」使用上の注意

● 「富岳」は従量課金です！！

- ノード時間積(使用したnode数×使用した時間)でカウントされます。
⇒ 48ノードで24時間計算したら1,152ノード時間(NH)
- FMODDは半期340万NH×2期=680万NHで採択されています。
- 自分の利用料を意識し、WGリーダー・指導教員と相談して計画的に使って下さい。

● “rscgrp=small” 以外は絶対に使わない！！

- rscgrp(リソースグループ)毎に1ジョブで使用可能なリソース上限が決まっています。
- smallではnode=384が最大です。
- FMODDの計算において、384 node以上が必要になる事はあり得ません。
- largeでの計算は数分で数百万円相当のリソース消費を意味することを肝に銘じて下さい。

● 同時に大量のジョブを投げない！！

- pjsubでジョブを投入した瞬間、指定node数×指定時間分のリソースが仮消費されます。
- 指定時間を長めに設定していたりすると、大量のリソースが仮消費されて、他のメンバーが計算を投入できなくなることもあるので、ジョブの同時投入数には気を付けて下さい。

5

「富岳」使用上の注意

スーパーコンピュータ「富岳」

Japanese
English



運用状況

通常運用中
「富岳」運用ステータス
運用スケジュール

利用者支援

利用者ポータル

成果発表
申請
利用に関して
お問い合わせ

u01501

- Access history
- Disk accounting
- Job accounting
 - term
 - monthly
- Job status
- Job status transition history
- Publickey registration
- Summary of Resource Usage (beta)
- Job Statistics

Fugaku User Portal

Job accounting

USER

Project: HPCIを活用したFMO創業プラットフォーム

Download

グループ全体の使用量

Term: 2022-04-01 - 2023-03-31	Term: 2022-04-01 - 2022-09-30	Term: 2022-10-01 - 2023-03-31
Usage Limit	Usage Limit	Usage Limit
649,309 NH 6,800,000 NH	649,309 NH 3,400,000 NH	- NH 3,400,000 NH
- WH -	- WH -	- WH -
16605 JOB -	16605 JOB -	0 JOB -

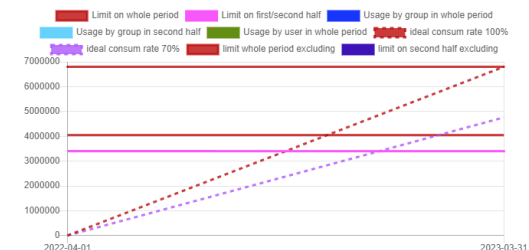
Computational Resource Usage By Resource Group

Resource Group	Usage[NH]	Usage[WH]	Number of Jobs
small	649,307	-	16,596
int	1	-	9
small-s1	0	-	0

Computational Resource Usage By User

User	Usage[NH]	Usage[WH]	Number of Jobs
u01548	2,583	-	177
u01549	7,901	-	76
u01540	225,136	-	10,593
u01562	16	-	32
u01893	10,866	-	8
u01558	7,167	-	18
u01891	12,245	-	407
u01537	2,831	-	30
u02046	6,574	-	78
u02048	324	-	81
u02049	700	-	18
u02044	1,083	-	54
u02047	2,286	-	48

Term of Use: 2022-04-01 - 2023-03-31



各個人の使用量

5

「富岳」使用上の注意

- 1度に大量のリソースを使うジョブを投げるときは以下の手続きを取って下さい。
 - ✓ 学生さんが**1万NH積以上**リソースを使う場合には、**指導教官**に必ず相談して許可を得てください
 - ✓ **10万NH積以上**リソースを使う場合には、**指導教官 + 福澤先生@阪大 + 渡邊さん@理研 + 加藤@九大**に必ず相談して許可を得てください
 ※学生さんの場合は、まずは指導教官に相談すること

- 技術的な相談は以下へお願いします。

FMO 創薬コンソーシアム メンバー専用掲示板

https://fmodd.jp/member_contents/bbs/

FMO 創薬コンソーシアム メンバー専用掲示板

キーワード検索...

クイックリンク FAQ ユーザー登録 ログイン

掲示板トップ

現在時刻 - 2022年6月21日(火) 13:27

フォーラム	トピック	記事	最終記事
フォーラム (掲示板) 関連トピック フォーラムに関する話題 (注意事項や要領、質問等)	5	5	フォーラムに対する要望 by fmodd.jp 2021年10月06日(水) 10:27
計算資源関連トピック スパコンなどの計算資源に関する話題	0	0	投稿記事なし
FMODB 関連トピック FMO データベースに関する話題	0	0	投稿記事なし
ABINIT-MP 関連トピック FMO 計算プログラム ABINIT-MP に関する話題	0	0	投稿記事なし
BioStation 関連トピック バイオ分子相互作用シミュレータ BioStation に関する話題	0	0	投稿記事なし
GAMESS-FMO 関連トピック 計算化学ソフトウェアプログラム GAMESS の FMO 計算に関する話題	0	0	投稿記事なし
Gromacs 関連トピック 分子動力学計算パッケージ Gromacs に関する話題	0	0	投稿記事なし
Amber に関するトピック	0	0	投稿記事なし