

オープンサイエンスを促進する計算・ストレージプラットフォーム OCTOPUS: Osaka university Compute & sTorage Platform Urging open Science

高橋 慧智

大阪大学 D3 センター 先進高性能計算基盤システム研究部門

1. はじめに

本センター [1]では、2024 年度末に運用を終了したペタフロップス級ハイブリッド型スーパーコンピュータ OCTOPUS [2]の後継機として、新たな計算基盤の導入を進めてきた。本稿では、2025 年 9 月に試験運用を開始し、同年 12 月より本格運用を開始した新 OCTOPUS について、その導入の背景・経緯、システムの概要や特徴的な機能、そして利用方法を紹介する。

本センターでは、2021 年 5 月より運用している高性能計算・データ分析基盤システム SQUID [3]を中核に計算資源を提供してきた。一方、2017 年 12 月より運用していた旧 OCTOPUS は 2024 年 3 月末をもってサービス終了し、その後は本センターの計算資源が SQUID のみとなる状況が続いていた。SQUID は運用開始直後から高い利用率を維持し、繁忙期となる年度末には長い待ち時間が常態化していた。利用者の皆様からも、SQUID の待ち時間緩和や計算資源の拡充を望む声を多くいただいていた。

こうした状況を受け、本センターは旧 OCTOPUS の後継として新たな計算基盤の構築を計画した。新 OCTOPUS では、運用開始時点で最新である Granite Rapids 世代の Intel 製プロセッサを採用し、限られた予算の中で最大限の計算性能を引き出すとともに、SQUID とのジョブの分散による繁忙期の混雑緩和、さらには計算来歴の追跡・管理機能の提供によるオープンサイエンスの推進という 3 つのコンセプトに基づき設計した。

本稿ではまず OCTOPUS 導入の背景および本センターを取り巻く状況を述べ、続いて調達方針、システムの概要、特徴的な機能、利用方法を順に紹介する。

2. OCTOPUS 導入の背景・経緯

2.1 D3 センターの高性能計算環境

本センターでは、2026 年 6 月現在、3 種類の計算基盤を運用している。1 つ目は、2021 年 5 月より運用している高性能計算・データ分析基盤システム SQUID である。SQUID は汎用 CPU ノード群、GPU ノード群、ベクトルノード群からなるハイブリッド型スーパーコンピュータであり、総理論演算性能は 16.591 PFLOP/s に達する。2 つ目が本稿で紹介する計算・ストレージ基盤 OCTOPUS である。3 つ目は 2024 年 11 月より運用しているクラウド基盤 mdxII である。さらに、SQUID と同時に 2021 年 5 月より運用しているデータ集約基盤 ONION [4]を介して、これら計算基盤と学内外の研究データを連携させる仕組みを提供している。

各計算基盤は、利用者の計算ニーズや研究スタイルに応じて使い分けることを想定している。SQUID は大規模並列計算や機械学習のための中核的な計算基盤、OCTOPUS は汎用 CPU 計算向けの計算基盤、mdxII は仮想計算機環境を必要とする研究や常時稼働を要するサービスの提供基盤として、それぞれ役割分担している。

2.2 旧 OCTOPUS の歩みとその後継機への期待

旧 OCTOPUS は 2017 年 12 月より運用を開始したペタフロップス級ハイブリッド型スーパーコンピュータである。汎用 CPU ノード群、GPU ノード群、Xeon Phi ノード群、大容量主記憶搭載ノード群の 4 種類からなる構成は当時として先駆的なものであり、多様な研究分野の計算ニーズに応える基盤として広く活用された。

しかし、旧 OCTOPUS は 2024 年 3 月末をもって契約満了を迎えサービス終了となった。旧 OCTOPUS のサービス終了後、本センターの汎用

CPU 型スーパーコンピュータは SQUID の汎用 CPU ノード群のみとなった。SQUID は旧 OCTOPUS と比べて大きな演算性能を持つものの、汎用 CPU に対する計算需要は本学全体で年々増加傾向にあり、特に年度末の繁忙期には待ち時間の長期化が顕著であった。この状況を踏まえ、汎用 CPU 型計算資源の強化が不可欠だと判断し、新 OCTOPUS の調達準備を進めてきた。

2.3 新 OCTOPUS のコンセプト

新 OCTOPUS の設計にあたり、次の 3 つのコンセプトを掲げた。

1 つ目は「最新プロセッサの早期提供」である。新 OCTOPUS では、2024 年 9 月に発表された Intel 社の最新世代プロセッサ Intel Xeon 6（コードネーム Granite Rapids）を全国の大学計算基盤センターに先駆けて導入し、運用開始時点での高い汎用 CPU 演算性能の提供を目指した。

2 つ目は「繁忙期の混雑緩和」である。新 OCTOPUS の計算資源を SQUID の汎用 CPU 資源と相補的に利用できるよう設計し、特に年度末などの繁忙期に利用者のジョブを SQUID と OCTOPUS へ分散させ、ジョブ待ち時間の短縮を図る。

3 つ目は「オープンサイエンスの支援」である。近年、研究データの再現性確保や研究成果の透明性向上、研究データの再利用促進といったオープンサイエンスへの取り組みが学术界で広がっている。新 OCTOPUS では、計算結果がどのようなデータとプログラムを用いて生成されたかを追跡・管理する計算来歴管理機能を提供し、本学のオープンサイエンス推進に貢献する。

これら 3 つのコンセプトは、次節以降で述べる調達方針およびシステム設計の指針となった。

3. 新 OCTOPUS の調達と方針

3.1 調達経緯

新 OCTOPUS の調達準備は、旧 OCTOPUS のサービス終了が決定した 2023 年度後半より本格的に開始した。本センターでは、2.3 節で述べた 3 つのコンセプトを実現するための要素技術調査、想定構成の検討、各社からの情報収集を継続的に進めてきた。

新 OCTOPUS は汎用 CPU ノード群を中心とした構成を採用した。これは、2.2 節で述べた汎用 CPU 需要の増大と繁忙期の待ち時間長期化に加え、GPU やベクトルプロセッサは SQUID が既に提供していることを踏まえた判断である。一方、汎用 CPU ノードに搭載するプロセッサについては、コンセプトに掲げた「最新プロセッサの早期提供」を実現するため、運用開始時期に発表される最新世代のプロセッサを採用できるよう、仕様書の表現や評価指標の設計を慎重に決定した。

計算ノード以外の構成要素についても、本センターが既に運用している SQUID や ONION との親和性を考慮しながら、利用者の利便性が高くなるよう、フロントエンドノードの構成、ストレージシステム、ネットワーク構成について検討を重ねた。

新 OCTOPUS は「全国共同利用スーパーコンピューティングシステム」を調達名称とし、一般競争入札方式で調達した。まず、市場調査と仕様検討のため、2021 年 8 月、2022 年 2 月、2023 年 12 月の 3 回にわたって資料提供招請を実施し、各社から資料の提出を受けた。これらを精査した上で仕様書案を作成し、2024 年 5 月 1 日に意見招請を公示、5 月 9 日にオンラインで仕様書案説明会を開催し、6 月 28 日を締切として各ベンダ企業からの意見を招請した。寄せられた意見を踏まえて最終仕様書を確定させたのち、2024 年 10 月 7 日に入札官報公告を実施し、同年 10 月 15 日にオンラインで入札説明会を実施した。入札期限は 2024 年 12 月 3 日に設定し、技術審査委員会による審査を経て、2025 年 1 月 31 日に開札となった。その結果、日本電気株式会社が落札し、借入期間を 2025 年 9 月 1 日から 2031 年 8 月 31 日とする契約が締結された。以後、新 OCTOPUS の構築に向けて、本センターと日本電気株式会社、ならびに各機器ベンダとの緊密な連携のもとで設計・構築作業を進めた。

3.2 設計方針

新 OCTOPUS の設計にあたっては、2.3 節で述べた 3 つのコンセプトを実現するため、次の方針を採用した。

「最新プロセッサの早期提供」については、運用

開始時点で発表されたばかりの Intel Xeon 6 プロセッサ（Granite Rapids）の最上位モデルを採用し、1 ノードあたり 128 コア×2 基（合計 256 コア）の高密度な構成とした。この構成により、1 ノードあたり 16.384 TFLOP/s の高い理論演算性能を達成している。

「繁忙期の混雑緩和」については、OCTOPUS と SQUID のスケジューラに同一の NQSV を採用し、ジョブスクリプトの記述方法を可能な限り共通化することで、利用者が両システムいずれにもジョブを投入しやすい環境を整えた。また、OCTOPUS のフロントエンドから SQUID のファイルシステムを、SQUID のフロントエンドから OCTOPUS のファイルシステムをそれぞれマウントしており、両システム間のファイルの受け渡しが容易に行えるようにした。

「オープンサイエンスの支援」については、本センターの高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所で研究開発を進めている計算来歴管理基盤 SCUP-HPC [5]を OCTOPUS 上で提供した。SCUP-HPC を用いれば、OCTOPUS 上で生成された計算結果が、どのような入力データとプログラムからどのように生成されたかを追跡・管理できる。

さらに、これら 3 つのコンセプトに加えて、組合せ最適化問題を高速に解く NEC Vector Annealing [6]、繁忙期にジョブの一部をパブリッククラウドへオフロードするクラウド連動機能、グループ単位で占有可能な仮想フロントエンドサーバ機能も併せて提供し、利用者の多様な計算ニーズに応える基盤とした。

4. 新 OCTOPUS の概要

4.1 全体構成

新 OCTOPUS の全体構成を図 1 に示す。OCTOPUS は、汎用 CPU 計算ノード群（NEC LX201 Ein-1、140 ノード）、ファイルサーバ（DDN ES400NVX2）、フロントエンドサーバ群（HPC 用フロントエンドノード 2 台、占有型フロントエンドノード 1 台）、ならびに管理サーバ群などから構成される。計算ノードとファイルサーバ間は InfiniBand NDR による相互結合網で接続し、フロントエンドネットワーク（Ethernet）を介して学内ネットワークと接続している。



図 1：新 OCTOPUS の全体構成

OCTOPUS の総コア数は 35,840、総理論演算性能は 2.293 PFLOP/s に達する。表 1 に OCTOPUS の構成概要を示す。また、図 2 に本センターの IT コア棟に設置された OCTOPUS の外観を、図 3 に OCTOPUS 設置エリアの入り口を示す。OCTOPUS のラックには、蛸と桜のラックペイントを施している。このデザインは、OCTOPUS の導入・運用開始を記念して一般公募したラックデザインコンテストの最優秀賞作品を採用したものである。

表 1：新 OCTOPUS の構成概要

項 目	内 容
汎用 CPU 計算ノード	NEC LX201 Ein-1 140 ノード（総コア数 35,840、総理論性能 2.293 PFLOP/s）
相互結合網	InfiniBand NDR（200 Gbps）
フロントエンドサーバ	HPC 用フロントエンドノード 2 台、占有型フロントエンドノード 1 台
ストレージ	DDN ES400NVX2（並列ファイルシステム Lustre、有効容量 3.58 PB、実効スループット 40 GB/s）
ジョブスケジューラ	NEC NQSV
OS	Red Hat Enterprise Linux Rocky Linux



図 2：OCTOPUS の外観（ラックペイント）



図 3：OCTOPUS 設置エリアの入り口

4.2 汎用 CPU 計算ノード

OCTOPUS の汎用 CPU 計算ノードは、NEC LX201 Ein-1 という型番のサーバである。1 ノードに、Intel Xeon 6980P プロセッサを 2 基、768 GiB の主記憶 (32 GiB DDR5-6400 DIMM 24 枚)、InfiniBand NDR200 HCA を 1 基、Gigabit Ethernet インタフェース 1 基を搭載している。表 2 に NEC LX201 Ein-1 の構成を示す。

表 2：NEC LX201 Ein-1 の構成

項 目	仕 様
プロセッサ	Intel Xeon 6980P (Granite Rapids、2.0 GHz、128 コア) 2 基
理論演算性能	16.384 TFLOP/s (= 8.192 TFLOP/s × 2CPU)
メモリ構成	768 GiB (32 GiB DDR5-6400 DIMM 24 枚)
メモリ帯域幅	1,228.8 GB/s (= 614.4 GB/s × 2CPU)
ネットワーク	InfiniBand NDR200 Gigabit Ethernet
冷却方式	水冷 (CPU コールドプレート方式)

Intel Xeon 6980P は、Intel 社が 2024 年 9 月に発表した Intel Xeon 6 プロセッサシリーズの最上位モデルである。コードネーム Granite Rapids として知られるこのプロセッサは、Intel 3 プロセスで製造され、Redwood Cove マイクロアーキテクチャに基づくコアを 128 コア搭載する。各コアは 2.0 GHz で動作し、AVX-512 命令セット (512 ビット幅の SIMD 命令) や AMX 命令セット (行列積演算命令) に対応する。1CPU あたりの理論演算性能 (倍精度) は

8.192 TFLOP/s、1 ノードあたりでは 16.384 TFLOP/s である。

Intel Xeon 6980P は、SQUID が採用する Intel Xeon Platinum 8368 (Ice Lake-SP 世代、38 コア) に対して、コア数で約 3.4 倍、1CPU あたりの理論演算性能で約 2.8 倍と、複数世代を経ているため大幅な性能向上を達成している。一方、1CPU あたりの消費電力も 270 W から 500 W へと約 1.8 倍に増加しているため、本ノードでは SQUID と同様に液冷方式を採用し、安定した性能を引き出す。計算ノードラックの背面を図 4 に示す。

メモリは 1 ノードあたり 768 GiB を搭載し、SQUID の汎用 CPU ノード (256 GiB) の 3 倍の容量にあたる。メモリ世代も DDR4-3200 から DDR5-6400 へ進み、1CPU あたりのメモリ帯域幅は 614 GB/s で SQUID の汎用 CPU ノード (204 GB/s) の約 3.0 倍にあたる。



図 4：計算ノードラック背面

4.3 ファイルシステム

OCTOPUS のファイルシステムは、DDN 社製 DDN ES400NVX2 ストレージアプライアンスを中心に構成する並列ファイルシステム (Lustre) である。ストレージサーバ 1 台、エンクロージャ 4 台、NFS サーバ 2 台、メタデータバックアップサーバ 1 台、モニタリングサーバ 1 台で構成する。図 5 に DDN 製ストレージアプライアンスの外観を示す。

並列ファイルシステムの有効容量は 3.58 PB、実効スループットは 40 GB/s 以上で、SQUID の並列ファイルシステム (有効容量 21.20 PB、最大想定実効スループット 160 GB/s 以上) と比べれば容量・帯域幅は小さいが、OCTOPUS のノード規模に見合った構成である。なお、OCTOPUS のフロントエンドからは SQUID のファイルシステムを /sqfs としてマウ

ントしており、両システム間で容易にファイルを共有できる。

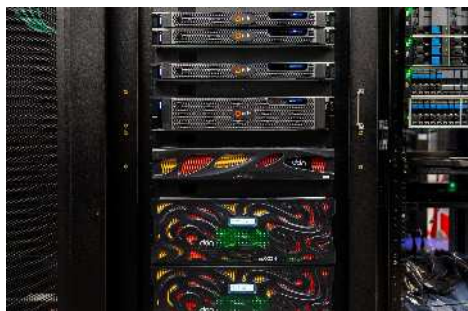


図 5：DDN 製ストレージアプライアンス

4.4 相互結合網

OCTOPUS の相互結合網は、最新世代の InfiniBand NDR を採用している。計算ノードは、各ノードあたり 1 本の InfiniBand NDR200 (200 Gbps) リンクで接続する。InfiniBand NDR は、PCI Express Gen5 に対応した HCA とスイッチによって構成し、ノード間通信において広帯域幅と低遅延を実現する。これにより、MPI 等を用いた大規模並列計算を可能にしている。

4.5 フロントエンドノード

OCTOPUS のフロントエンドノードは、HPC 用フロントエンドノード 2 台、占有型フロントエンド用ノード 1 台で構成する。HPC 用フロントエンドノードは、利用者が日常的にログインし、プログラムの開発・コンパイル、ジョブの投入・確認などに用いるノードである。各フロントエンドノードは、計算ノードと同じ Intel Xeon 6980P プロセッサを 2 基、768 GiB の主記憶、NVIDIA L4 GPU を 1 基搭載しており、利用者は計算ノードと同じ CPU 環境でプログラムを開発できる。NVIDIA L4 GPU は、リモート可視化等に活用できる。

占有型フロントエンドノードは、特定の利用者グループが占有して使える仮想フロントエンドサーバを提供するためのノードである。プロセッサは Intel Xeon 6980P を 2 基、メモリは 1,152 GiB を搭載する。占有型フロントエンドの利用方法は 5.3 節で詳述する。

4.6 性能

OCTOPUS の性能を、旧 OCTOPUS および SQUID との諸元比較と、実アプリケーションによるベンチマークの 2 つの観点から示す。

表 3 に、旧 OCTOPUS、SQUID、OCTOPUS それぞれの汎用 CPU ノードの性能諸元を示す。新 OCTOPUS の Intel Xeon 6980P は、SQUID の Intel Xeon Platinum 8368 と比べて、コア数で約 3.4 倍、1CPU あたりの理論演算性能で約 2.8 倍、メモリ帯域幅で約 3.0 倍、メモリ容量で約 3.0 倍、LLC 容量で約 8.8 倍と、世代間で大幅な性能向上を達成している。

表 3：旧 OCTOPUS・SQUID・新 OCTOPUS の諸元比較

項 目	旧 OCTOPUS	SQUID	新 OCTOPUS
搭載 CPU	Intel Xeon Gold 6126 2 基	Intel Xeon Platinum 8368 2 基	Intel Xeon 6980P 2 基
コア数 /CPU	12 コア	38 コア	128 コア
演算性能 /CPU	0.998 TFLOP/s	2.918 TFLOP/s	8.192 TFLOP/s
メモリ帯域幅 /CPU	127 GB/s	204 GB/s	614 GB/s
メモリ容量	192 GB	256 GB	768 GB
LLC 容量 /CPU	19 MB	57 MB	504 MB
電力 /CPU	125 W	270 W	500 W

次に、実アプリケーションでの性能比較を示す。図 6 は、Intel Xeon Platinum 8380 (SQUID の CPU と同世代) と Intel Xeon 6980P (新 OCTOPUS の CPU) の各種 HPC アプリケーション (WRF 4.2.2、RELION 4.0.1、LAMMPS、GROMACS 2024、HPCG 2.1、NAS Parallel Benchmarks SP/IS/MG、OpenFOAM 10) での性能比較である。Phoronix 社による性能評価結果 [7] をもとに作成した。アプリケーションによる差はあるものの、概ね 2.6～5.1 倍の性能向上が見られる。

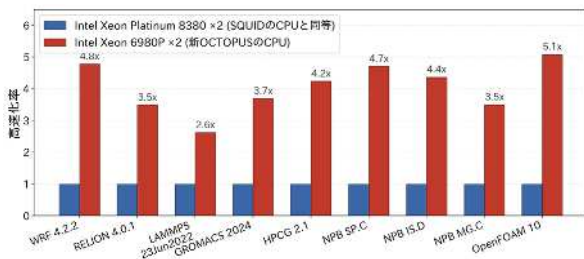


図 6：Intel Xeon 8380 と Intel Xeon 6980P のアプリケーション性能比較（Phoronix 社の評価結果 [7]より）

また、SPEChpc 2021 ベンチマーク [8]の tiny サイズを用いて、本センターで SQUID と OCTOPUS の実測値も比較した。図 7 にその結果を示す。縦軸は SQUID を 1.0 とした相対性能、横軸は各ベンチマークアプリケーションである。SQUID は 2 MPI × 38 OpenMP スレッドの構成、OCTOPUS は 2 MPI × 128 OpenMP スレッドの構成および 256 MPI の構成での結果を示す。OCTOPUS は、SQUID に対しておよそ 1.7～8.3 倍の性能向上を達成している。

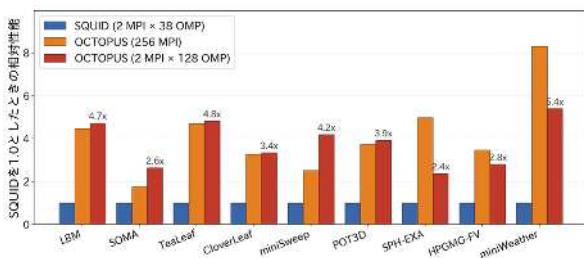


図 7：SPEChpc 2021 ベンチマーク（tiny サイズ）による SQUID と OCTOPUS の実測性能比較（縦軸は SQUID を 1.0 としたときの相対性能）

以上の結果から、新 OCTOPUS は旧 OCTOPUS や現行 SQUID の汎用 CPU ノードと比べて、スペック上のみならず、実アプリケーション性能で大幅な向上を達成していることがわかる。

5. 新 OCTOPUS の特徴的な機能

本節では、新 OCTOPUS に搭載した特徴的な機能を、計算来歴の追跡・管理機能（SCUP-HPC）、擬似量子アニーリング（NEC Vector Annealing）、占有型フロントエンドノード、クラウド連動機能、そして提供ソフトウェアの順に紹介する。

5.1 計算来歴の追跡・管理機能（SCUP-HPC）

近年、研究データの再現性確保や研究成果の透明

性向上は、学术界全体で関心の高いテーマとなっている。一方、スーパーコンピュータ上で行われる大規模な数値計算では、計算結果がどのような入力データとプログラムを用いて、いかなる手順で生成されたかという「計算来歴」の記録は、依然として利用者個人の努力に委ねられている。

本センターでは、2.3 節で述べたコンセプトの一つ「オープンサイエンスの支援」を実現するため、計算来歴管理基盤 SCUP-HPC（System for Constructing and Utilizing Provenance on High-Performance Computing Systems）[5]の研究開発を進めてきた。SCUP-HPC は、本センターと NEC が 2021 年に設立した高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所で開発された技術であり、OCTOPUS 上で得られた計算結果が、どのようなデータとプログラムを用いて、どのように生成されたかを追跡・管理する機能を提供する。

SCUP-HPC を用いると、利用者が OCTOPUS 上でプログラムを実行して研究データを生成する際に、入力データ・プログラム・出力データの関係性が自動的にデータカタログとして記録される。記録された来歴情報は、研究活動の効率化、データの信頼性・再現性の向上、データ活用の促進に寄与する。さらに、来歴情報は OCTOPUS 利用者以外も閲覧可能な形で公開を予定しており、研究データの再利用の促進や、他の研究者との連携の活性化への貢献も見込まれる。

なお、来歴追跡機能はデフォルトでは無効であり、利用者がジョブスクリプト中で明示的に有効化することで利用できる。これにより、来歴追跡が不要な計算（試行錯誤やデバッグ目的の計算など）と、来歴追跡を残したい計算（最終的な研究成果に紐づく計算）とを利用者が使い分けられる。SCUP-HPC の詳細な利用方法は本センターのウェブページ [14]を参照されたい。

5.2 擬似量子アニーリング（NEC Vector Annealing）

OCTOPUS では、組合せ最適化問題を高速に解くソフトウェアとして、NEC Vector Annealing [6]を無償で提供している。NEC Vector Annealing は、量子アニ

ーリングマシンと同等の動作を従来型のプロセッサ上で擬似的に実現するソフトウェアであり、QUBO (Quadratic Unconstrained Binary Optimization) 形式で記述された最適化問題を高速に求解できる。

組合せ最適化問題は、膨大な選択肢の中から、制約条件を満たしつつ評価関数を最小化（あるいは最大化）する組み合わせを見つける問題である。順番決め、スケジューリング、マッチング、資源配分など、産業界や学術研究の現場の多くの実問題が組合せ最適化問題として定式化できる。これらは選択肢の数が増えるにつれて計算量が急速に増加するため、現実的な時間で解を得るのが困難になることが多い。NEC Vector Annealing は、ヒューリスティックではあるものの、こうした問題に対して実用的な時間内に高品質な解を返す。

NEC Vector Annealing は Python および C++言語の API を備えており、利用者は使い慣れたプログラミング言語から呼び出せる。組合せ最適化問題を QUBO 形式に定式化し、NEC Vector Annealing の API に渡せば求解できる。具体的な利用方法は本センターのウェブページ [6]に詳述している。

5.3 占有型フロントエンドノード

OCTOPUS では、特定の利用者グループが仮想フロントエンドサーバを占有して使える「占有型フロントエンドノード」を提供している。本機能は追加料金が発生する有償サービスである。

従来の HPC 用フロントエンドノードはすべての利用者で共有するため、複数の利用者が同時にソフトウェアのコンパイルや高負荷なプリ・ポスト処理をすると、フロントエンドノードの計算資源(CPU、メモリ)が逼迫し応答性能が低下することがある。とりわけ可視化処理やデータ前処理のように、長時間にわたり大きな計算資源を消費する処理は、他の利用者への影響が問題になりやすい。

占有型フロントエンドノードでは、利用者グループごとに仮想マシンとして専有できるフロントエンドサーバを提供する。各グループは割り当てられた仮想 CPU 数とメモリ容量を自由に使い、他グループの利用状況に左右されることなく安定した応答性能で利用できる。負荷の高いプリ・ポスト処理や長時

間にわたる対話的処理を効率良く実行できる。

占有型フロントエンドノードの利用を希望される利用者グループは、本センターまでお問い合わせいただきたい。

5.4 クラウド連動機能

OCTOPUS では、利用者から投入されたジョブの一部をパブリッククラウド上で実行する「クラウド連動機能」を提供している。本機能は、SQUID で実現されたクラウドバースティング機能 [3]を継承したものであり、繁忙期にジョブ待ち時間が長期化した際、クラウド上の計算資源を活用して待ち時間を短縮する。

利用者は、ジョブスクリプト中でクラウド転送を許可するオプションを明示的に指定することで、当該ジョブをクラウド実行の対象にできる。クラウド転送を許可したジョブは、OCTOPUS 高負荷時にスケジューラの判断でクラウド上へ転送され実行される。クラウド資源はオンプレミス資源に比べてコストが高いことから、本機能の運用は本センターの予算状況に依存する。利用方法の詳細は本センターのウェブページを参照されたい。

5.5 提供ソフトウェア

OCTOPUS では、各種言語処理系、ライブラリ、コンテナランタイム、ISV アプリ、HPC アプリケーションを提供している。

言語処理系としては、Intel oneAPI Base/HPC Toolkit、GNU Compiler Collection、Python、R、Octave 等を提供している。ライブラリとしては、MPI 実装 (Intel MPI、Open MPI)、数値計算ライブラリ (Intel oneMKL、GNU Scientific Library)、I/O ライブラリ (NetCDF、Parallel NetCDF、HDF5)、機械学習フレームワーク (TensorFlow、Keras、PyTorch、pbdR) 等を整備している。

コンテナランタイムとしては、HPC 分野で広く利用されている Apptainer に加え、Podman、Docker を提供している。これにより利用者は自身の計算環境を柔軟にコンテナとして構築・実行できる。ISV アプリとしては、Gaussian、IDL、AVS/Express Developer、Amazon DCV を提供している。

また、HPC 分野で広く利用されているオープン

ソースのアプリケーションとして、GROMACS、OpenFOAM、LAMMPS、GAMESS、ABINIT-MP、RELION、ADIOS、VisIt、CTFFIND、FLASHcode、FreeFem++, GENESIS、MotionCor3、SMASH、Quantum ESPRESSO、ResMap、OpenMX、NEC Vector Annealing、ParaView、Gnuplot、ImageMagick、NcView 等を提供している。各ソフトウェアのバージョンは順次更新されるため、最新の情報は本センターのウェブページ [13] を参照されたい。

6. 利用のために

6.1 SQUID との共通点・相違点

OCTOPUS は SQUID と同じく D3 センターが運用する計算基盤であり、利用方法に多くの共通点がある。一方、両システムは異なる目的のもとに調達されたため、いくつかの相違点もある。

ログイン方法は、いずれも SSH (パスワード+OTP) を用いる点が共通する。ユーザ名とパスワードも両システムで共通である。ただし、フロントエンドノードと OTP はシステムごとに異なるため、利用者は各システムのフロントエンドノードへ、当該システム用の OTP を用いてログインする。

ジョブ投入方法も、両システムが同一のジョブスケジューラ (NEC 製 NQSV) を採用しており、ジョブスクリプトの記述方法に大きな違いはない。ただし、ジョブクラスの構成 (キュー名、ノード数、投入数・実行数制限等) はシステムごとに異なるため、ジョブスクリプト中のキュー指定は適切に変更する必要がある。

ファイルシステムについては、OCTOPUS ではホーム領域 100 GB/ユーザ、グループ領域 5 TB/グループを提供する。SQUID のホーム領域 10 GB/ユーザの 10 倍の容量にあたり、pip 等をはじめとする各種ツールを利用しやすいよう配慮している。また、両システムのフロントエンドノードからは、互いのファイルシステムをマウントしている。SQUID からは /octfs として、OCTOPUS からは /sqfs として相手側へアクセス可能で、両システム間でのファイルの受け渡しや、SQUID の計算結果を OCTOPUS で解析する (あるいはその逆) といった利用が容易に行える。

6.2 利用負担金

OCTOPUS の利用負担金について述べる。本センターの利用負担金の考え方は過去の SQUID 紹介記事 [3] や旧 OCTOPUS 紹介記事 [2] に詳述されているため、ここでは概要のみ示す。本センターの利用負担金は、スーパーコンピュータ運用に伴う消費電力相当のみを利用者にご負担いただく構造とし、可能な限り低額に設定している。

OCTOPUS は、SQUID と同じくポイント制の利用負担金体系を採用する。表 4 に利用負担金を示す。利用者は事前に「OCTOPUS ポイント」をコース単位で購入し、ジョブ実行時に消費されたポイントに応じて課金される仕組みである。10 万円コース (1,000 ポイント) から 500 万円コース (60,000 ポイント) までの 5 段階を用意しており、購入額が大きいほどポイント単価が割安となる。

表 4 : OCTOPUS の利用負担金

区分	基本負担額 (税別)	OCTOPUS ポイント
共有利用	10 万円	1,000
共有利用	50 万円	5,250
共有利用	100 万円	11,000
共有利用	300 万円	34,500
共有利用	500 万円	60,000

ジョブは、ジョブスクリプトを記述した上で qsub コマンドを用いて投入する。ジョブスクリプトには、ジョブクラス (キュー) の指定、利用グループの指定、最大経過時間の指定、計算ノードで実行するコマンド等を記述する。表 5 に OCTOPUS で提供するジョブクラスの一覧を示す。OCTOPUS では、通常優先度の OCT、高優先度の OCT-H、ノード共有の OCT-S、デバッグ用の DBG、対話利用の INT の 5 種類のジョブクラスを提供している。OCT、OCT-H、OCT-S は最大 120 時間の経過時間を指定可能で、研究の本実行向けである。一方、DBG および INT は最大 10 分の経過時間で、プログラムのデバッグや軽量の対話処理向けである。

表 5 : OCTOPUS のジョブクラス

ジョブ クラス	最大実行 時間	最大 コア数	最大 メモリ	最大 ノード数	備考
OCT	120 時間	32,768	92.75 TiB	128	通常優 先度
OCT-H	120 時間	32,768	92.75 TiB	128	高優先 度
OCT-S	120 時間	128	371 GiB	1	ノード 共有
DBG	10 分	512	1,484 GiB	2	デバッ グ用
INT	10 分	512	1,484 GiB	2	対話利 用

ジョブ実行時に消費される OCTOPUS ポイントは、使用したノード時間に対して、ノード群・利用優先度ごとに定められた消費係数、ならびに季節係数、燃料係数を乗じて算出される。表 6 に汎用 CPU ノード群の消費係数を示す。消費係数は利用優先度（高優先度、通常優先度、シェア（1/2 ノード）、シェア（1/4 ノード））ごとに設定しており、利用者は計算ニーズに応じてジョブクラスを選び分けることで消費ポイントを節約できる。1 ノード未満のコア数しか使わない場合は、OCT-S ジョブクラスを指定のうえ、ジョブスクリプトにおいて 1 ノード未満のコア数およびメモリ量を要求することで、ノード共有利用となり消費ポイントが減る。なお、燃料係数は直近の電気料金を勘案して設定しており、2026 年 6 月時点では 0.85 である。

表 6 : OCTOPUS の消費係数（汎用 CPU ノード群）

利用優先度	消費係数 (1 ノード時間あたり)
高優先度	0.6219
通常優先度	0.5287
シェア（1/2 ノード）	0.3732
シェア（1/4 ノード）	0.2488

さらに、ストレージ容量の追加は HDD 1 TB あたり年額 2,000 円で購入できる。利用負担金の詳細は本センターのウェブページ [12] を参照されたい。

6.3 利用申請・公募利用制度

OCTOPUS の利用には、本センターへの利用申請が必要である。利用申請の手続きは本センターのウェブページ [9] に詳述している。利用申請が承認されると、アカウントが発行され、OCTOPUS へログインしてジョブを投入できる。

また、本センターでは、研究開発の育成・高度化支援の観点から、本センターのスーパーコンピュータを利用する研究課題を公募する「公募型利用制度」を実施している。本制度には、(1) 若手・女性研究者支援萌芽枠、(2) 大規模 HPC 支援枠、(3) 人工知能研究特設支援枠の 3 つの枠を設けている。本制度で採択された研究課題は、利用負担金の全額を本センターが負担する。公募型利用制度の詳細については本センターのウェブページを参照されたい。

さらに、2026 年度課題より、OCTOPUS を HPCI [10] および JHPCN [11] へ計算資源として拠出している。HPCI および JHPCN では、課題公募に採択されれば、利用負担金を研究者が負担することなく OCTOPUS を利用できる。例年、JHPCN では 12 月半ば頃より 1 月初旬、HPCI（一般課題）では 9 月頃から 11 月初旬にかけて課題が募集されている。本センターの高性能計算機事業からも、ウェブページやメーリングリストを通じてこれらの課題募集についてアナウンスしている。OCTOPUS を利用する研究課題のご提案・ご応募をご検討いただきたい。

7. おわりに

本稿では、2025 年 9 月に試験運用を開始し、同年 12 月より本格運用を開始した新 OCTOPUS（オープンサイエンスを促進する計算・ストレージプラットフォーム）について、導入の背景・経緯、調達方針、システムの概要、特徴的な機能、そして利用方法を紹介した。

新 OCTOPUS は、Intel Xeon 6 プロセッサ（Granite Rapids、128 コア）を 1 ノードあたり 2 基搭載した汎用 CPU 計算ノードを 140 台備え、総コア数 35,840、総理論演算性能 2.293 PFLOP/s となる構成のスーパーコンピュータである。本センターでは、新 OCTOPUS を通じて、(1) 最新プロセッサの早期提

供、(2) SQUID とのジョブ分散による繁忙期混雑緩和、(3) 計算来歴管理機能 SCUP-HPC によるオープンサイエンス支援、という 3 つのコンセプトの実現を進めていく。

最後に、新 OCTOPUS の調達・構築にあたりご協力いただいた日本電気株式会社、ならびに各機器ベンダ・各ソフトウェアベンダの皆様に深く感謝申し上げます。また、新 OCTOPUS の調達にあたり本センター内外で多大なご支援とご協力をいただいた皆様にも深く感謝申し上げます。

新 OCTOPUS のさらなるサービスレベル向上のため、率直なご意見・ご要望を引き続きお寄せいただければ幸いです。

参考文献

- [1] 大阪大学 D3 センター, <https://www.d3c.osaka-u.ac.jp/>.
- [2] 伊達 進, "ペタフロップス級ハイブリッド型スーパーコンピュータ OCTOPUS: Osaka university Cybermedia cenTer Over-Petascale Universal Supercomputer ~サイバーメディアセンターのスーパーコンピューティング事業の再生と躍進にむけて~", HPC ジャーナル, Sep. 2018.
- [3] 伊達 進, "高性能計算・データ分析基盤システム (SQUID: Supercomputer for Quest To Unsolved Interdisciplinary Datascience) ~わが国の学術・産業の発展を支える研究基盤の実現に向けて~", HPC ジャーナル, Sep. 2021.
- [4] データ集約基盤 ONION, <https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/onion/>.
- [5] Y. Namiki, T. Hosomi, H. Tanushi, A. Yamashita, S. Date, "SCUP-HPC: System for Constructing and Utilizing Provenance on High-Performance Computing Systems", IEEE Access, vol. 13, pp. 141090-141107, 2025. [DOI: 10.1109/ACCESS.2025.3597831]
- [6] NEC Vector Annealing 利用方法 (OCTOPUS), <https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/octopus2-use/vector-annealing/>.
- [7] Phoronix, "Intel Xeon 6980P Performance Review", <https://www.phoronix.com/review/intel-xeon-6980p-performance>.
- [8] SPECchpc 2021 Benchmark Suites, <https://www.spec.org/hpc2021/>.
- [9] 利用申請, <https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/shinsei/>.
- [10] 革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI), <https://www.hpci-office.jp/>.
- [11] 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN), <https://jhpcn-kyoten.its.u-tokyo.ac.jp/ja/>.
- [12] 利用負担金, <https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/cost/>.
- [13] OCTOPUS ソフトウェア・ライブラリー一覧, <https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/octopus2-use/software/>.
- [14] SCUP-HPC 利用方法 (OCTOPUS), <https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/octopus2-use/dps4h/>.