

マリンインフォマティクス基盤システム 「MI-SURUGA」

システム概要と基本的な利用方法

利用者説明会資料 利用開始編

2025/6/2版

システム概要

GPUも備えたミニコアHPCクラスタ :

- ◆ 計算ノード CPU64コア、メモリ512GB、SSD 950GB
- 汎用並列ノード 20台
- GPU搭載ノード 1台 @nVIDIA H100x2



- ◆ Lustre 高速ストレージ(200Gpbs接続) 実効1PB

- ◆ 200Gpbs InfiniBandにてMP計算が可能

◆ 基本環境

- | | |
|-------------|---------------------|
| OS : | Rocky Linux 8.9 |
| JOBスケジューラ : | OpenPBS |
| コンテナ環境 : | Singularity |
| 環境管理 : | Environment modules |

◆ 利用方法

IPsec VPN/ssh



説明会の目的

本説明会は、クラスターシステムの一般利用者の皆様に対し、システムの概要・利用方法・利用上の注意点についてご理解いただき、円滑かつ安全にご利用いただくことを目的としています。

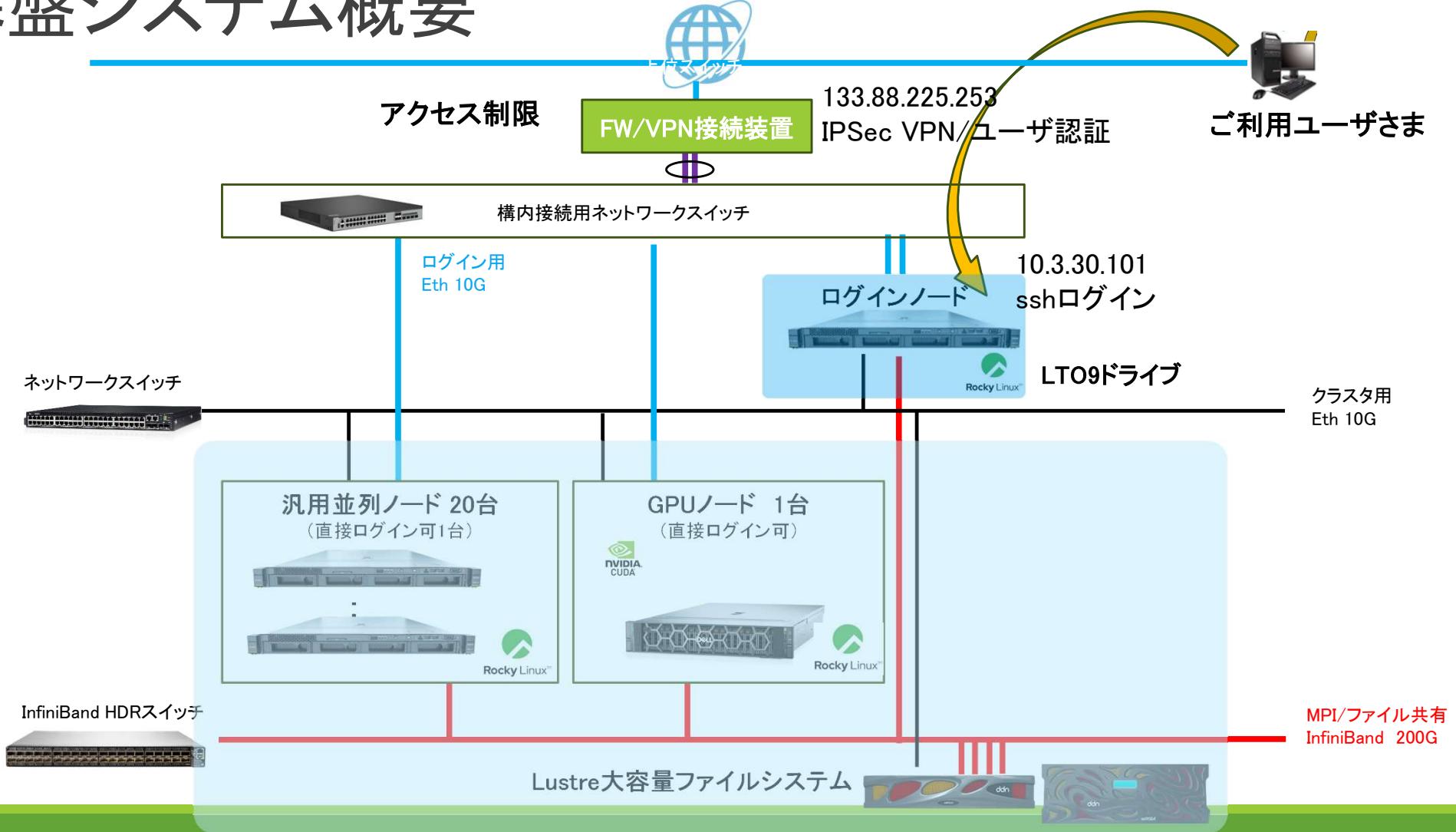
＜前半＞

- クラスターシステムの概要
- 利用開始にあたっての注意点
- ソフトウェア環境
- ユーザー登録、接続、データの取り扱いについて

＜後半＞

- GUI・Webアプリケーションのご利用について
- ジョブスケジューラーのご利用について

基盤システム概要



ノードの種類と機能

● ログインノード

このノードにログイン後、**qlogin コマンド**により汎用計算ノードまたはGPU搭載ノードにログインして作業を行って下さい。

計算ジョブ(含むJupyterLab)の実行はできません。

短時間の作業であれば、ログインノードでジョブの投入、コンパイル(含CUDA利用)なども行えます。

● GPU搭載ノード

GPUを使用した作業を行ったり、計算ジョブの投入先となるノードです。

量子コンピュータ関連・AI関連のアプリケーションが実行可能です。

GPUアプリケーションのコンパイルは、基本、GPU搭載ノードで実施してください。

● 汎用計算ノード

CPUを使用した作業を行ったり、計算ジョブの投入先となるノードです。

20号機のみ、外部データベースなどからのダウンロードジョブの投入先となっています。

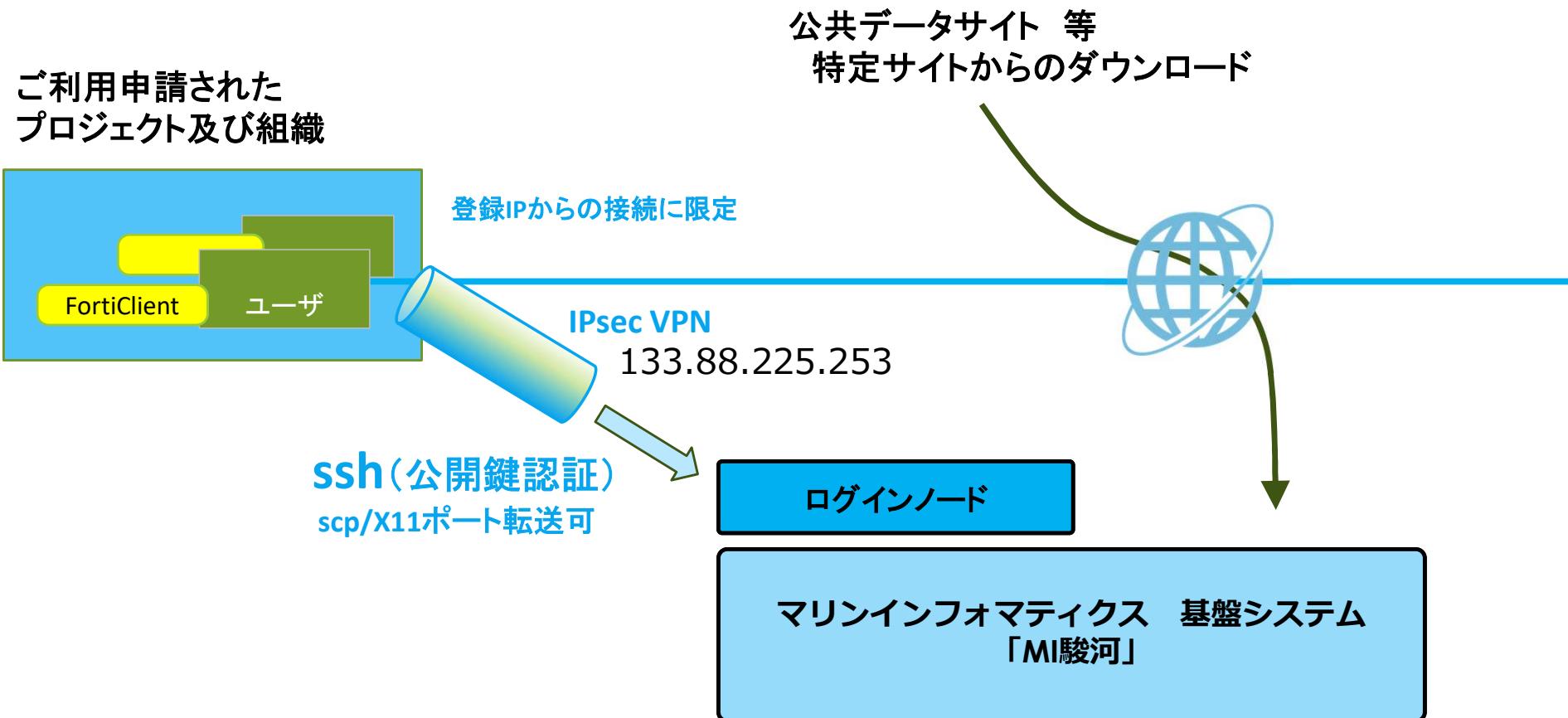
アプリケーションのコンパイル作業は、基本、計算ノードで実施してください。

● 高速ストレージ (Lustre)

ユーザのホームディレクトやプロジェクトのシェア領域です。

ご利用可能な割り当て領域サイズの**85%**を超えると警告メッセージが表示されます。

ご利用環境はCLI利用が基本



ご利用方法の概略

- 事前のご利用申請が必要です。
- ユーザ様の利用する端末には、マルウェア対策などのセキュリティ対策をお願いします。
- IPsec VPN/ssh の環境にて、ご利用いただきます。
- VPN接続後は、公開鍵認証によるsshでログインノードへログインしてご利用ください。
- 一部を除き各計算ノードへの直接のログインはできません。
- qlogin・qsub コマンドを実行することで、計算ノードを割り振られますので、その環境にて解析処理などを実行してください。

ログインノードやqlogin先でコマンドライン実行は可能ですが、実行に長時間かかったりCPUコア/メモリなどで多くのリソースが必要な場合は、必ず qsub コマンドでジョブとして実行してください。

ご利用方法の概略(データ持込み・持出し等)

- ご利用の端末からログインノードへのファイルの持ち込み/持ち出しほは、ssh接続の中で、scp/sftpをご利用ください。
- VPN 接続中にご利用の端末はインターネットには接続できません。
- サイズの大きなデータファイルの持込みと持出しほは、許可されたサイトに限りダウンロード/アップロード Job の実行、または LTO テープ/USB ストレージでの作業依頼にて対応可(予定)です。

利用環境についての補足

MI-SURUGAでは、

■セキュリティインシデントへの対応として

- ユーザのログインや実行したジョブ内容、実行したコマンド操作、読み書きしたファイル情報などがロギングされ、問題発生時の解析に使用します。

■クラスタシステムとして

- 計算パフォーマンスを優先し、ファイルI/O時の動的なマルウェアスキャンを行っていません。
ユーザ様の端末クライアント、及び持ち込まれるファイルへのマルウェア対策はしっかり行ってください。
- ユーザ様のファイルについてはバックアップは行いません。
ユーザ様の責任において、適宜バックアップを行ってください。
必要であればLTOテープやUSBストレージメディアへの書き出しを担当者へご依頼ください。

ご利用に当たって、ご不明な点や、支援が必要なことなど、サポート窓口までお気軽にお問合せください。

コンパイラ・ミドルウェア構成

- コンパイラ

GNU (gcc, gfortran)
Intel OneAPI

- 並列ライブラリ

Open MPI
Intel MPI

- ミドルウェア

Open PBS
Singularity(Apptainer)

- Python環境

python2/3(バージョンもEnvironment modulesにて選択可能)
numpy, scipy, scikitlearn, matplotlib等は導入済

- CUDA,Java,R環境

バージョンもEnvironment modulesにて選択可能

Environment modules での導入済ソフトウェア

```
[test@login ~]$ module avail
```

intelOneAPI/2025.0(default)	java/jdk-21.0.6+7	/usr/local/package/modulefiles/env	OpenMPI-gcc8.5.0/5.0.6	python/3.10.13-gatk	R/4.4.3(default)
java/jdk-11.0.26+4	java/jdk-23	OpenMPI-intel2021.10.0/4.1.8	python/3.10.16	Singularity/4.2.2	
java/jdk-17.0.0.1	java/jdk8u442-b06	OpenMPI-intel2021.10.0/5.0.6	python/3.11.11(default)		
java/jdk-17.0.14+7	mpich/4.2.3	OpenMPI-intel2025.0/4.1.8	python/3.12.9		
java/jdk-19	NCEPLIBS/v1	OpenMPI-intel2025.0/4.5.0.6	R/4.2.3		
java/jdk-21	OpenMPI-gcc8.5.0/4.1.8	perl/5.40.1(default)	R/4.3.3		

```
Quantum-Package/ver2025 GrADS/2.2.1
```

```
GPV/v1 netCDF/netCDF-gcc-4.9.2 netCDF/netCDF-python-1.14.0-intelmpi netCDF/netCDF-python-1.14.0-openmpi wgrib2/3.6.0
```

BamTools/2.5.2	BioPython/1.85	Bowtie2/2.5.4	DIAMOND/2.1.11	HISTA/2.2.1	IGV/2.19.2	SAR-Tookkit/3.2.0
BEDTools/2.31.1	BLAST+/2.16.0	bwa-mem2/2.2.1	FastQC/0.12.1	HMMER/3.4	Kraken/2.14	
BioPerl/1.7.8	BLAT/v35	bwa/0.7.18	GATK/4.6.1.0	IGV/2.16.0	samtools/1.21.1	

```
CUDA/11.7 CUDA/11.8 CUDA/12.4 CUDA/12.5(default) CUDA/12.6 Singularity/4.2.2-gpu
```

```
PyTorch/2.5.1 PyTorch/2.6.0 TensorFlow/2.18.0 YOL0v5/v7.0
```

※各Python環境には、JupyterLab, NumPY, SciPy, Matplotlib 導入済

Environment modulesでの導入済ソフトウェア

/usr/local/package/intelOneAPI_modules				
advisor/2025.0	debugger/2023.2.0	dptc/2023.2.0	intel_ipppc_ia32/2021.8.0	mpi/latest
advisor/latest	debugger/2025.0.0	dptc/2025.0.0	intel_ipppc_intel64/2021.8.0	ocl_fpga/2023.2.0
ccl/2021.10.0	debugger/latest	dptc/latest	intel_ipppc_intel64/2025.0	tbb/2021.10.0
ccl/2021.14.0	dev-utilities/2021.10.0	dpl/2022.2.0	intel_ipppc_intel64/latest	tbb/2022.0
ccl/latest	dev-utilities/2025.0.0	dpl/2022.7	itac/2021.10.0	tbb/latest
compiler-intel-llvm/2025.0.4	dev-utilities/latest	dpl/latest	itac/latest	tbb32/2021.10.0
compiler-intel-llvm/latest	dnnl-cpu-gomp/2023.2.0	inspector/2023.2.0	mkl/2023.2.0	umf/0.9.1
compiler-rt/2025.0.4	dnnl-cpu-omp/2023.2.0	inspector/latest	mkl/2025.0	umf/latest
compiler-rt/latest	dnnl-cpu-tbb/2023.2.0	intel_ipp_ia32/2021.9.0	mkl/latest	vtune/2025.0
compiler/2025.0.4	dnnl/3.6.1	intel_ipp_intel64/2021.9.0	mkl32/2023.2.0	vtune/latest
compiler/latest	dnnl/2023.2.0	intel_ipp_intel64/2022.0	mpi/2021.10.0	
dal/2023.2.0	dnnl/latest	intel_ipp_intel64/latest	mpi/2021.14	

Environment modulesで指定して利用するソフトウェアは、更新や追加等全て管理者権限で行われています。
既存ソフトウェアへの追加や更新、または新規導入が必要な場合は、ユーザサポートへご依頼ください。

OS環境に導入済主要ソフトウェア

テキストエディタ			
vim-minimal-2:8.0.1763-19	emacs-1:26.1-11	gedit-2:3.28.1-3	nano-2.9.8-3.el8_10
数値演算ライブラリ			
atlas-3.10.3-8	blas-3.8.0-8	hdf-4.2.14-5	lapack-3.8.0-8
openblas-0.3.15-6			
開発言語等			
boost-1.66.0-13	cmake-3.20.2-5	gcc-8.5.0-23	gcc-c++-8.5.0-23
gcc-gfortran-8.5.0-23	glibc-2.28-251.el8_10.13	java-1.8.0	lua-5.3.4-12
perl-5.26.3-422	tcl-8.6.8-2	tk-8.6.8-1	
その他ユーティリティ			
containers-common-1-70	freeglut-3.0.0-8	git-2.43.5-2.el8_10	mariadb-10.3.39-1
netcdf-4.7.0-3	pbs-22.05.11	hdf-1.14.6	

ソフトウェアユーザ様ご自身でのソフトウェア導入について

- Environment modules環境に導入を依頼する
多くのユーザ様が使用する可能性のあるソフトウェアの追加や既存ソフトのバージョン追加は、ご依頼により対応いたします。
- ユーザ様の環境にソフトウェアをご自身で導入する
自作プログラムを含め、ソフトウェアのコンパイルや、conda環境などの導入は、ユーザ様及び属するプロジェクトのストレージ領域にご自由に導入可能です。

以下の外部リポジトリからの直接の導入が可能です。

- ✓ [conda](#) / [BIOCONDA](#) (Python環境とconda環境を利用して導入する各種パッケージ)
- ✓ [Python Package Index \(PyPI\)](#) (Pythonのパッケージ)
- ✓ [CRAN R Project](#) (R及びRパッケージ)
- ✓ [Comprehensive Perl Archive Network \(CPAN\)](#) (Perlのパッケージ)
- ✓ [Singularity Library](#) (Singularityのイメージファイル)
- ✓ [Docker Hub](#) (Dockerのイメージファイル)
- ✓ [BioContainers](#) (バイオインフォマティクスアプリケーション)
- ✓ [NGC \(nVIDIA GPU Cloud\)](#) (ディープラーニング等、GPUに対応したアプリケーション)

ユーザ登録 ご利用に当たって

利用に当たっては、事前の利用者申請が必要です。

以下の情報を申請フォーマットにてご提出ください。

① ユーザ名、グループ名

組織やプロジェクトごと。利用契約の単位に対応します。

ログインノードにて、プロジェクトごとのユーザー(例 AAA-X や AAA-Y)などでログインします。

② 初期パスワード

VPN接続時(兼Linux環境用のパスワード:8文字以上)です。

最初のログイン時に変更してご利用ください。

③ ssh公開鍵

ssh接続に使用します。

鍵認証とすることで、Linux環境用のパスワードとしては意識する必要はありません。

④ メールアドレス

登録いただき、利用者様への各種連絡に使用します。

⑤ アクセス元のグローバルIPアドレス

未登録のIPからの接続は拒否されます。

ご利用端末がグローバルIPを持たない場合は、組織のGateway等のIPアドレスとなります。

ご自宅などでプロバイダーから払い出された固定されないIPはご利用いただけません。

ssh公開鍵の作成方法

公開鍵認証

署名アルゴリズム:ed25519 をご利用ください。

公開鍵/秘密鍵の作成

- Windowsの場合はPowerShell、Linux/Macの場合はTerminalにて以下コマンドを入力します。

```
ssh-keygen -t ed25519
```

- パスフレーズを入力し、一致すれば以下ディレクトリに保管されます。

Windowsの場合 :C:¥Users¥<ユーザ名>¥.ssh

Linux/Macの場合:~/.ssh

- 最後に「.pub」とついているファイルを管理者へお送りください。

※公開鍵の送付ですので、セキュリティ上の問題はありません。

sshアクセスするためにクライアント側は秘密鍵を設定します。

こちらは厳重に保管してください。

システムへの接続

- 事前にユーザ様の接続元組織で Firewall の許可申請を行ってください。

133.88.225.253との間で、下記2つの通信に関する許可をお願いします。

- ① [アクセス元端末のIPアドレス] 133.88.225.253 UDP 500 双方許可(戻り通信も許可)
- ② [アクセス元端末のIPアドレス] 133.88.225.253 UDP 4500 双方許可(戻り通信も許可)

※環境によってはIKEプロトコルを許可しなければならない場合があります。

- IPsec VPN接続&ssh

IPsec VPNで接続し、sshでのログインを行ってください。

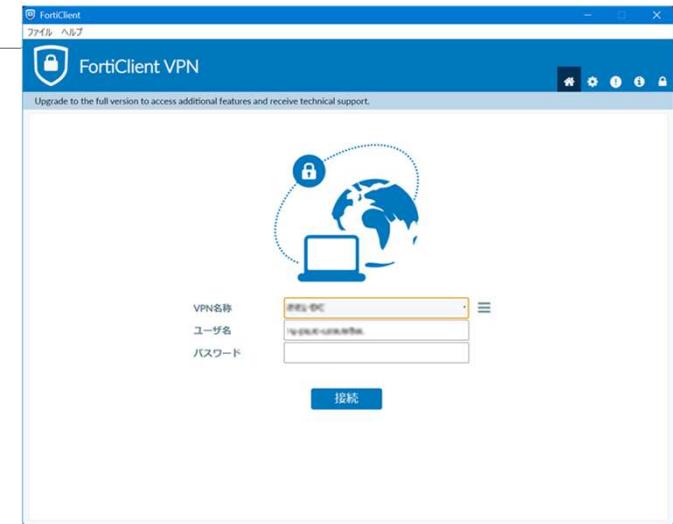
ノード	IPアドレス	ホストの別名
VPN接続先	133.88.225.253	—
ssh接続先	10.3.30.101	login

FortiClientでのVPN接続

FortiClientを使用して、IPsecVPN接続します。

- 接続情報（接続先、ユーザ名/パスワード、事前共有鍵）を設定します。
※サンプルでは接続名：「***」で登録
ユーザ登録完了後、上記の情報をご連絡いたします。
- ユーザ/パスワードを入力して接続します
(当面2要素認証は使用しません)。
- 正しく接続されれば、「VPN接続済み」と表示されます。
接続が成功しましたら、ログインノードへsshで接続してください。

VPN接続に必要な情報及び「FortiClient VPN」アプリケーションは
稀にバージョン依存があり増すので、「MI駿河」事務局からご案内
するものをご利用ください。



FortiClientのVPN接続設定

1. FortiClientインストール後、横3本線のアイコン「≡」をクリックし「接続先の追加」をクリックします。
2. 「IPSecVPN」を選択し、各項目を以下にします。
 - ① 接続名：**** ※任意
 - ② 説明： ※任意
 - ③ リモートGW：133.88.225.253
 - ④ 認証方法：事前共有鍵（別途お知らせします）
 - ⑤ 認証（XAuth）：ユーザ名を保存する場合は入力※任意
 - ⑥ 「保存」をクリックします。

VPN接続に必要な情報及び「FortiClient VPN」アプリケーションは稀にバージョン依存があり増すので、「MI駿河」事務局からご案内するものご利用ください。



Linux端末からのVPN接続

Linux用のFortiClientはIPSecVPNをご利用いただけません。

openfortivpn（必要であれば OpenFortiGUIも）を、Linuxクライアント環境に導入して、設定ファイルipsec.conf,ipsec.secretsに接続情報を記載して、ご利用ください。



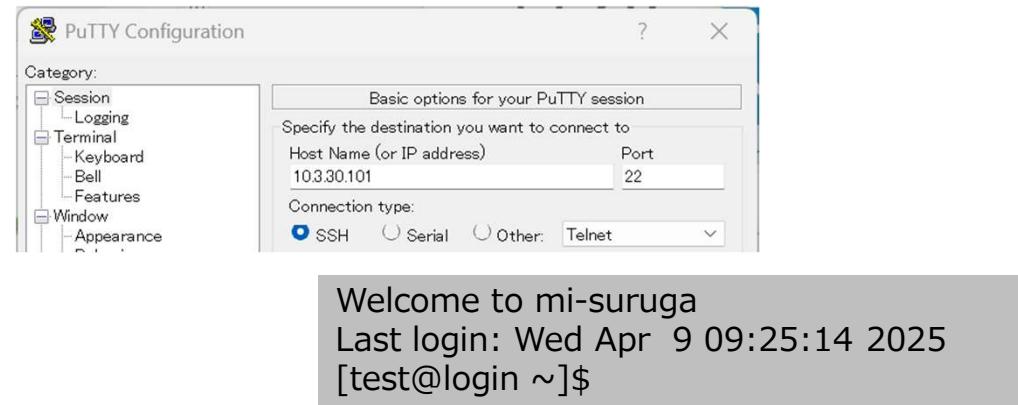
OpenfortiVPN

導入手順や設定ファイルの記述などに関する情報について、ご相談やサポートが必要な場合は、メールにてサポート窓口まで、お気軽にお問い合わせください。

sshによるログインノードへの接続

VPN接続が完了しましたら、ログインノードへsshで接続してください。

予め作成いただいたssh公開鍵が認証サーバに設定されていますので、お手元の秘密鍵を設定したクラインからパスワードなしで接続ができます。



ログインノードへ接続後…

- ログインノード自体での解析処理などのプログラムの実行はご遠慮ください。
- アプリケーション実行やコンパイルなどは、基本、qloginコマンドで計算ノードにログインしてから行ってください。
→ アプリケーションやMPIライブラリのご利用は、moduleコマンドで環境設定をお願いします。
- Jobスケジューラ(OpenPBS)のqsubコマンドも計算ノードで実行してください。
- 各計算ノードへ、ssh等での直接ログインはできません。

VPN/sshでの利用制限

使用したまま離席してしまうような場合なども考慮して、以下のような利用上の制限をかけています。

- VPN接続は、原則、利用が終わり次第、速やかに切断してください。
※大容量データの持ち込みを考慮して、**最大1週間程度**の連續利用は許可しています。
- sshでログインしたまま何も操作しないと**5分**で自動的に接続が切斷されます。
- qlogin中に長時何も作業を行わないと、**10分前後で警告**メッセージが画面に表示され、
そのまま何もしないと、**20分後に強制的に接続が切斷**されます。

注意喚起のメッセージ

```
$  
$ *** It will automatically disconnect shortly. please "qlogin"
```

MI-SURUGAとのファイルのやり取り

転送に長時間を要する大きなサイズのファイルのやり取りを想定して、以下の方法をご用意しています。

① ssh接続でのファイルコピー

お手元のデータは scp/sftp を使用してコピーが可能です。

Windows では「WinSCP」のようなソフトウェアを使用すると便利です。



② LTOテープ(8/9)・USBストレージメディア(有償サービス:準備中)

お送りいただいたメディアとの間でファイルの転送を行い、メディアをご返送いたします。
送料などの費用の実費をご負担いただきます。

③ ダウンロード

汎用計算ノード(20番機)を使用してバッチ処理でダウンロードを行えます。

データファイルのメディアによる持ち出しへ、「ファイル持ち出し申請書」(準備中)にプロジェクト責任者の了承が必要となります。

メディアへの読み書きはシステム管理者が行い、ユーザ様ご自身では行えません。

①ssh接続でのファイルコピー

計算に必要なデータ/計算結果は、ご自分の端末との間で、ファイル転送が可能です。
scp及びsftpがご利用いただけます。

- Linux系のOSの、scp・sftpコマンド

- FileZilla



- Windows系のターミナルソフトなどの機能

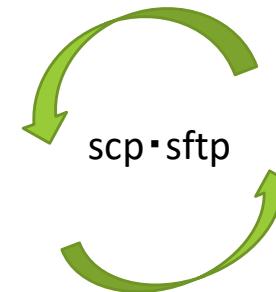


Tera TermやWinSCPのscp機能



RLogin

RLoginのsfcp機能



ログインノードにて
各自のホームディレクトリ
プロジェクトの共有ディレクトリ



※ homeディレクトリの実体は、
Lustre高速ストレージ上にあります。

② テープメディアでのやり取り

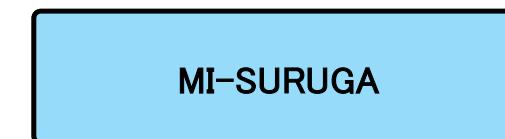
LTO9のドライブにて対応可能なLTO9/LTO8テープメディアにて、以下の手順で担当者が対応します。
テープドライブはログインノードに直接接続されています。

「読み込み」

- データが記録されたテープを持ち込みください。
→ 担当者が /archive/<ユーザのグループ名> に読み出します。
テープをご返却します。

「書き出し」

- プロジェクト責任者の了承を得て「ファイル持ち出し申請書」(準備中)をご提出ください。
用意された /archive/<ユーザのグループ名> に書き出したいデータを格納してください。
書き出すテープをご提出ください。
→ 担当者がユーザ様のテープへ、指定のデータを書き出します。
テープをご返却します。



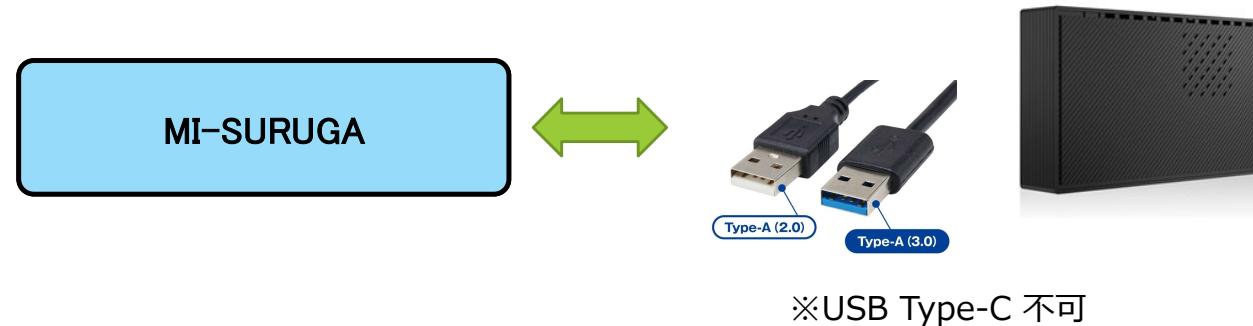
メディアをご用意いただく以外に、往復の送料等の費用をご負担いただきます。

② USBストレージメディアでのやり取り

MI-SURUGAに大量のデータファイルを持ち込んだり、処理結果などを持ち出す場合、USB接続のストレージもLTO9/LTO8テープメディアと同様の手順で、担当者が対応いたします。

USB接続のストレージメディアについて、対応可能なファイルシステムは以下の通りです。

Ext2,3,4、
FAT32,exFAT,NTFS、
HFS+



メディアをご用意いただく以外に、往復の送料等の費用をご負担いただきます。

③ダウンロード

システムは、基本的にはインターネットへの接続を許可していません。
しかし、公共サイトから直にデータファイルなどをダウンロードすることができます。

- 専用のキューに、wgetを利用するダウンロードジョブを投入してください。

以下のような公共サイトからのダウンロードを想定しています。

- ✓ 気象庁 (<https://www.data.jma.go.jp/>)
- ✓ 日本海洋データセンター (JODC)
- ✓ 国立遺伝学研究所 (DDBJ)
- ✓ European Biomedical Institute (EBI)
- ✓ National Institutes of Health (NIH)



上記に、ご利用になりたいサイトが含まれていない場合は、MS-SURUGA事務局、又はサポート窓口までご相談ください。

※ダウンロード用ジョブ投入スクリプトのサンプルを後半でご紹介します。

同時に2つのダウンロードジョブが実行可能です。

それ以上は実行待ちとなりますが、順次、ダウンロードが実行されます。

MI-SURUGA に関するお問い合わせ先

■ ユーザ申請や各種ご要望に関すること

マリンインフォマティクス研究機構 「MI駿河」事務局

■ ご利用に関するご相談やお問い合わせ

ユーザ様向けサポート窓口

support@v-t.co.jp(暫定)