



TSUBAME4.0スーパーコンピュータ 利用者ガイド



東京工業大学 学術国際情報センター

2024年4月9日 (火)

- 皆様のご協力のおかげでTSUBAME4.0をサービスインすることができました、御礼申し上げます
- 運用開始にあたり、さまざまな不具合でご迷惑をおかけしていることをお詫び申し上げます
 - TSUBAME4ポータルの不具合
 - アプリ配布の開始遅れ (準備中)
 - ドキュメント不足 (特に英語版)
 - アナウンス不足
- 不具合報告・改善要望等、どしどしお寄せください
 - 深刻度・難易度によって対応が遅くなった際にはご容赦ください
- 4/22までのテスト運用期間中は引き続き改修のため、無予告でサービス瞬断等が起きますがご容赦ください
 - TSUBAME4ポータルからいきなりログアウトされるなど

- TSUBAME4計算サービス
 - <https://www.t4.gsic.titech.ac.jp/>
 - 全ての案内はここから到達可能
- TSUBAME4ポータル
 - <https://portal.t4.gsic.titech.ac.jp/>
 - SSH鍵登録・TSUBAME4ポイントの購入など
- X (旧Twitter)
 - @titech_tsubame
- 速報的な情報の広報は計算サービスサイトのトップページとXにて行っております
- 問い合わせはTSUBAME4計算サービスページ内、「お問い合わせ」のウェブフォームまで
 - TSUBAME4ポータル内の問い合わせフォーム機能は準備中
 - 過去の回答メールのアドレスに直接送信はご遠慮ください



Tokyo Tech

運用スケジュール

今年度の主な運用スケジュール

- ~4/22 テスト運用期間
 - この間にジョブ実行で使ったポイントは期間後に返却します
 - アプリ利用権・ストレージのポイントは返却しません
 - 不具合報告・改善要望お待ちしております
- 4/22 9:00~4/24 17:00 メンテナンス等で利用不可
- 4/24 17:00 正式運用開始
- 5月~6月 グランドチャレンジによるノード減 (応募状況次第)
- 4/24~6月末 TSUBAME4講習会 (入門・商用アプリ・並列化・GPU活用)
- 9月上旬(数日程度) 定期メンテナンス
- 3月上旬(金曜~月曜) 法定停電メンテナンス
- 3月下旬~4月上旬(数日程度) 年度末メンテナンス

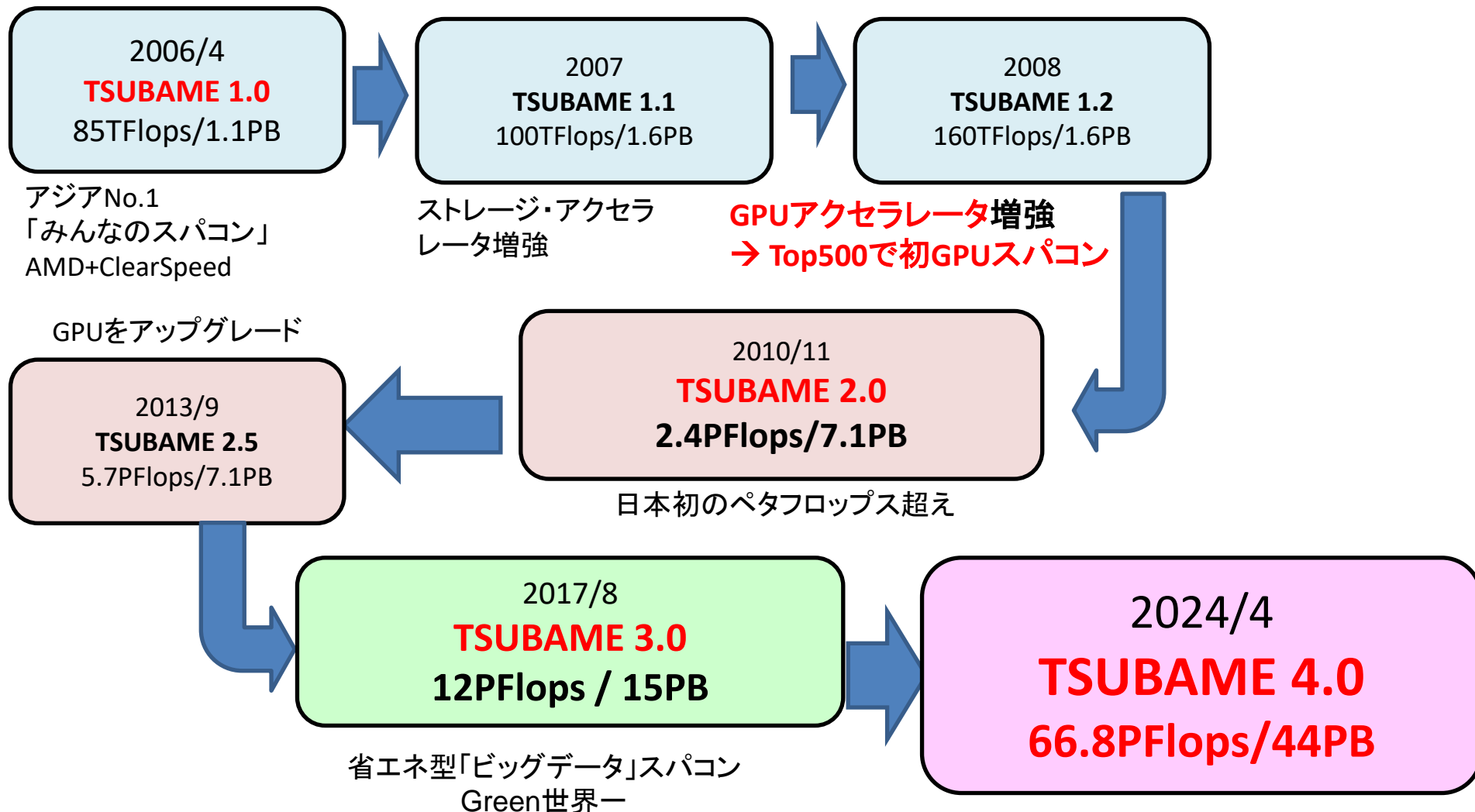
- 設置場所変更に伴い、メンテナンスの時期・回数を変更しました



Tokyo Tech

システム

東工大TSUBAMEの歴史

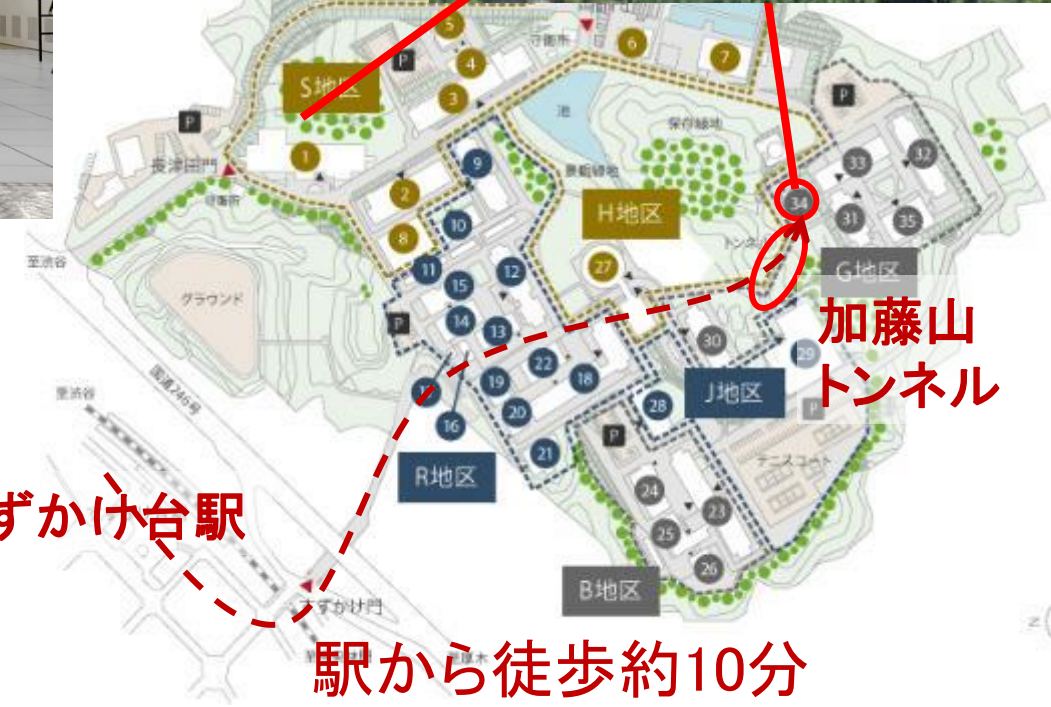
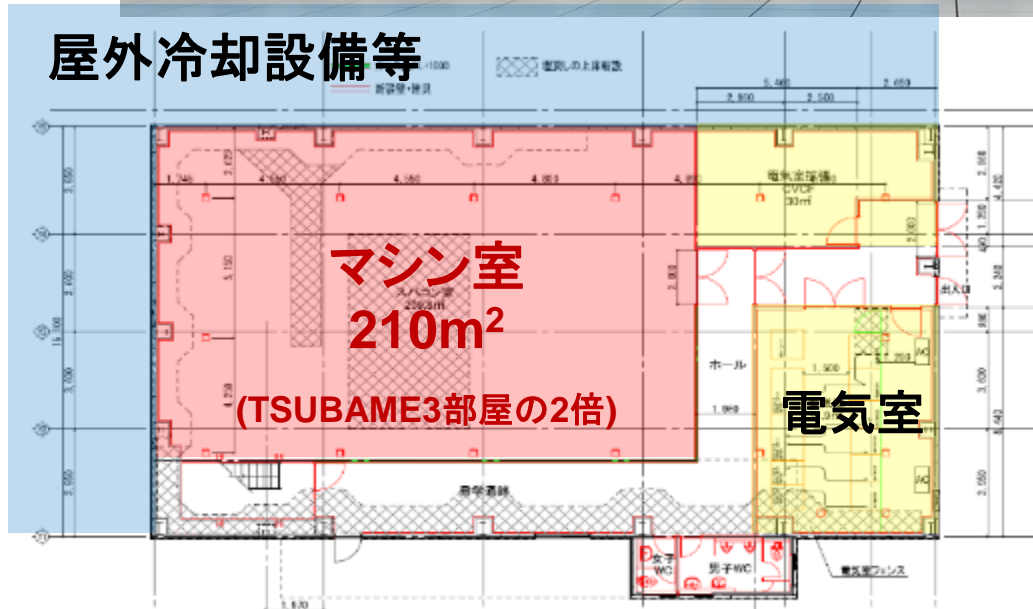


TSUBAME4.0の特徴

- AI時代に即した演算性能とストレージ
 - 計66.8PFlops(倍精度)の演算性能・・・TSUBAME3.0の5.5倍
 - NVIDIA H100 GPU 総計960枚！
 - AI分野で注目されている、半精度なら952PFlops!
 - 計44PBの共有ストレージ容量
 - 高速共有ストレージ(SSD)の追加
- 様々な利用形態への対応
 - Webベースでも、これまで通りSSHでも
 - 4コアの資源タイプから高並列・マルチGPUジョブ向けまで
- TSUBAME3などのソフトウェアはほぼそのまま稼働
 - x86_64 CPU + NVIDIA GPU + Linux OSという組み合わせ

TSUBAME4.0@すずかけ台キャンパス

すずかけ台キャンパスG4-A棟を新
データセンターとして改修・利用



TSUBAME4.0のシステム構成

TSUBAME4.0性能概略



	TSUBAME3.0		TSUBAME4.0
総演算性能			
• 倍精度演算 (FP64)	12PFlops	x5.5 →	66.8PFlops (行列演算) 34.7PFlops (汎用演算)
• 深層学習演算 (FP16の場合)	47PFlops	x20 →	952PFlops
計算ノード数	HPE/SGI ICE XA 540ノード (均一)		HPE Cray XD6500シリーズ 240ノード (均一)
総GPU数	2160個		960個
共有ストレージ	DDN社 SFA		HPE ClustreStor E1000
• 容量	16PByte	x2.8 →	44PByte + AllFlash 327TByte

TSUBAME4.0ノード構成

	TSUBAME3.0	TSUBAME4.0
CPU	Intel Xeon 2680v4 × 2	AMD EPYC 9654 × 2
• 周波数、コア数	2.4GHz, 28コア (=14 × 2)	2.4GHz, 192コア (=96 × 2)
メインメモリ	DDR3-2400 4ch × 2	DDR5-4800 12ch × 2
• 容量	256GiB	768GiB
ネットワーク	OmniPath 100Gbps × 4	InfiniBand NDR 200Gbps × 4
OS	SUSE Linux Enterprise 12	RedHat Enterprise Linux
GPU	NVIDIA P100 SXM × 4	NVIDIA H100 SXM5 94GB HBM2e × 4
以下、1GPUあたり		
• 演算性能(倍精度)	5.3TFlops	66.9TFlops (行列), 33.4TFlops(汎用)
• メモリ容量	16GB	94GB
• メモリ速度	0.73TB/s	2.39TB/s

※通常のH100製品(80GB, 3.3TB/s)より
メモリ容量が大きい(やや遅い)

TSUBAME4.0のストレージ

- ホーム
 - /home以下
 - SSDベース
 - 各アカウントに存在。無料で利用可能だが容量制限
- 共有ストレージ
 - /gs/bs 以下
 - ハードディスクベース、計44PB
 - グループによる購入が必要
- **高速共有ストレージ ← New**
 - /gs/fs 以下
 - SSDベース、(ホームと合わせ)計327TB
 - グループによる購入が必要
- ローカルスクラッチ領域
 - ノードあたり1.9TB
 - 高速だが、ジョブ終了時に消える

全ノード
から共有

各ノード
固有

TSUBAME3.0ソフトウェア

- OS: Red Hat Linux 9
- スケジューラ: Altair Grid Engine
- コンパイラ: gcc, Intel, AOCC, NVIDIA HPC(旧PGI)
- MPI: OpenMPI, Intel
- CUDA
- 多種ISVアプリ(後述)

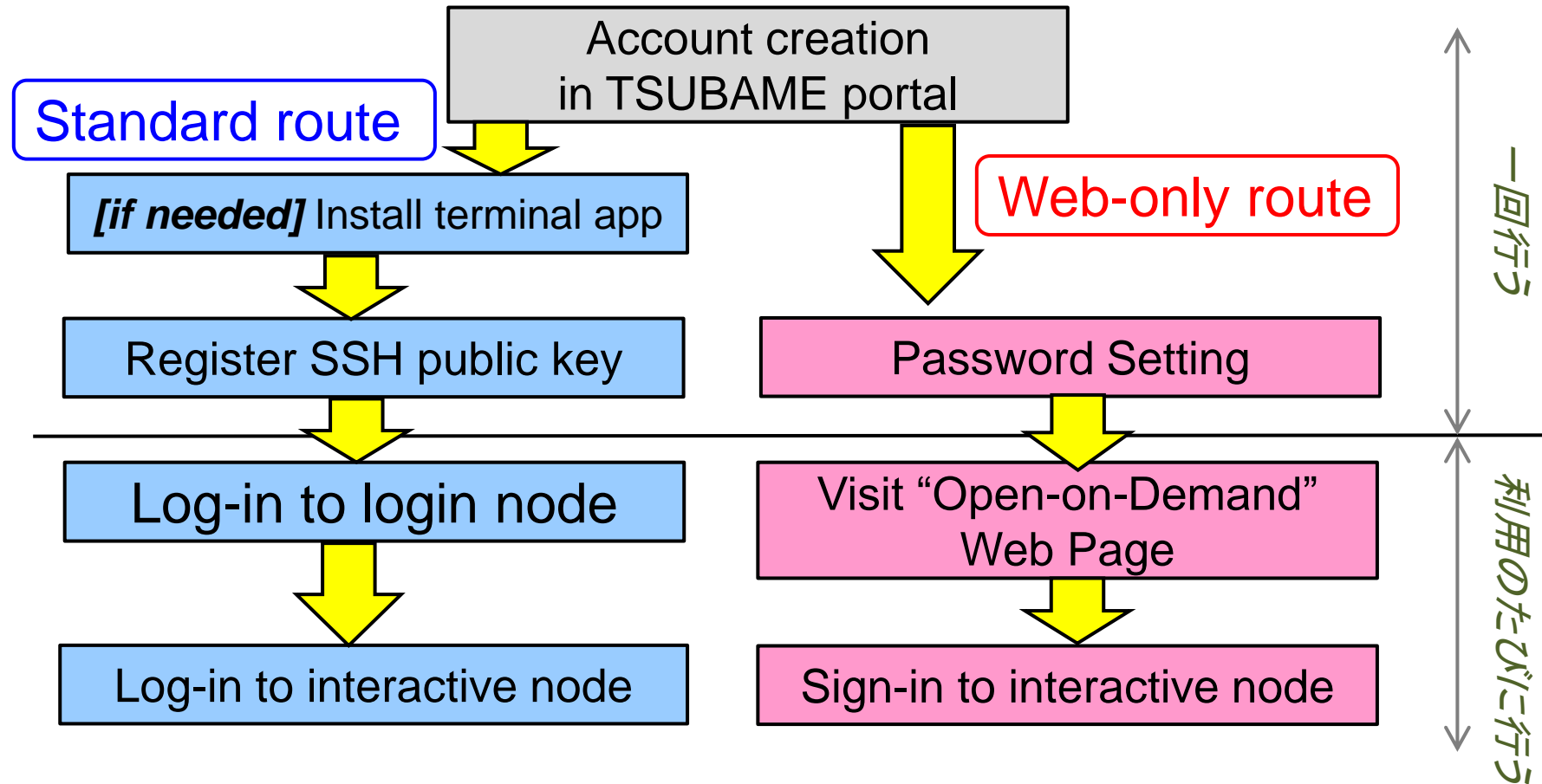
moduleコマンドで切り替え

利用開始とログイン

TSUBAMEに慣れている人向けの情報

- (東工大メンバーの場合)アカウント作成はWeb上で「**東工大ポータル**」⇒「**TSUBAME4ポータル**」
- 「TSUBAME4ポータル」でSSH公開鍵アップロード
- SSHクライアントを用いて、login.t4.gsic.titech.ac.jp へ接続

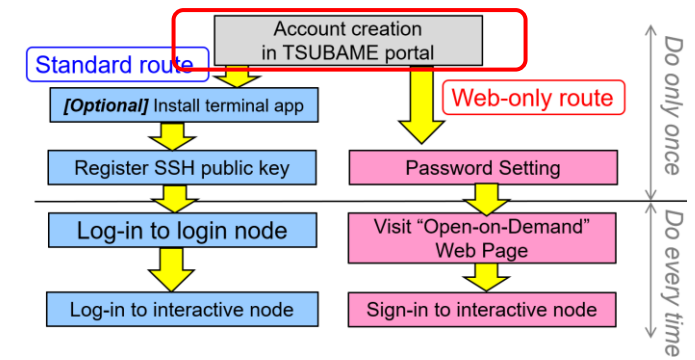
TSUBAME利用までの流れ



Standard route

Web-only route

TSUBAME Portalでの アカウント作成



- Visit **TokyoTech Portal / 東工大ポータル** and log-in



Click "TSUBAME4 portal"

→ If you are new to Tsubame, you will be taken to account creation pages

→ You will get an account.

- An account name looks like: *ux02345* (not the student ID)

- For details, visit <https://www.t4.gsic.titech.ac.jp/> and click "Getting Accounts" / "アカウント取得方法"

Web-only route

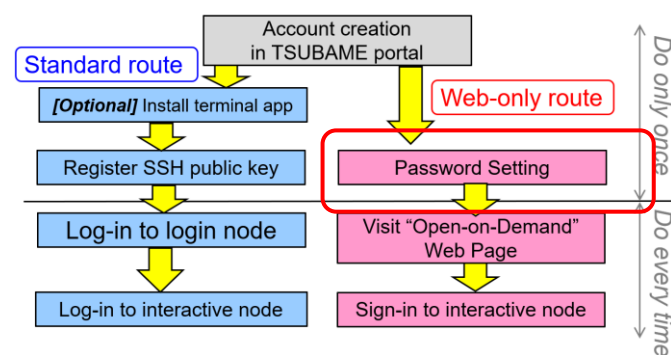
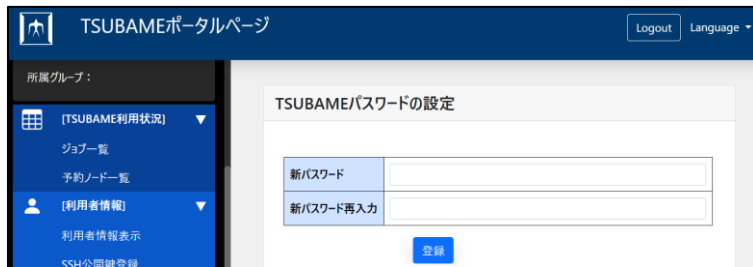
パスワード設定

Go to “TSUBAME4 portal” again

- Visit “Tokyo Tech portal”
- Log-in
- Click “TSUBAME4 portal”

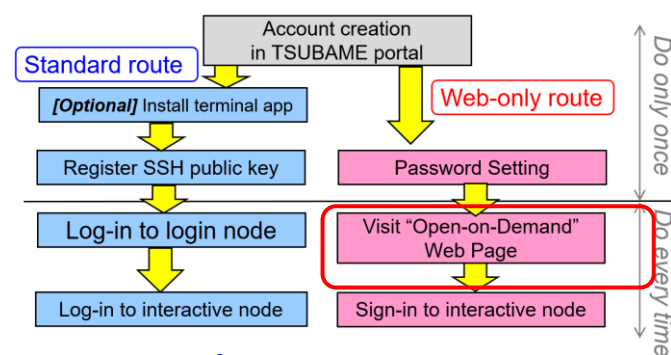
Your account name

Set a new password
→ used in next page

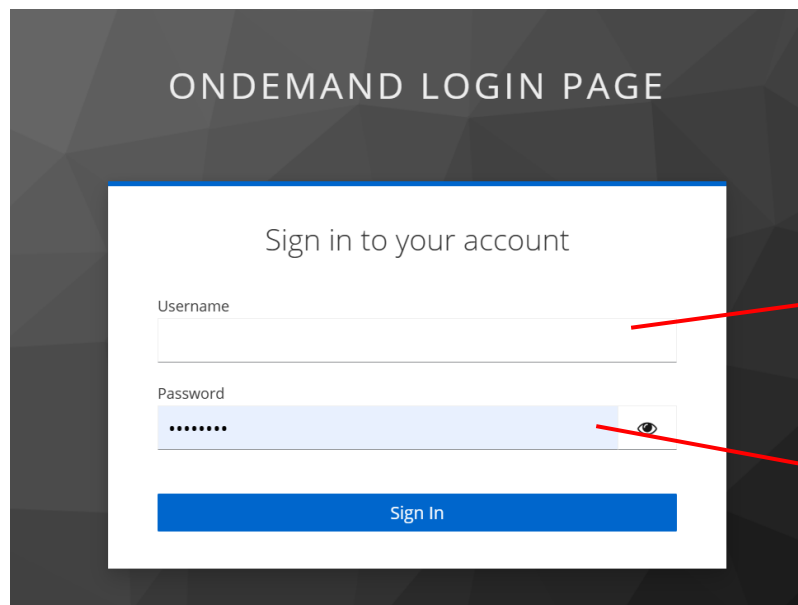


Web-only route

“Open-on-Demand” Webページへ



- Webブラウザで、<https://ood.t4.gsic.titech.ac.jp/> を開く



TSUBAME3の「Webサービス
利用」から変わりました

Type your account name

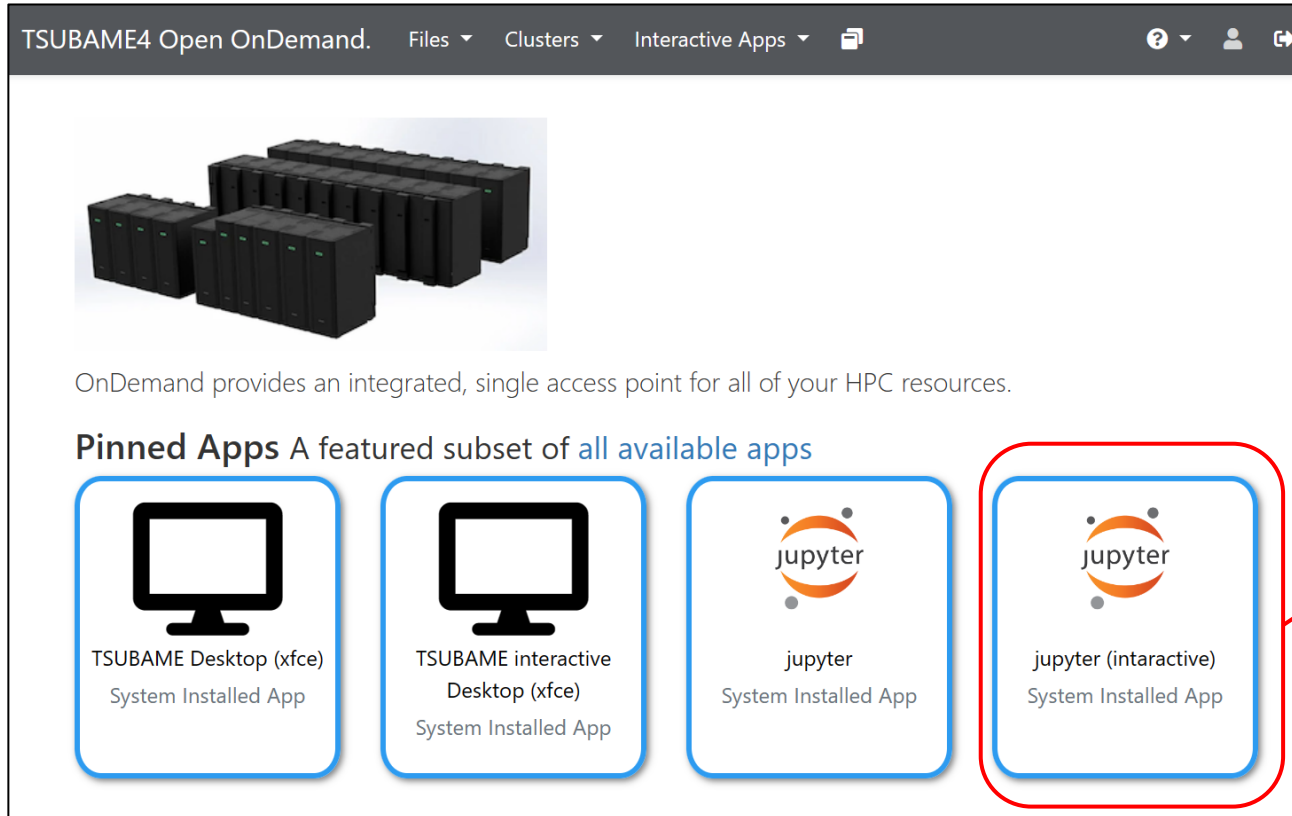
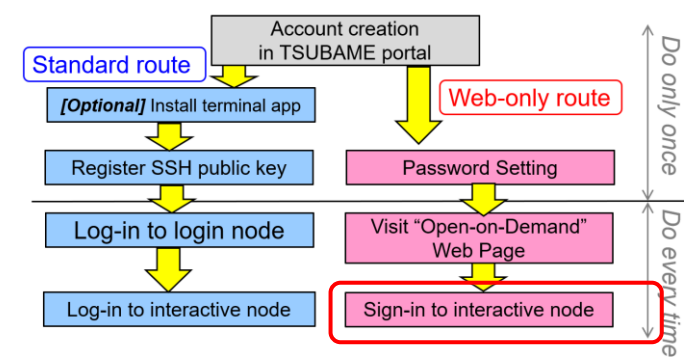
Type your password

2段階認証を行います

- “Access code” 記載のメールが届くはず
➔ 次画面で入力

Web-only route

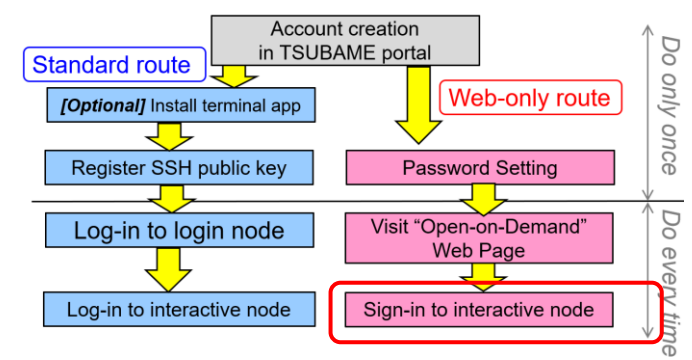
“Web Service”の起動 (1)



今回の例では無料利用可能な
jupyter (interactive)
を使ってみます

Web-only route

“Web Service”の起動 (2)



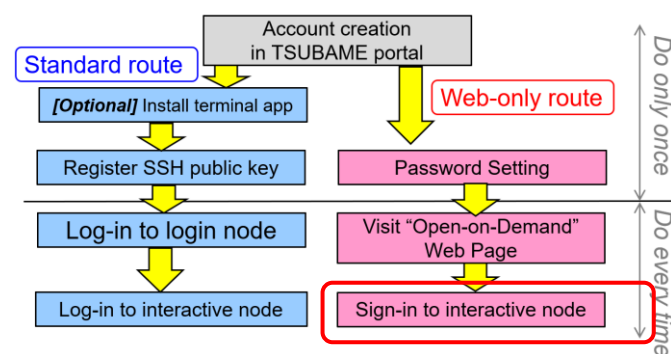
The screenshot shows the TSUBAME4 Open OnDemand web interface. The breadcrumb path is 'Home / My Interactive Sessions / jupyter (interactive)'. On the left, under 'Interactive Apps', the 'jupyter (interactive)' option is selected. The main content area shows the configuration for the 'jupyter (interactive)' app. The 'TSUBAME group' is set to 'Free'. The 'Maximum run time(hh:mm:ss)' is set to '2:00:00'. A 'Launch' button is visible at the bottom. A note at the bottom states: '* The jupyter (interactive) session data for this session can be accessed under the data root directory.'

Select “free”

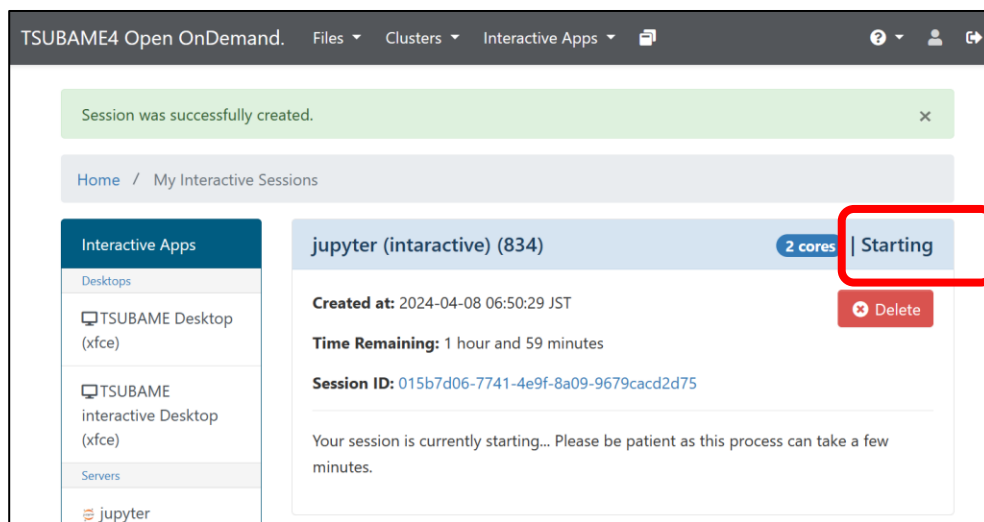
Type maximum time, such as “2:00:00”

Web-only route

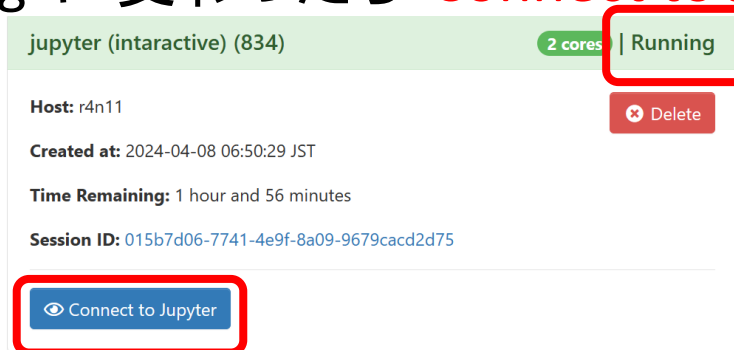
“Web Service”の起動 (3)



- 「セッション」が作られたとわかる。状態がStartingならばしばらく待つ



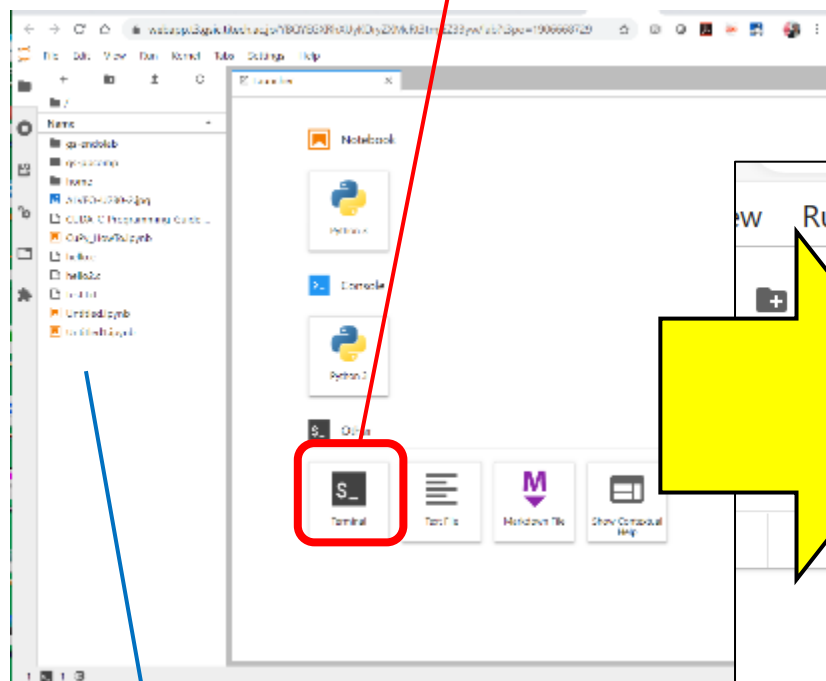
- 状態が“Running”に変わったら“Connect to Jupyter”をクリック



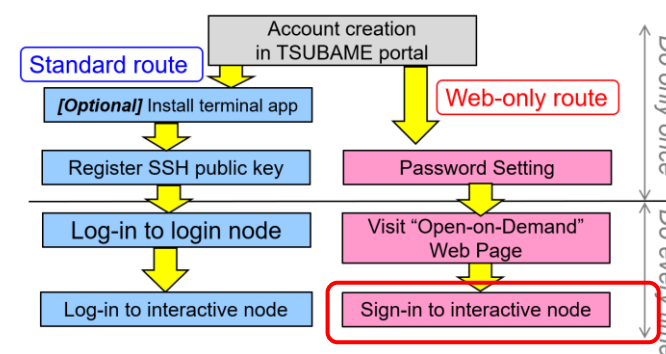
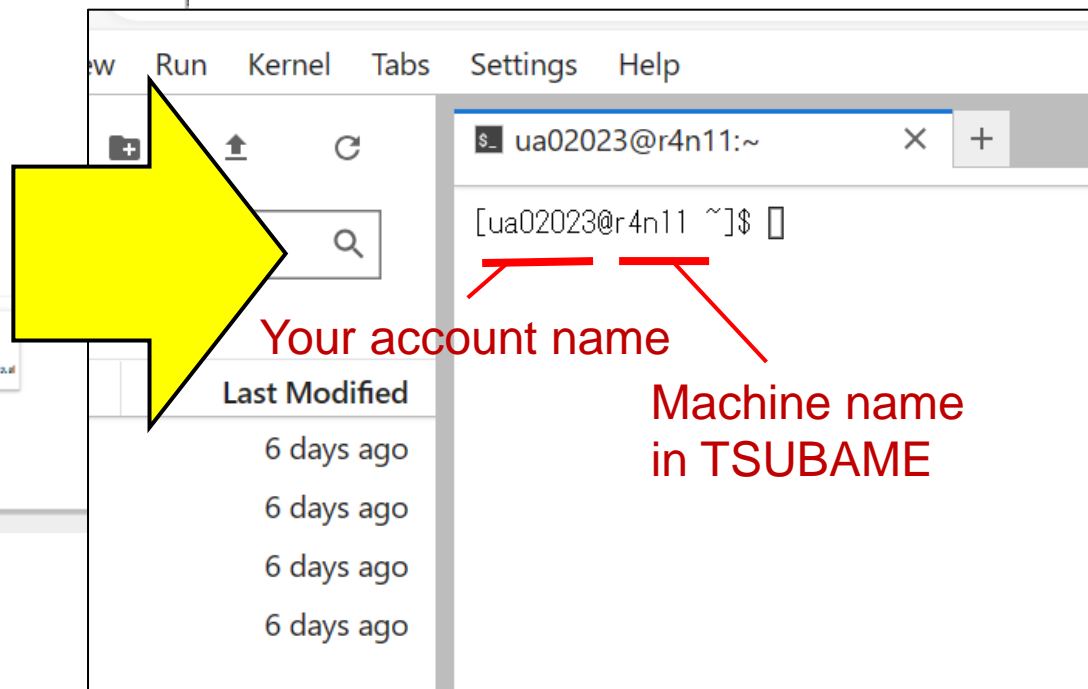
Web-only route

“Web Service”の起動 (4)

- “Jupyter”画面が表示されるはず
- Click the **Terminal** icon



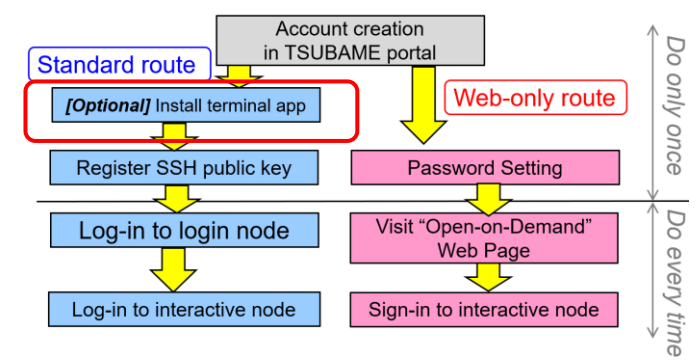
~/ (your home) directory
in TSUBAME



Standard route

[if needed]

SSHクライアントのインストール



(In standard route) Your PC must have a terminal application that supports SSH protocol



•On Mac

- Start **terminal / ターミナル** app → use **ssh** command



•On Windows...

- Recently, **command prompt / コマンドプロンプト** is ok

Also you can install other applications

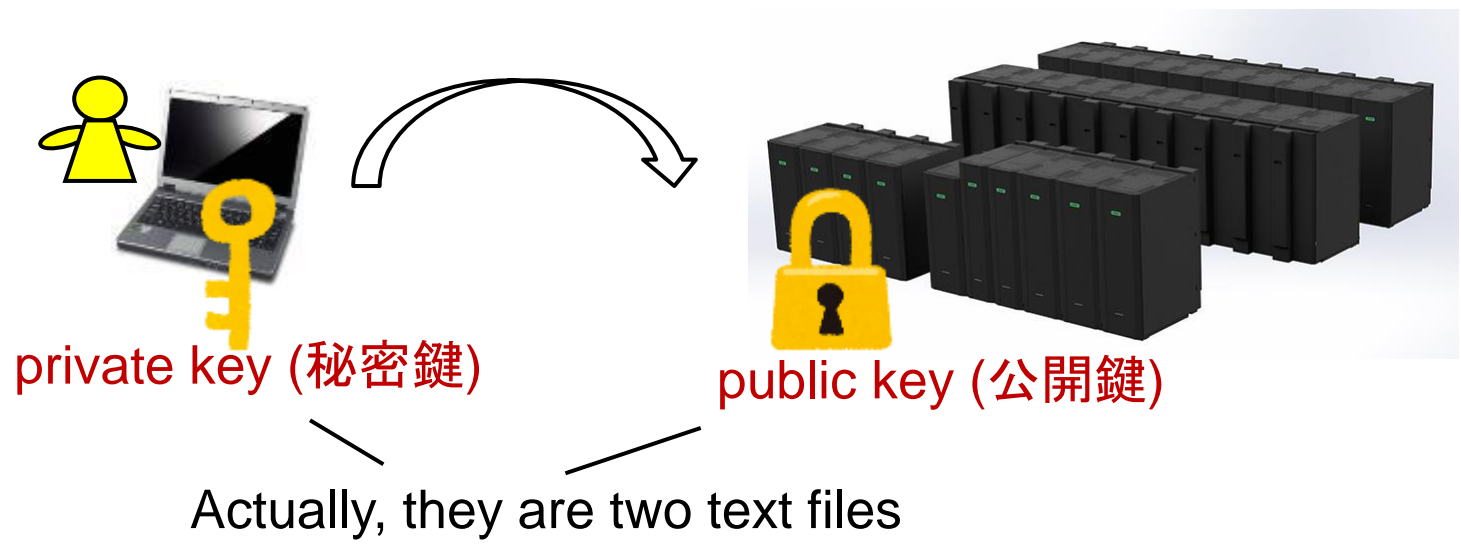
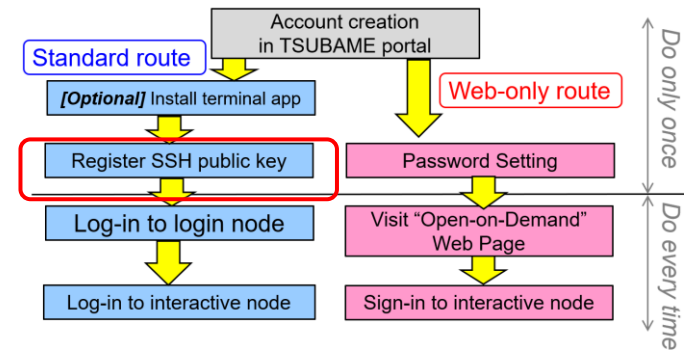
- MobaXterm on Windows
- Putty on Windows/Mac
- iTerm on Mac ...

Or try google
“windows ssh client”
“mac ssh client”

Standard route

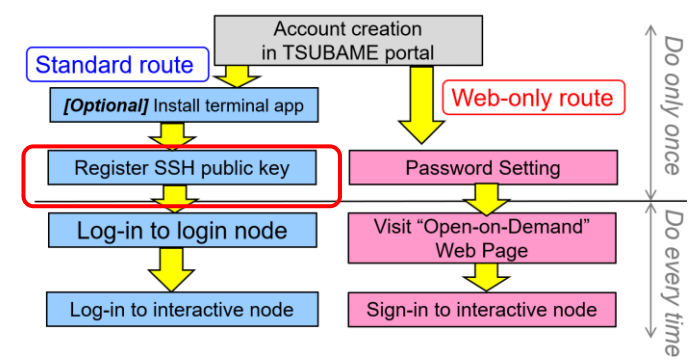
SSH鍵認証の準備 (1)

- To log-in to TSUBAME by SSH,
 - A password is NOT used
 - instead, **public key (公開鍵)** method is used



Standard route

SSH鍵認証の準備 (2)



Please create key-pair on your PC by yourself

• On Mac terminal or Windows command prompt

- Use `ssh-keygen` command
- Setting “`passphrase`” is strongly recommend

→ Two files are created

For example,

private key → `.ssh/id_ecdsa` (Mac) `.ssh\id_ecdsa`(Win)

public key → `.ssh/id_ecdsa.pub` (Mac) `.ssh\id_ecdsa.pub` (Win)

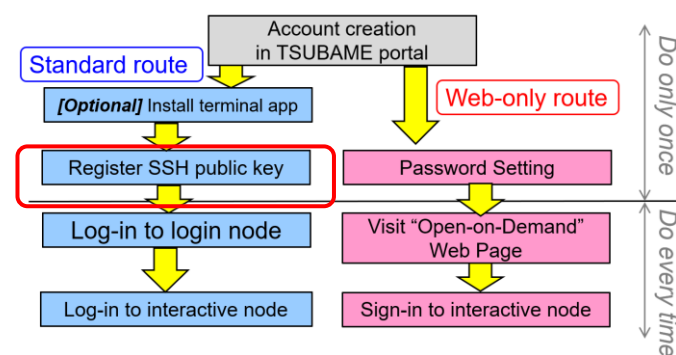


• If you are using another terminal application, try Google

- Such as “mobaXterm public key”
- If you are asked the key format, choose “`OpenSSH`” format, NOT “`ssh.com` format”

Standard route

SSH公開鍵のアップロード



Register your public key on TSUBAME portal

1. Click **Register SSH public key / SSH公開鍵登録**
2. Upload your **public key**
- **Don't upload the private key!!**



id_ecdsa



id_ecdsa.pub

TSUBAMEポータルページ

Logout Language

現在の状態: 利用中

所属グループ:

- [TSUBAME利用状況]
- ジョブ一覧
- 予約ノード一覧
- [利用者情報]
- 利用者情報表示
- SSH公開鍵登録**
- パスワード設定
- 利用規約一覧
- [課金管理]
- 支払コード管理
- 予算コード承認依頼
- [グループ]
- 所属グループ管理
- グループ作成
- 履歴表示

SSH公開鍵追加

SSH公開鍵をコード入力または、ファイルアップロードにて追加することができます。
SSH公開鍵コードを入力して追加ボタンを押してください。

公開鍵コード入力

追加

登録するSSH公開鍵をアップロードしてください。

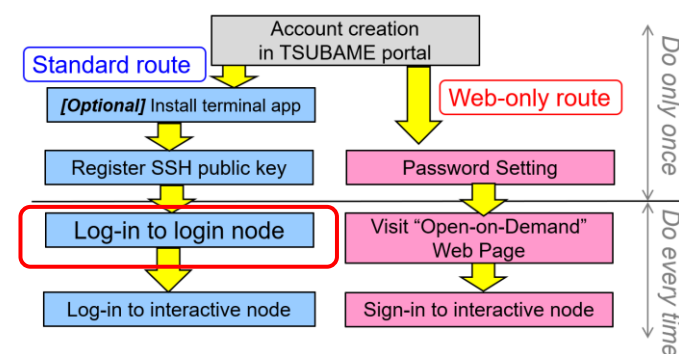
ファイルの選択 ファイルが選択されていません

アップロード

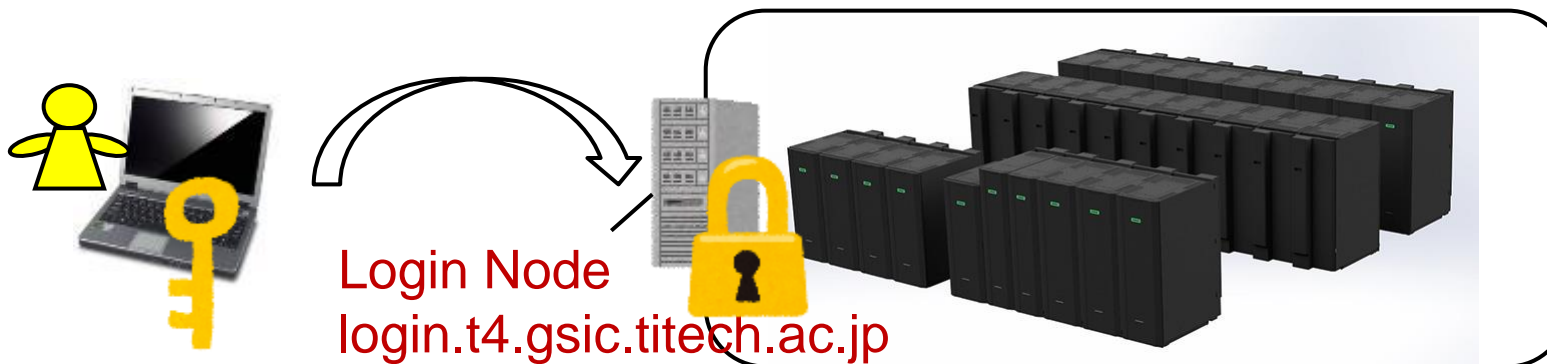
NOTE: The key is automatically added to
~/.ssh/authorized_keys on TSUBAME

Standard route

TSUBAMEログインノードにログイン



- On Mac terminal or Windows command prompt
`ssh -i [private key] [account]@login.t4.gsic.titech.ac.jp`
ex) `ssh -i .ssh/id_rsa ux02345@login.t4.gsic.titech.ac.jp`



```
-----
Last modified: Mon Apr  1 10:00:09 JST 2024

(The current TSUBAME 4.0 operational status)
https://www.t4.gsic.titech.ac.jp/      X(Twitter):@Titech_TSUBAME
-----

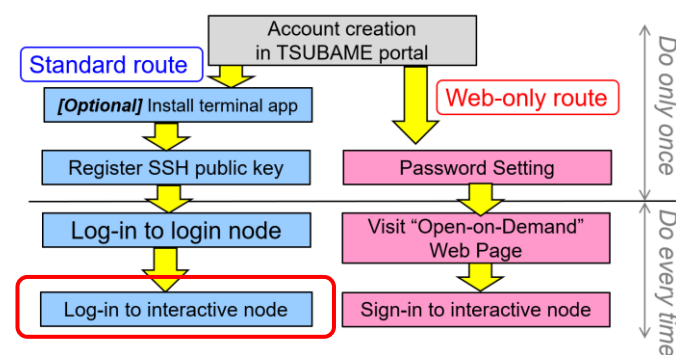
Last login: Wed Apr  3 18:41:29 2024 from 131.112.132.225
[ua02023@login1 ~]$
```

← If successful,
you will see

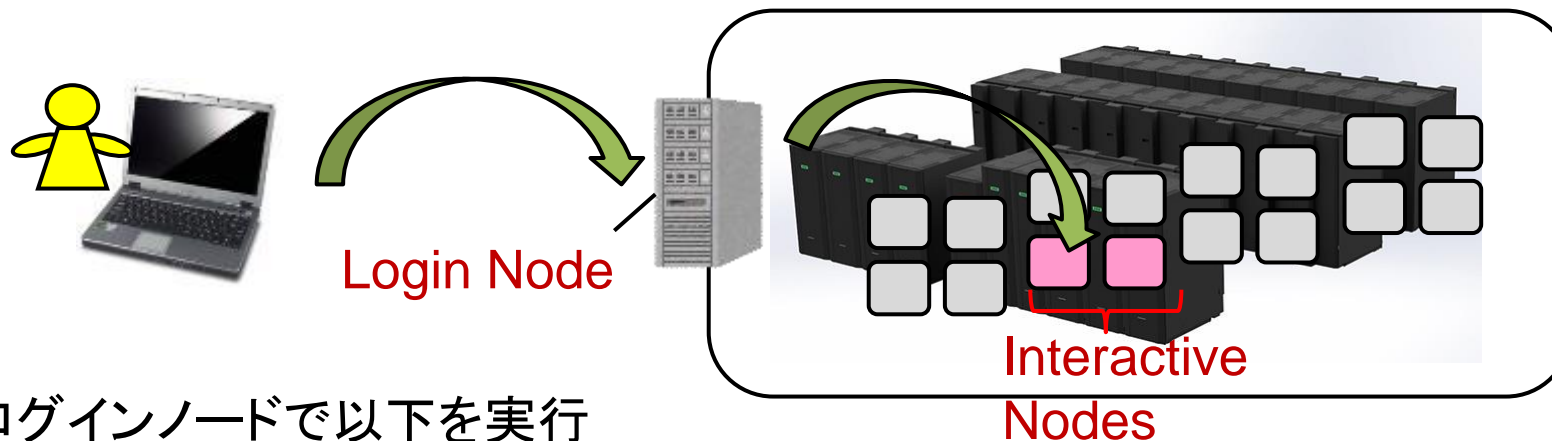
On other terminal
applications, try Google

Standard route

インタラクティブノードへログイン



- ログインノードは、入口用であり、計算用でなく、GPUもついていない
- 気軽にGPUなどへアクセスする方法の一つ;「インタラクティブノード」
 - 全240中2ノードがインタラクティブ専用であり、複数ユーザにより共有



- ログインノードで以下を実行

```
iqrsh -l h_rt=2:00:00
```

成功時の表示 →

```
[ua02023@Login1 ~]$ iqrsh -l h_rt=2:00:00  
[ua02023@r4n11 ~]$
```

なお、上記時間がたつ・exitコマンド・Ctrl+D のいずれかによりログアウト

インタラクティブノードでできること

1. [Web-only route] で”jupyter (interactive)”や”TSUBAME interactive desktop”を選んだ場合

2. [Standard route] からiqrshを実行した場合

どちらも、以下のCPU/GPUが見えます (後述のnode_o相当)

- CPU 24コア + GPU 0.5個

※ NVIDIA MIGという機能でGPUを分割している

これらを使い、比較的小規模なCPU/GPU並列プログラムの開発・実行が可能

[注意]

- 東工大メンバは無償・学外メンバは有償
- インタラクティブノードを利用できるのは一人あたり同時に1セッション
 - Web-only / Standard含めて同時に1セッション。終了し忘れに注意
- 上記資源は複数ユーザによって共有 → 実行が遅くなったりメモリ不足の可能性

moduleコマンドによるソフトウェア切り替え

- 利用するソフトウェアに関する環境設定を、前もってmoduleコマンドで行う
 - 例: `module load intel` → Intelコンパイラ
 - `module load intel/2024.0.2` のようにバージョン指定も可能
 - 例: `module load cuda`
- “`module load xxx`”の効力は、入力したシェルからexitするまで
- 用意されているモジュールの一覧: `module avail`
- すでにloadされたモジュールを全て無効に: `module purge`
- ジョブスクリプト内の注意点あり(後述)

現在インストールされているモジュール

```
----- /usr/share/Modules/modulefiles -----
dot module-git module-info modules null use.own

----- /apps/t4/rhel9/modules/modulefiles/compiler -----
aocc/4.1.0 cuda/12.0.0 cuda/12.1.0 cuda/12.3.2 intel/2024.0.2 nvhpc/24.1

----- /apps/t4/rhel9/modules/modulefiles/mpi -----
intel-mpi/2021.11 openmpi/5.0.2-gcc openmpi/5.0.2-intel openmpi/5.0.2-nvhpc

----- /apps/t4/rhel9/modules/modulefiles/tools -----
forge/23.1.2 intel-dnnl/3.3.0 intel-ins/2024.0 intel-itac/2022.0 intel-vtune/2024.0

----- /apps/t4/rhel9/modules/modulefiles/isv -----
abaqus/2024 ansys/R24.1 gaussview/6.1 schrodinger/2024-1
amber/22up05_ambertools23up06_cpu comsol/62_u2 mathematica/14.0 VASP/6.4.2/5.0.2-nvhpc
amber/22up05_ambertools23up06_gpu gaussian/16C2_cpu matlab/R2024a

----- /apps/t4/rhel9/modules/modulefiles/free -----
alphafold/2.3.2 gromacs/2024 novnc/1.4.0 spack/0.21.2
cmake/3.28.3 hadoop/3.3.6 openfoam-esi/v2312 tensorrt/8.6.1.6
code-server/4.22.1 hdf5-parallel/1.14.3/gcc11.4.1 openfoam/11.0 tgif/4.2.5
cp2k/2024.1 imagemagick/7.1.1-29 papi/7.1.0 tinkert/8.10.5
cudnn/9.0.0 jupyterlab/4.1.4 paraview/5.12.0 tmux/3.3
deepmd-kit/2.2.9 lammps/2aug2023_u3 paraview/5.12.0-egl turbovnc/3.1.1
ffmpeg/6.1.1 miniconda/24.1.2 petsc/3.20.4-complex VESTA/3.5.8
fftw/3.3.10-gcc namd/3.0b6 petsc/3.20.4-real visit/3.1.4
fftw/3.3.10-intel nccl/2.20.5 pov-ray/3.7.0.9 vmd/1.9.4
fftw/3.3.10-nvhpc netcdf-parallel/4.9.2/gcc11.4.1 quantumespresso/7.3.1
gamess/Jun302023R1 ninja/1.11.1 R/4.3.2
```

現在pythonというモジュールは無いが、loadしなくてもPython 3.9.10が使える
(将来別バージョンのためにmoduleができる予定)

TSUBAME4.0のより本格的な利用

TSUBAMEポイントの購入・用途

ジョブスケジューラによる大規模ジョブ実行

共有ストレージの利用

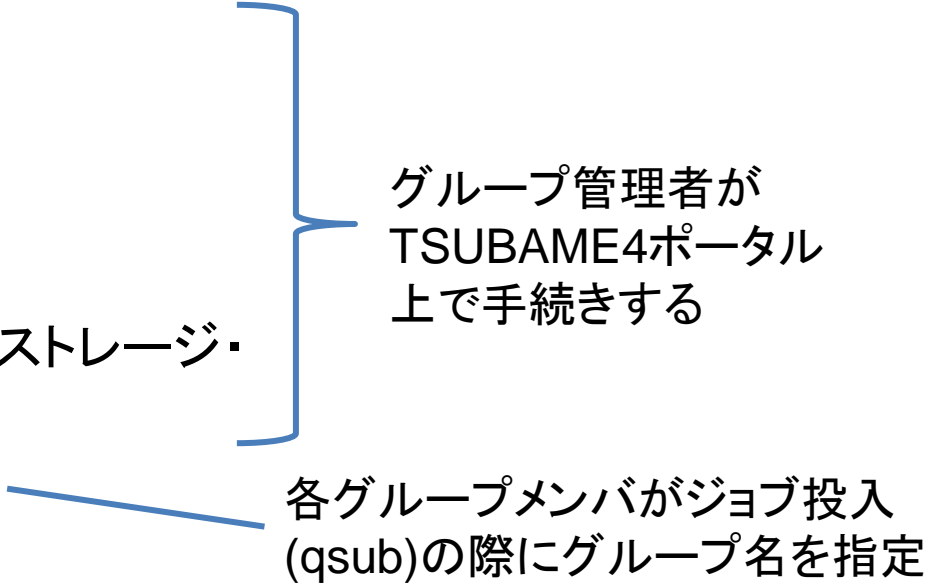
TSUBAMEポイント・TSUBAMEグループ

- 大規模にTSUBAMEを利用する場合は、TSUBAMEポイントを介して有償となります
- TSUBAMEポイントは原則、TSUBAMEグループというユーザグループ単位で購入します
 - TSUBAME3 (1ポイント≒ノード×秒)と異なり、1ポイント≒ノード×時間となりました
 - 学内グループの場合は、1000円⇒16TSUBAMEポイント (≒ノード・時)
 - 「10分未満・2ノード以下のジョブはお試し利用扱いで無償」は継続
 - 学内メンバの場合、TSUBAMEポイントを購入できる(グループの管理者・サブ管理者)のは、予算コードを持っている教職員等となります

ポイント・グループの処理の流れ

- 処理の流れはTSUBAME3と同様

- TSUBAMEグループを作成
- グループにユーザを追加
- 予算コードを登録
- グループにTSUBAMEポイントを購入
- (必要に応じて)TSUBAMEポイントを消費して共有ストレージ・商用アプリ権限を購入
- ジョブ投入のたびにTSUBAMEポイントを消費



グループ管理者が
TSUBAME4ポータル
上で手続きする

各グループメンバがジョブ投入
(qsub)の際にグループ名を指定

TSUBAME4ポータル

- ログイン方法
 - (東工大メンバ) 東工大ポータル → TSUBAME4ポータル
- 以下のサービスが利用可能
 - 全ユーザ：
 - 利用者情報の変更、利用停止
 - ジョブ情報の確認
 - 予約ジョブの操作
 - TSUBAMEグループの管理者：
 - グループの作成、管理、予算の登録
 - グループ参加者の管理、利用状況
 - TSUBAMEポイントの購入
 - 共有ストレージ(グループディスク)・商用アプリ利用権の購入、など

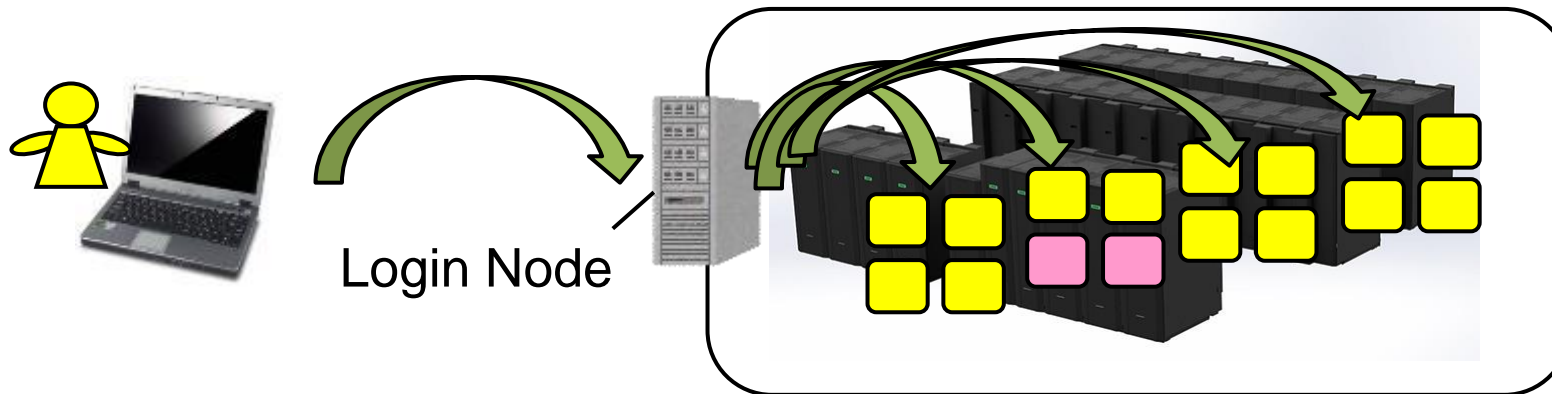
グループディスクについて

二種類のストレージから選び、「容量指定」して購入

- 共有ストレージ
 - /gs/bs/[グループ名]
 - ハードディスクベース
 - グループによる購入が必要 → 1TB × 月あたり、0.5ポイント
- **高速共有ストレージ** ← New
 - /gs/fs/[グループ名]
 - SSDベース
 - グループによる購入が必要 → 100GB × 月あたり、0.2ポイント

TSUBAME4.0におけるジョブ投入

- TSUBAME4.0において「24コア+0.5GPU」の枠を超えるには、「**ジョブスケジューリングシステム**」に対して**ジョブを投入**する必要
 - qsubコマンドなどの習得が必要
 - インタラクティブノードと違ってジョブがCPUコア/GPUを占有するのでプログラム実行速度が安定しやすい



※ ほかにもqrshコマンドや、Webサービス利用からの大規模利用もあるが、有償
※ たまたま計算機に空きがないといけないなどの制約も

ジョブの投入についての概要

前提: TSUBAME4.0では、Altair UNIVA Grid Engine(UGE)というジョブスケジューリングシステム(管理ソフト)が計算機たちの管理を行う

- ユーザは並列プログラムを用意する
- その実行に必要な計算機の規模・台数を考える
 - 「資源タイプ」の選択を行う。node_f (ノード一台まるごと)、node_q (1/4)、cpu_4 (4CPUコアだけ)...
- 資源タイプ・動かしたいプログラムの情報をもとに「**ジョブスクリプト**」ファイルを作る
- **qsub**コマンドにより、ジョブの投入を行う
 - qsubなどのコマンドは、ログインノードやインタラクティブノードで実行可能
- 結果が出るまで待つ

資源タイプ一覧

資源タイプ	使用物理CPUコア数	メモリ (GB)	GPU 数	ローカルクラッシュ領域 (GB)
node_f	192	768	4	1920
node_h	96	384	2	960
node_q	48	192	1	480
node_o	24	96	1/2	240
gpu_1	8	96	1	240
gpu_h	4	48	1/2	120
cpu_160	160	368	0	96
cpu_80	80	184	0	48
cpu_40	40	92	0	24
cpu_16	16	36.8	0	9.6
cpu_8	8	18.4	0	4.8
cpu_4	4	9.2	0	2.4

←最大

←最小

バランス型

GPU重視

CPUのみ

- 利用料金は「大きい」資源ほど高いので、必要十分な資源を選ぶのがおすすめ
- MPIジョブ等では、node_f × 4、cpu_16 × 10のように複数個の資源を利用可能
 - 異種混在は不可
- なお「インタラクティブノード」はnode_o相当を、複数ユーザで共有

Step 1. ジョブスクリプトの用意

- 下記のような構成のファイル(ジョブスクリプト)をテキストエディタなどで作成
 - 拡張子は.sh

```
#!/bin/sh
```

```
#$ -cwd
```

```
#$ -l [資源タイプ]=[個数]
```

```
#$ -l h_rt=[経過時間]
```

```
#$ -p [プライオリティ]
```

```
[必要moduleのロード]
```

```
[プログラム実行]
```

←現在のディレクトリで下記を実行する (あったほうがよい)

← 資源タイプ×個数を利用 (必須)

← 打ち切り時間を0:10:00などと指定 (必須)

← スケジューラにとっての優先度(なくてもよい)
省略時は-5, -4が中間、-3が優先度高

他のオプションについては、利用の手引き5.2.2を参照

現時点の利用の手引きと異なり、./etc/profile.d/modules.sh はなくてよい

ジョブスクリプトの例(1)

- 例: Intelコンパイラ+CUDAでコンパイルされたプログラム./a.outを実行したい

```
#!/bin/sh
#$ -cwd
#$ -l node_q=1
#$ -l h_rt=0:10:00
#$ -N GPU

module load cuda
module load intel
./a.out
```

ここではnode_q 1個とした

ジョブにすきな名前をつけてもよい

「cuda」と「intel」モジュールが必要なのでload

プログラムを実行

ジョブスクリプトの例 (2)

- OpenMPなどによる、ノード内並列ジョブの例

a.outが標準バージョンのgccでコンパイルされたとき

```
#!/bin/sh
#$ -cwd
# 資源タイプF 1ノードを使用
#$ -l node_f=1
#$ -l h_rt=1:00:00
#$ -N openmp

# ノード内に192スレッドを配置
export OMP_NUM_THREADS=192
./a.out
```

a.outがIntelコンパイラでコンパイルされたとき

```
#!/bin/sh
#$ -cwd
# 資源タイプF 1ノードを使用
#$ -l node_f=1
#$ -l h_rt=1:00:00
#$ -N openmp

module load intel
# ノード内に192スレッドを配置
export OMP_NUM_THREADS=192
./a.out
```

ジョブスクリプトの例(3)

- MPIによる、複数ノード並列の例 (Open MPI)

a.outがIntelコンパイラ + OpenMPIでコンパイルされたとき

```
#!/bin/sh
#$ -cwd
# 資源タイプF 4ノードを使用
#$ -l node_f=4
#$ -l h_rt=1:00:00
#$ -N flatmpi

# Intelコンパイラ+Open MPI環境の読込
module load openmpi/5.0.2-intel
# ノードあたり192プロセスMPI全768プロセスを使用
mpirun -npernode 192 -n 768 -x LD_LIBRARY_PATH ./a.out
```

ステップ2: qsubによるジョブ投入

```
qsub -g [TSUBAMEグループ] ジョブスクリプト名
```

- -g [TSUBAMEグループ] については、ジョブスクリプト内ではなく、ここで指定
 - 省略した場合は、お試し実行扱いとなり、2ノード10分まで

例: `qsub -g tga-ABCDE ./job.sh`

→成功すると、

Your job 3456 ("job.sh") has been submitted

のように表示されて、ジョブID(ここでは3456)が分かる

ステップ3: ジョブの状態確認

qstat [オプション]

例: qstat

→ 自分の現在のジョブ情報が表示

```
job-ID      prior    name          user          state submit/start at   queue
jclass                                slots ja-task-ID
-----
          3456 0.55500 job.sh      ua02023      r          08/03/2017 12:17:41
all.q@r16n10                                7
```

rなら実行中、qwなら待機中

• 主なオプション

オプション	説明
-r	ジョブのリソース情報を表示します。
-j (JOBID)	ジョブに関する追加情報を表示します。

ステップ4: (必要なら)ジョブの削除

```
qdel [ジョブID]
```

例: qdel 3456

ステップ5: ジョブ結果の確認

- ジョブが(`printf`などで)出力した結果は通常、下記のファイルに格納される
 - 標準出力 → [ジョブスクリプト名].o[ジョブID]
 - 標準エラー出力 → [ジョブスクリプト名].e[ジョブID]たとえば、`job.sh.o3456`と`job.sh.e3456`
- ジョブ投入時に`-N [ジョブ名]`をつけておくと、`[ジョブ名].o[ジョブID]`などに
- `-o [ファイル名]`, `-e [ファイル名]`オプションでも指定可

計算ノードの予約利用

- TSUBAME4でqsubできるジョブの最大時間(-l h_rt=...)24時間
→ それを超える方法: **ノード予約利用**
- 計算ノードを、開始時刻・終了時刻を指定して予約利用
 - 1時間単位で時刻指定
 - イメージとしてはホテルのチェックイン時刻・チェックアウト時刻
 - 通常ジョブの最大時間である、24時間も超えられる
 - TSUBAME4ポータルから予約
 - (T3からの変更) 予約枠を作れるユーザは、グループ管理者から権限を与えてもらう必要あり
 - 消費ポイントは予約タイミング・季節により変動



Tokyo Tech

TSUBAME3.0からの変更点 データ移行

TSUBAME3からの主な変更点

- ノード性能・台数・ノード単価
 - ノード分割の細分化・GPU分割の導入
- TSUBAMEポイントの単位を 1ノード秒 → 1ノード時へ
- 定額制利用の導入 (あとで説明)
- 一部商用アプリケーションへの課金 (あとで説明)
- ログイン名の命名規則の変更
 - 学内・学外問わず、u**x**00000 という形式になりました
- グループ内の権限の細分化
 - ノード予約やTSUBAME4ポイント購入、ストレージ・アプリ利用権購入の可否をグループメンバーごとに設定する必要があります
- TSUBAME3とは**ユーザ・ストレージは別管理**
 - TSUBAME3のデータは**6月末でアクセスできなくなります**

- TSUBAME3のストレージへのアクセスは**6月末まで**
 - 契約上の問題で、これ以上の延長は不可能です
 - 研究室もしくははTSUBAME4へのデータ移行をお願いします
- TSUBAME3とTSUBAME4の間に専用線を設置しました
 - TSUBAME3からのみ t4-login1, t4-login2 でアクセス
 - 詳細は、データ移行の手引きを参照してください



Tokyo Tech

有償サービスの使い方

有償サービスの範囲

- 計算ノードを使った計算(従量制の利用)
- 計算ノードの事前予約
- 定額制による月単位のノード確保(TSUBAME4で導入)
- 一部商用アプリケーションの利用(TSUBAME4で導入)
 - TSUBAME4内での利用 (月額制・ユーザ毎)
 - アプリケーション配布を受けて研究室内で利用 (年額制・研究室毎)
- TSUBAMEの有償サービスを利用する場合、「TSUBAME4ポイント」というものをTSUBAME4ポータルで購入して、上記各サービスと交換
- TSUBAME4ポイントの有効期限は年度内・繰り越し不可

有償サービス購入の流れ

- TSUBAMEグループの作成
- 支払いコード申請 (グループを作った人がやる)
 - 人手での承認作業が必要なので、時間がかかります
- 支払いコードをグループに割り当て
- TSUBAME4ポイントを購入
- 各種サービスをTSUBAME4ポイントを使って利用

- このあたりの流れはTSUBAME3と同様

学内利用の場合
教職員が実施
(例外: 学振DC)
学外利用の場合
ここまでは
センターが実施

グループ作成(学内利用者のみ)



Tokyo Tech

 TSUBAMEポータルページ

アカウント：uh02018

現在の状態：利用中

所属グループ：
[tga-RLA](#)
[hp120273](#)
[jh240074](#)

[TSUBAME利用状況] ▼
ジョブ一覧
予約ノード一覧

[利用者情報] ▼
利用者情報表示
SSH公開鍵登録
パスワード設定
利用規約一覧

[課金管理] ▼

新規TSUBAMEグループ追加

グループ管理者: uh02018

グループ区分: 東工大に在籍する教職員、学生等のみのグループ ▼

グループ名: tga-

コメント:

グループ区分で単価と所属できるユーザの範囲がことなります

グループの名称ルールについて

グループ名は1文字以上、先頭のグループ区分の文字を含んで32文字以内で作成してください。

グループ区分およびTSUBAMEポイント購入単位

● 区分一覧(学内ユーザが作成できないグループは省略)

Prefix	グループ区分	購入単位		ポイント 単価
		ポイント	円	
tga-	東工大に在籍する教職員、学生等 のみ のグループ	16	¥1,000	¥62.5/point
tgb-	他大学又は研究機関等 の研究者を含むグループ(東工大教職員と 公的競争資金 に基づく共同研究関係にある研究グループ)	5	¥1,000	¥200/point
tgc-	東工大と 国際共同研究契約 を締結した研究者又は研究グループの構成員を含むグループ	16	¥1,000	¥62.5/point
tgd-	東工大と 共同研究契約 を締結した 研究機関又は企業の研究者 を含み、共同利用専門委員会によって承認されたグループ	5	¥1,000	¥200/point
(他)	学外利用者 のみ のグループ			¥250/point

● 1TSUBAMEポイント≒1ノード×1時間

- TSUBAME3は1ノード×1秒でした

● グループ区分自体はTSUBAME3と同様

- 購入単位を小さくし、細かく買えるようにしました
- 共同研究関係のグループの単価が相対的に20%減

- 従量制
 - ジョブを実行するたびにTSUBAMEポイントを消費
 - TSUBAME3.0から変更なし
- インタラクティブジョブ専用キュー
 - 専用ノードを共有する形で「いつでも」計算ノードが使える
 - 性能に関する保証なし、学内者は無償利用可能
 - TSUBAME3.0から変更なし
- ノード予約
 - 日時・ノード数を指定して、1時間単位でノードを占有利用
 - TSUBAME4.0では10～3月の消費ポイントを倍に
- 定額制 (TSUBAME4で導入)
 - 計算ノードを月単位で「準」占有利用
 - TSUBAME4.0で導入

- 月極で1ノード単位で購入可能
1グループ・1予算責任者あたり2ノードまで、全体で50ノードまで
- 年度頭の時点で、直近の月から連続して購入することを条件に3月までのノードを確保することが可能
 - 年頭に混雑期の11~3月だけ買うというのは不可
- 確保したノードでは、購入者のグループのジョブが最優先で実行される、ただし実行時間1時間未満の他ユーザの従量制ジョブも実行されうる
 - ジョブ投入から最長で1時間後の実行開始を保証
- キューの設定変更を伴うため、切替は月初の第1営業日の昼に実施
購入は切替日の2営業日前の昼に締め切ります

2024年度の定額制ノード利用開始日と購入期限は以下のとおりです。

	4月	5月	6月	7月	8月	9月
利用開始日	提供なし	5月1日(水)	6月3日(月)	7月1日(月)	8月1日(木)	9月2日(月)
購入期限		4月26日(金)	5月30日(木)	6月27日(木)	7月30日(火)	8月29日(木)

詳細はWebの
定額制ページを
ご参照ください

ポイント消費の計算式の概略

- 従量制ジョブ
 - $\text{利用ノード数} \times \text{資源タイプ係数} \times \text{優先度係数} \times (0.7 \times \text{実際の実行時間(時)} + 0.1 \times \text{指定した実行時間(時)})$
 - 資源タイプ係数: ノード全体で1、ノードを分割するとその割合
 - 優先度係数: 通常で1、優先度を上げると大きくなる
- 予約利用・定額制
 - それぞれ $\text{ノード数} \times \text{予約係数} \times \text{時間}$
 - 予約利用: 係数は1.5~5 (4~9月)、**3.0~10(10月~3月)**
 - 定額制: 係数は10
- ストレージ
 - 1月1TBあたりHDD: 0.5ポイント、SSD: 2ポイント
- アプリ (TSUBAME4で一部有償化)
 - 別スライドで説明
- 詳細はTSUBAME4ウェブサイト経由で規約をご覧ください



Tokyo Tech

商用アプリケーション

TSUBAME4内で利用できる商用アプリケーション

東工大所属のユーザが利用可能な商用アプリケーション

開発環境、ライブラリ	シミュレーションソフトウェア
Intel oneAPI	ANSYS
NVIDIA HPC SDK	Abaqus, Abaqus CAE
AMD AOCC	Gaussian, Gauss View
ARM FORGE	AMBER
CuDNN・NCCL	Materials Studio
数値解析/可視化ソフトウェア	Discovery Studio
Mathematica	COMSOL Multiphysics
MATLAB	Schrodinger
	VASP (学術、ライセンス所持者のみ)

TSUBAME3から、一部利用者数の少なかった商用アプリケーションを廃止しました

- MSC One, AVS/Express, LS-DYNA, Maple
- これらの有償アプリケーションは非常に高額、かつ値上がりが大きく、TSUBAME3と同じアプリケーションをすべて導入することは困難でした

TSUBAME4内で利用できる商用アプリケーション

東工大に **所属していない** ユーザが利用可能な商用アプリケーション

開発環境、ライブラリ	シミュレーションソフトウェア
Intel oneAPI	ANSYS
NVIDIA HPC SDK	Abaqus, Abaqus CAE
AMD AOCC	Gaussian, Gauss View
ARM FORGE	AMBER (非営利、学術利用のみ)
CuDNN・NCCL	Materials Studio
数値解析/可視化ソフトウェア	Discovery Studio
Mathematica	COMSOL Multiphysics
MATLAB	Schrodinger
	VASP (学術、ライセンス所持者のみ)

TSUBAME3から、一部利用者の少ない商用アプリケーションを廃止しました

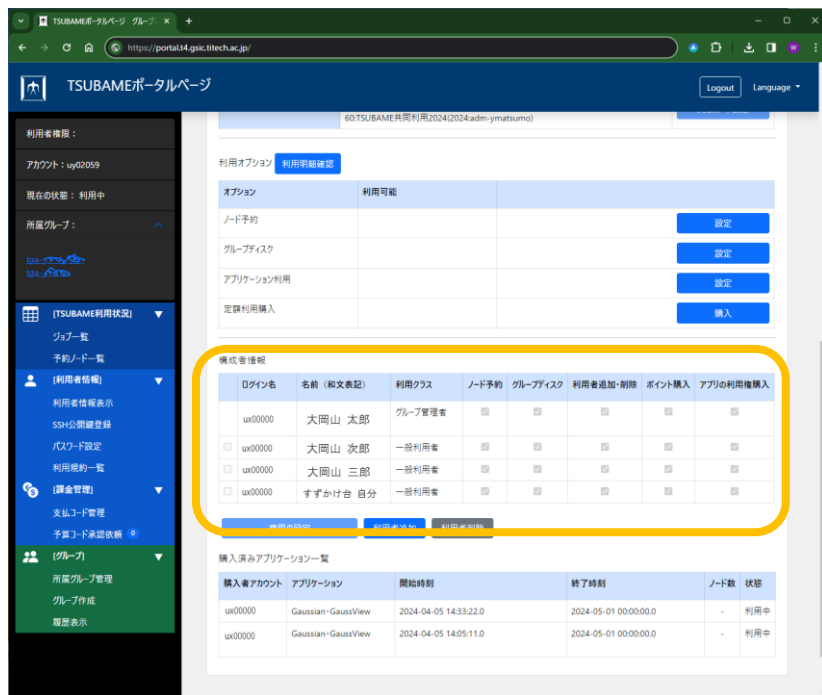
- MSC One, AVS/Express, LS-DYNA, Maple
- これらの有償アプリケーションは非常に高額、かつ値上がりが大きく、TSUBAME3と同じアプリケーションをすべて導入することは困難でした

- TSUBAME4.0では、商用アプリケーションの利用者に応分の負担を求めることとなりました
- TSUBAME内でのアプリ利用
 - 1ユーザ・1月あたりの価格を設定
- TSUBAME外(研究室)での利用のためのアプリ配布
 - 1研究室・年度あたりの価格を設定
- 初年度は、課金するということの告知と操作に慣れてもらうため、コストと比較して低額で実施しています
次年度以降適正な価格に調整(値上げ)します

TSUBAME内アプリケーション購入の方法

- アプリケーション購入権限の付与(グループ管理者)
 - TSUBAME4ポータル内、所属グループ管理を表示
 - 構成者情報のうち、権限付与したいユーザの左のボックスをチェック
 - 右側のアプリの利用権購入をチェック
 - 表の下の権限の設定を選択
- アプリケーション利用権の購入(アプリを実行する人)
 - TSUBAME4ポータル内、所属グループ管理を表示
 - 利用オプション内、アプリケーション利用を選択
 - 利用したいアプリケーションを選択
- 利用権の購入操作はアプリを実際に実行する人が行ってください
 - グループ管理者が任意のメンバーの利用権を買う機能は今後実装予定
 - 手順がわからず、誤ったユーザの利用権を買ってしまった方はお問い合わせください、TSUBAMEポイントを返却します

TSUBAME内アプリケーション購入の方法

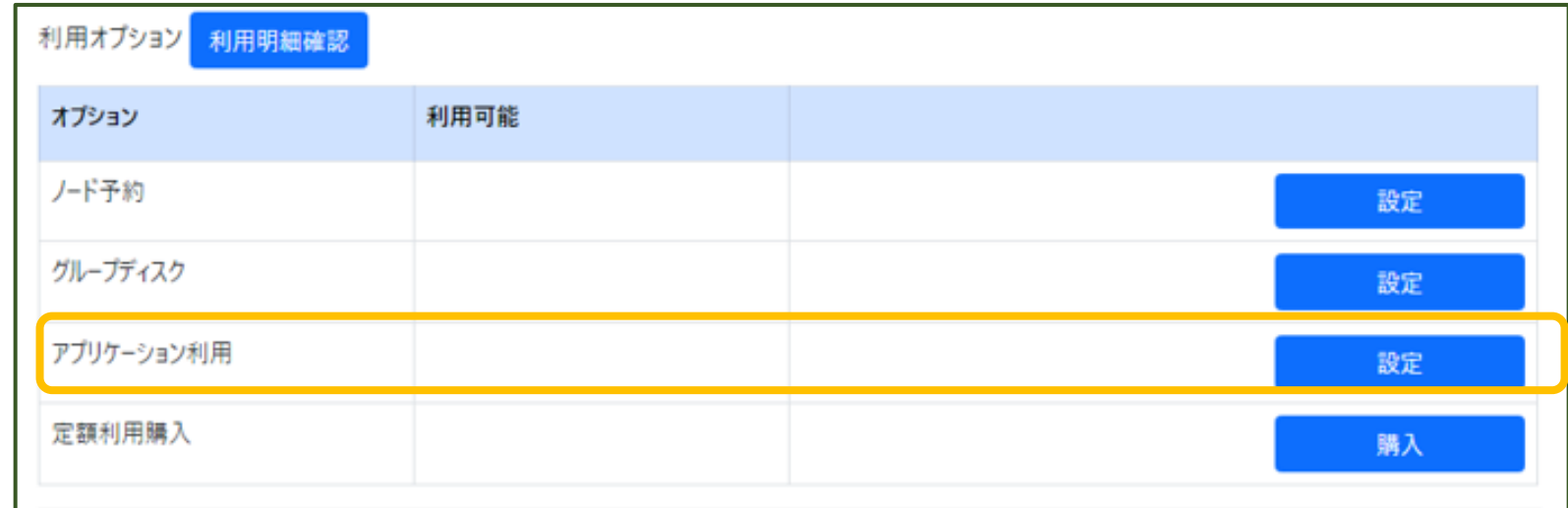
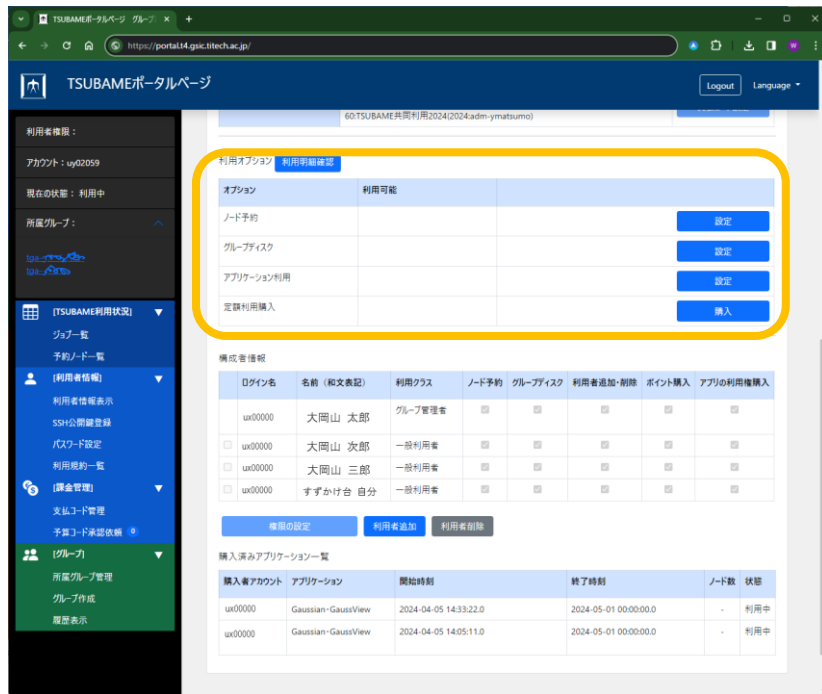


構成者情報							
ログイン名	名前 (和文表記)	利用クラス	ノード予約	グループディスク	利用者追加・削除	ポイント購入	アプリの利用権購入
<input type="checkbox"/>	ux00000	大岡山 太郎	グループ管理者	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	ux00000	大岡山 次郎	一般利用者	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	ux00000	大岡山 三郎	一般利用者	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
<input type="checkbox"/>	ux00000	すずかけ台 自分	一般利用者	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

権限の設定 利用者追加 利用者削除

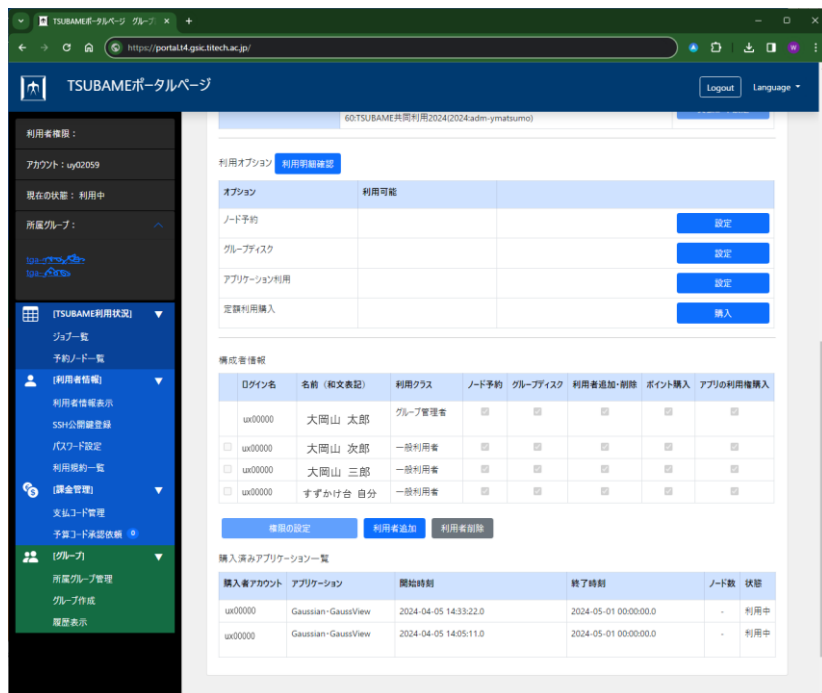
1. **自分に アプリの利用権購入** の権限
2. **アプリケーション利用** をクリック
3. 別ページでアプリの **個別購入**
4. **購入済みアプリケーション一覧**

TSUBAME内アプリケーション購入の方法



1. 自分に **アプリの利用権購入** の権限
2. **アプリケーション利用** をクリック
3. 別ページでアプリの **個別購入**
4. **購入済みアプリケーション一覧**

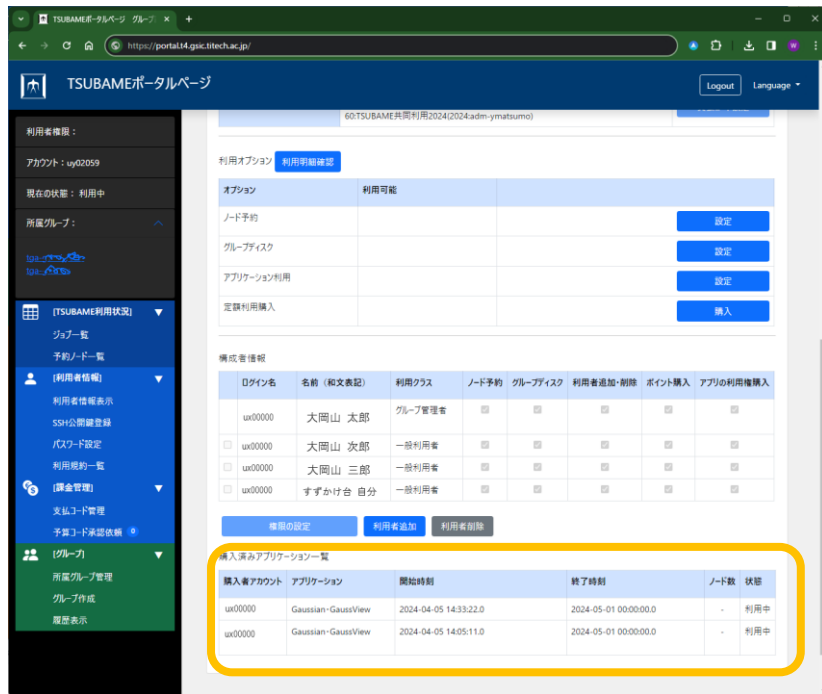
TSUBAME内アプリケーション購入の方法



個別購入		
アプリケーション	ポイント(1ヶ月あたり)	購入
ANSYS	2.00	購入
ABAQUS・ABAQUS CAE	1.00	購入
AMBER	1.00	購入
Materials Studio / Discovery Studio	3.00	購入
Mathematica	2.00	購入
COMSOL Multiphysics	2.00	購入
Gaussian・GaussView	1.00	購入
Schrodinger Small-Molecule Drug Discovery Suite	2.00	購入

1. 自分に **アプリの利用権購入** の権限
2. **アプリケーション利用** をクリック
3. **別ページでアプリの個別購入**
4. **購入済みアプリケーション一覧**

TSUBAME内アプリケーション購入の方法



購入者アカウント	アプリケーション	開始時刻	終了時刻	ノード数	状態
ux00000	Gaussian-GaussView	2024-04-05 14:33:22.0	2024-05-01 00:00:00.0	-	利用中
ux00000	Gaussian-GaussView	2024-04-05 14:05:11.0	2024-05-01 00:00:00.0	-	利用中

1. 自分に **アプリの利用権購入** の権限
2. **アプリケーション利用** をクリック
3. 別ページでアプリの **個別購入**
4. **購入済みアプリケーション一覧**

● AMBER — ライセンス改訂について

- AMBERは2023/4/15にライセンス改訂あり
 - 非営利・政府機関・学術機関のユーザのライセンス料が無償化
 - AMBER公式サイトから無償ライセンス取得可能、直接ダウンロード可能
- TSUBAME4.0のライセンスはスパコン向けライセンスで有償
 - コンパイル済みバイナリの利用・サポートの利用はTSUBAME4.0上でのAMBERアプリ利用権を購入したユーザに限らせていただきます

● VASP — コンパイル済みバイナリへのアクセス

- GSICでは VASP のスパコン用ライセンスを取得
- ライセンスを所持しているユーザからの申請により、ユーザ単位でコンパイル済みバイナリへのアクセスを許可

個別のアプリについて (2/2)

- **LS-DYNA — TSUBAME4.0では個別購入を廃止**
 - TSUBAME3.0ではJSOL社が提供するLS-DYNAを個別購入
 - TSUBAME4.0ではANSYSの一部として含まれる
 - JSOL社では研究室単位のライセンスを安価に提供している
- **HPCIで整備されたアプリケーション群**
 - まだインストールされていないが、上半期で順次整備予定
 - TSUBAME3.0では以下がインストールされていた
HΦ, MODYLAS, NTCHEM2013, OpenMX, SALMON, SMASH, ABINIT-MP, FrontFlow/blue, FrontISTR, GENESIS, PHASE/0, AkaiKKR, ALAMODE, mVMC



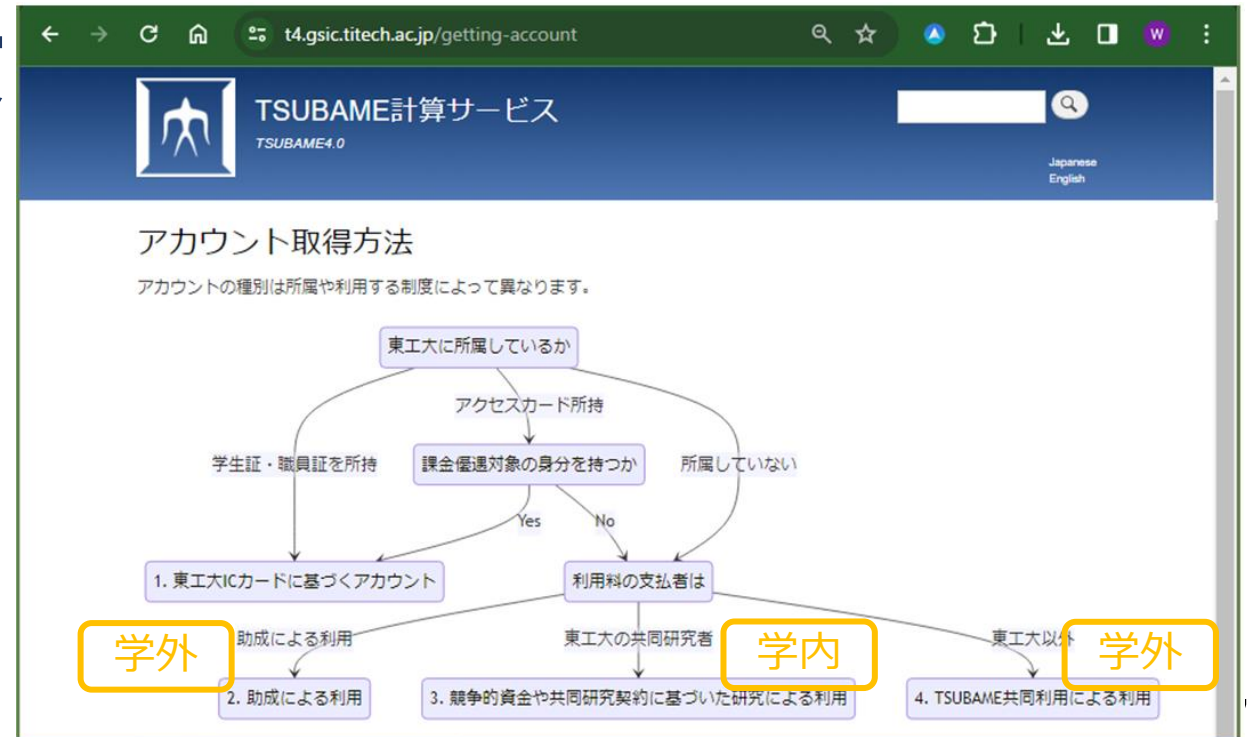
Tokyo Tech

学外者の利用

TSUBAME4.0での学内と学外の区別方法

- 利用料を支払う予算で区別

学内	東工大の予算(内部振替)
学外	東工大以外から振込
- HPCI/JHPCNなどの採択課題による利用も学外利用扱い
- 他に東工大が提供する無償利用制度も学外利用扱い
 - 若手・女性・より若い利用者支援制度
 - グランドチャレンジ大規模計算制度
- TSUBAME4計算サービス
 - > アカウント取得方法



TSUBAME4内で利用できる商用アプリケーション

開発環境、ライブラリ	シミュレーションソフトウェア
Intel oneAPI	ANSYS
NVIDIA HPC SDK	Abaqus, Abaqus CAE
AMD AOCC	Gaussian, Gauss View
ARM FORGE	AMBER (非営利、学術利用のみ)
CuDNN・NCCL	Materials Studio
数値解析/可視化ソフトウェア	Discovery Studio
Mathematica	COMSOL Multiphysics
MATLAB	Schrodinger
	VASP (学術、ライセンス所持者のみ)

- 商用アプリケーションのライセンスのほとんどは利用できません。
利用したい場合は、自らライセンスを確保してください。
その他のフリーソフトウェアなどは利用可能です。
- 学外ユーザ向けのライセンスサーバー用のマシンはなくなりました。
商用アプリを利用の際はご自身でライセンスサーバーをご用意ください。
計算ノードから外部インターネットへのアクセスはT3と同様の予定です。

● 区分一覧(学外利用に相当するグループ)

Prefix	グループ区分	購入単位		ポイント 単価	購入上限
		ポイント	円		
tgh-	TSUBAME共同利用 (学術利用・成果公開)	400	¥110,000	¥250/point	60口 (=400point×60)
tgi-	TSUBAME共同利用 (産業利用・成果公開)	400	¥110,000	¥250/point	30口 (=400point×30)
tgj-	TSUBAME共同利用 (産業利用・成果非公開)	400	¥440,000	¥1000/point	30口 (=400point×30)
hp	HPCIに基づくグループ	400	—	無償	135口 (=400point×135)
jh	JHPCNに基づくグループ	400	—	無償	27口 (=400point×27)
tge-	若手・女性・より若利用者支援制度 グランドチャレンジ大規模計算制度	400	—	無償	3口 (=400point×3) 全ノード/80ノード 占有利用

- アカウント名は学内者と区別なく ux00000 の形式
 - HPCI/JHPCNも、HPCI-IDではなくなった
- グループディスク容量：(GSICに依頼ではなく)ユーザがポータルで変更可能になった

TSUBAME4.0の学外利用制度

利用区分	利用者	制度		募集時期	申請および審査	成果	料金（税別）
学術利用	大学 または 研究機関 等	HPCI	一般課題	年1回 10月頃	HPCI運用事務局 (高度情報科学技術研究機構)	公開	無償
		JHPCN		年1回 12月頃	JHPCN拠点事務局 (東京大学 情報基盤センター)	公開	無償
		TSUBAME共同利用（学術利用）		随時募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	1口 110,000 円(税込)
		TSUBAMEグランドチャレンジ 大規模計算制度		年数回 (春期、秋期)	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	無償
		TSUBAME若手・女性・ より若い世代の利用者支援制度		年2回/随時募集	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	無償
産業利用	民間企業	HPCI	産業課題	年1回 10月頃	HPCI運用事務局 (高度情報科学技術研究機構)	公開	無償
			産業試行課題 (旧 トライアル・ユース)	随時募集中			
		JHPCN	企業共同研究課題	年1回 12月頃	JHPCN拠点事務局 (東京大学 情報基盤センター)	公開	無償
		TSUBAME共同利用（産業利用）		随時募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開 非公開	1口 110,000 円(税込) 1口 440,000 円(税込)

TSUBAME4.0の学外利用制度

利用区分	利用者	制度		募集時期	申請および審査	成果	料金（税別）
学術利用	大学 または 研究機関 等	HPCI	一般課題	年1回 10月頃	HPCI運用事務局 (高度情報科学技術研究機構)	公開	無償
		JHPCN		年1回 12月頃	JHPCN拠点事務局 (東京大学 情報基盤センター)	公開	無償
		TSUBAME共同利用（学術利用）		随時募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	1口 110,000 円(税込)
		TSUBAMEグランドチャレンジ 大規模計算制度		年数回 (春期、秋期)	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	無償
		TSUBAME若手・女性・ より若い世代の利用者支援制度		年2回/随時募集	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	無償
産業利用	民間企業	HPCI	産業課題	年1回 10月頃	HPCI運用事務局 (高度情報科学技術研究機構)	公開	無償
			産業試行課題 (旧 トライアル・ユース)	随時募集中			
		JHPCN	企業共同研究課題	年1回 12月頃	JHPCN拠点事務局 (東京大学 情報基盤センター)	公開	無償
		TSUBAME共同利用（産業利用）		随時募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開 非公開	1口 110,000 円(税込) 1口 440,000 円(税込)

TSUBAME4.0の学外利用制度

利用区分	利用者	制度		募集時期	申請および審査	成果	料金（税別）
学術利用	大学 または 研究機関 等	HPCI	一般課題	年1回 10月頃	HPCI運用事務局 (高度情報科学技術研究機構)	公開	無償
		JHPCN		年1回 12月頃	JHPCN拠点事務局 (東京大学 情報基盤センター)	公開	無償
		TSUBAME共同利用（学術利用）		随時募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	1口 110,000 円(税込)
		TSUBAMEグランドチャレンジ 大規模計算制度		年数回 (春期、秋期)	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	無償
		TSUBAME若手・女性・ より若い世代の利用者支援制度		年2回/随時募集	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	無償
産業利用	民間企業	HPCI	産業課題	年1回 10月頃	HPCI運用事務局 (高度情報科学技術研究機構)	公開	無償
			産業試行課題 (旧 トライアル・ユース)	随時募集中			
		JHPCN	企業共同研究課題	年1回 12月頃	JHPCN拠点事務局 (東京大学 情報基盤センター)	公開	無償
		TSUBAME共同利用（産業利用）		随時募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開 非公開	1口 110,000 円(税込) 1口 440,000 円(税込)

TSUBAME4.0で東工大が提供する無償利用制度



- TSUBAMEグランドチャレンジ大規模計算制度
 - カテゴリA：全ノードを用いた大規模計算のピーク性能(計算速度)を目指す **(課題募集終了)**
 - カテゴリB：大規模かつ膨大な計算量が必要な課題、全体の1/3を1週間占有利用可能
カテゴリB(6月実施分) **公募受付締切 4月15日(月) 17:00**
https://www.gsic.titech.ac.jp/GrandChallenge/R06_1st_GC
- TSUBAME若手・女性利用者支援制度 (最大3口、1200ノード時間)
 - 若手利用者(40歳未満、含む大学院生)及び女性利用者(年齢不問)の優れた研究課題を公募
 - **第2回公募受付期間は4月30日(火)～6月3日(月)17時**
https://www.gsic.titech.ac.jp/encouragement_program/young_female_r06
- TSUBAMEより若い世代の利用者支援制度 (1口、400ノード時間)
 - より若い世代(大学生、高校生、高専生)を対象とした研究課題を公募
 - **(随時公募、公募受付中) 受付締切は令和6年12月16日(月)17時**
https://www.gsic.titech.ac.jp/encouragement_program/younger_r06