



OCTOPUS

次世代計算・ストレージ基盤 OCTOPUS

OCTOPUS利用説明会

2025年11月5日

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 高橋慧智

大阪大学D3センター



スーパーコンピュータ (2021/5～)



計算・ストレージ基盤
(～2024/3, 2025/9～)



クラウド基盤 (2024/11～)



データ集約基盤 (2021/5～)

学内外の研究・教育を支える情報基盤（スパコン含む）の整備・運用を担うとともに、大規模計算、情報通信、ICT技術を活用した教育に関する最先端の研究開発を推進する。

本説明会の趣旨

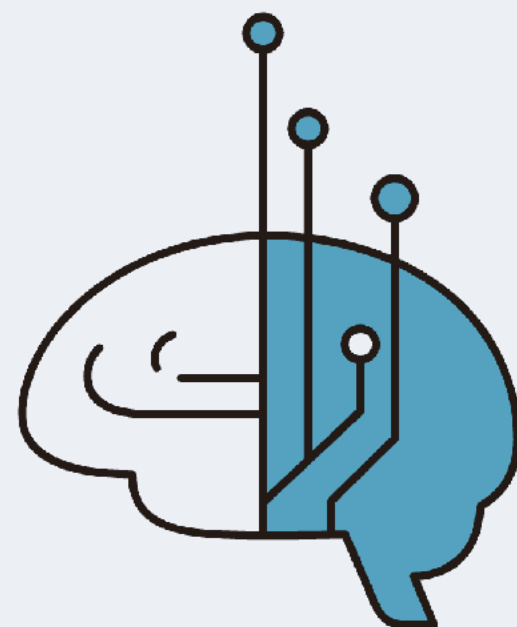
- 次世代計算・ストレージ基盤OCTOPUSの概要をご紹介します。
 - 全体構成、プロセッサ、性能、提供ソフトウェア等のシステム概要
 - オープンサイエンス支援機能、擬似量子アニーリング等の特徴的な機能
 - SQUIDとの性能差やSQUIDとの利用方法の相違点
- 12月から提供する正式サービスの概要・利用負担金をご紹介します。

13:00～13:25	趣旨説明・システム構成・利用方法（D3センター 先進高性能計算基盤システム研究部門 高橋慧智）
13:25～13:50	利用負担金・利用申請方法（情報推進部 情報基盤課 技術職員）
13:50～14:00	質疑応答

OCTOPUSのコンセプト

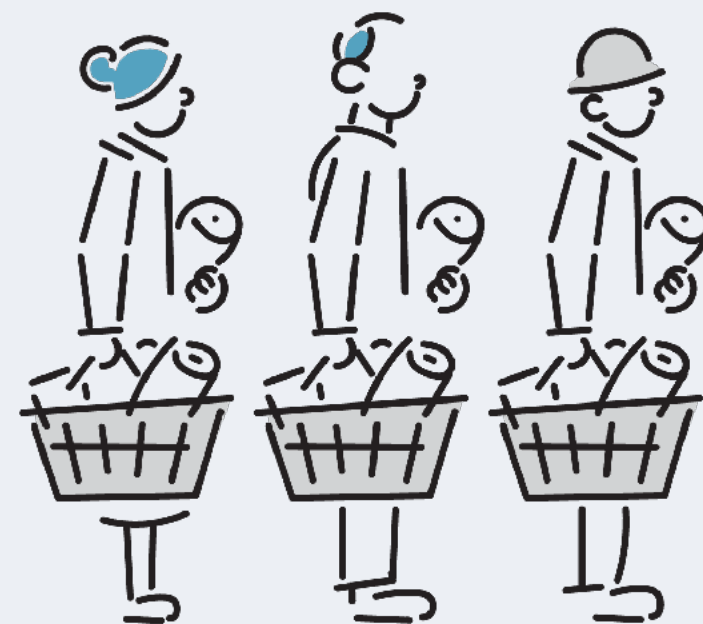
最新プロセッサ

全国に先駆けて高性能な最新プロセッサ (Granite Rapids, 2024/9発表) を提供し、最先端の演算性能を実現



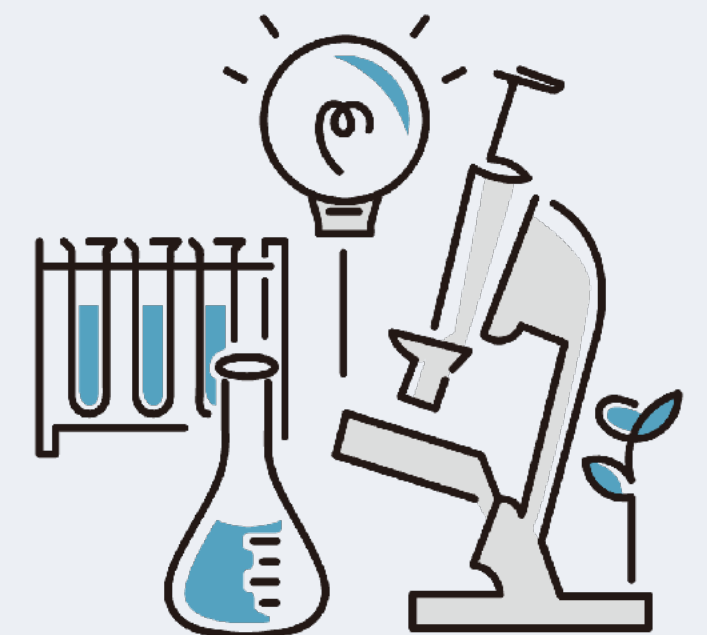
繁忙期の混雑緩和

ジョブをSQUIDとOCTOPUSに分散することにより、繁忙期（年末～年度末）に混雑を緩和し、待ち時間を短縮



オープンサイエンスを支援

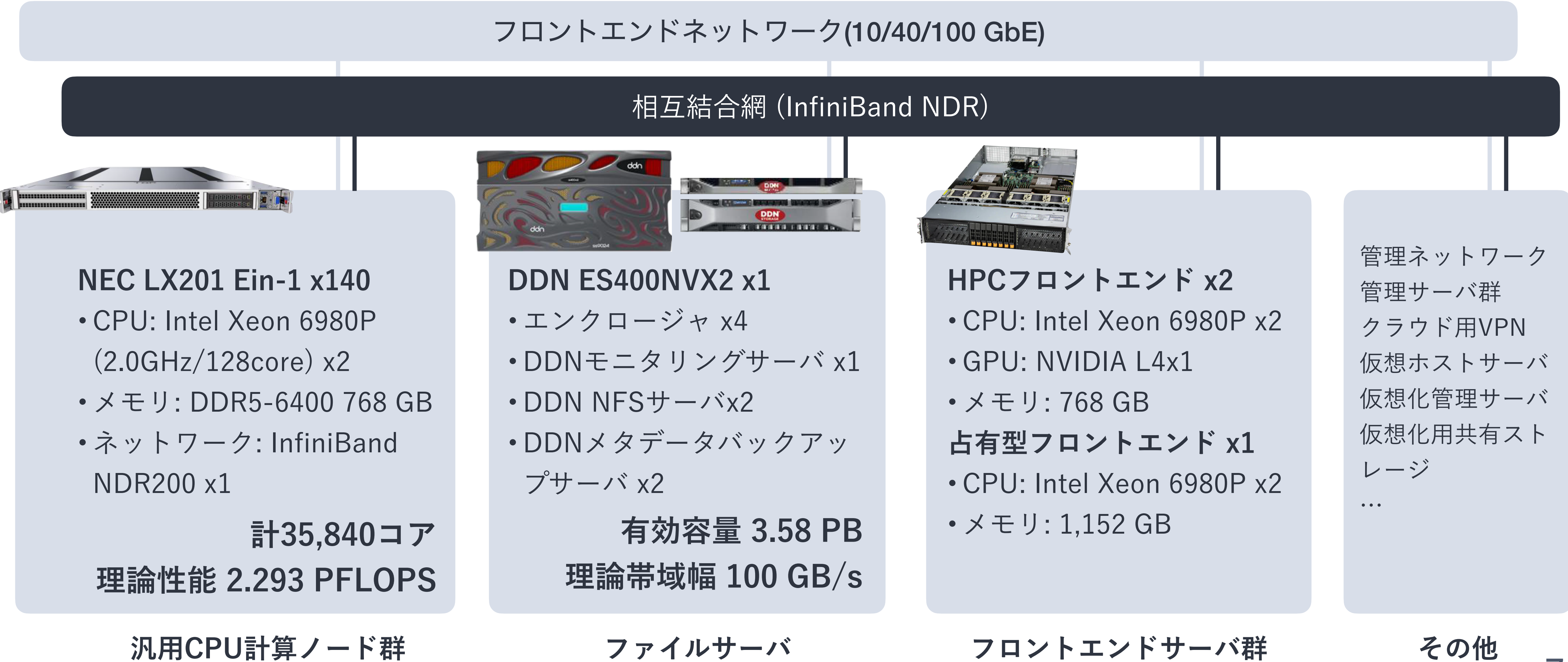
OCTOPUSで生成される計算結果がどのような入力とプログラムによって生成された記録・管理・共有する機能を提供







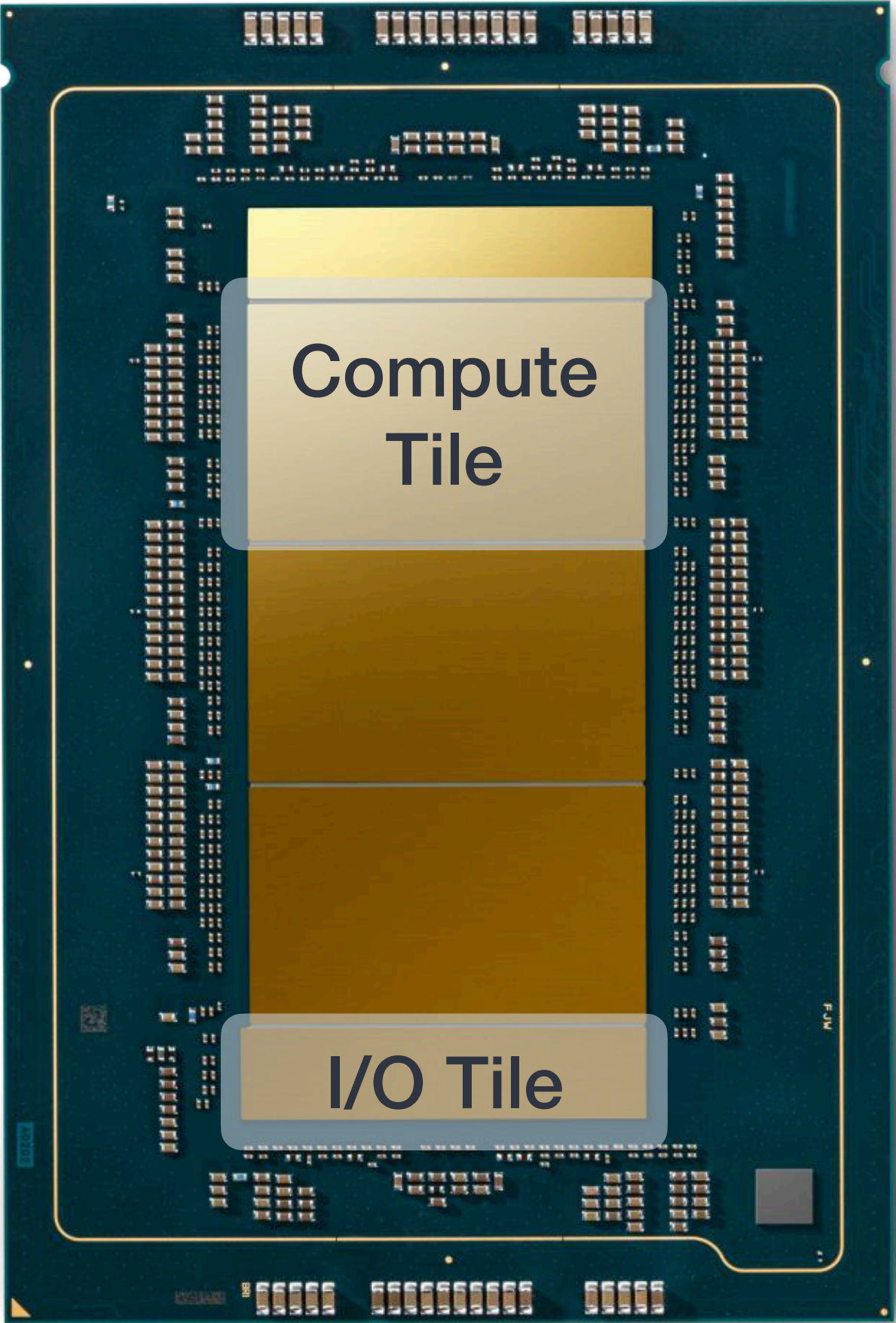
新OCTOPUSの概略図



新OCTOPUSのノード構成

	仕様
CPU	Intel Xeon 6980P (2.0 GHz, 128コア) x2
理論演算性能	16.384 TFLOP/s (=8.192 TFLOP/s x2)
メモリ構成	768 GB (32 GB DDR5-6400 DIMM x24)
メモリ帯域幅	1,228.8 GB/s (=614.4 GB/s x2)
ネットワーク	InfiniBand NDR200 x1, Gigabit Ethernet
冷却方式	水冷 (CPUコールドプレート)

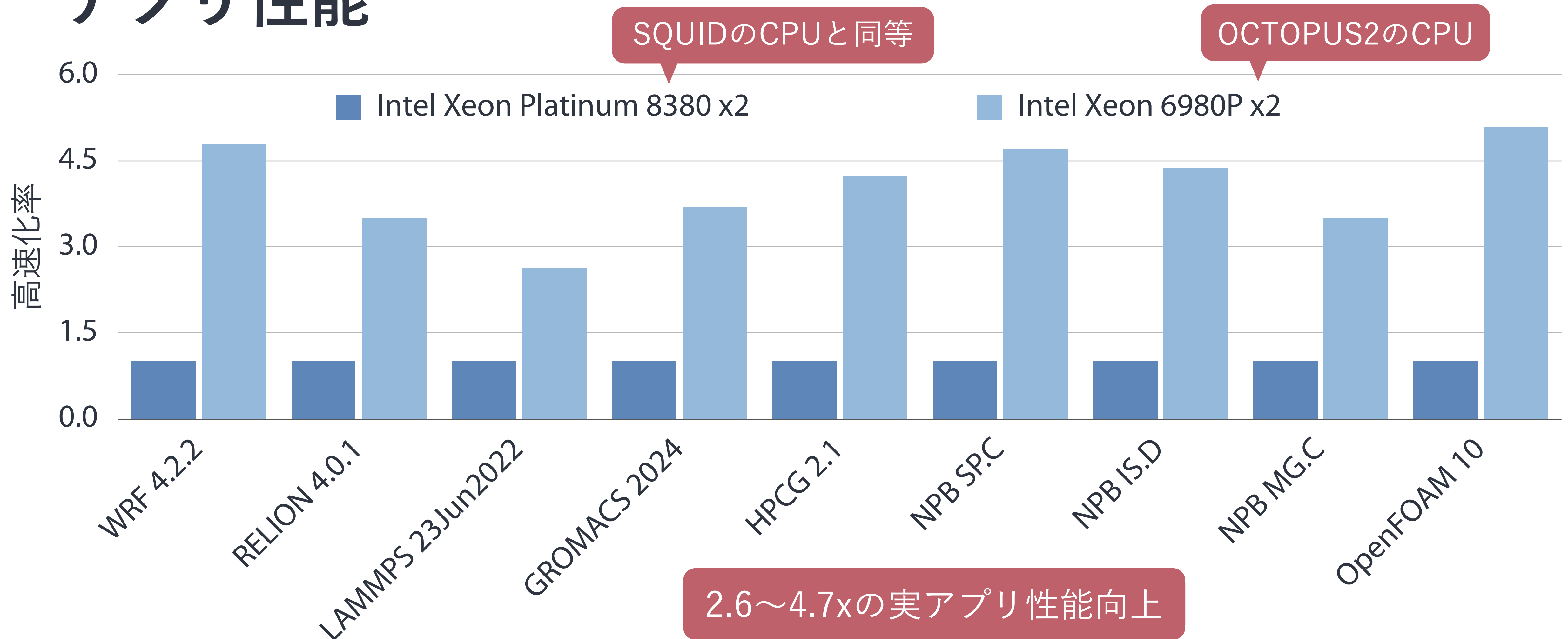
Intel Xeon 6980P外観



旧OCTOPUS・SQUIDとの比較

	OCTOPUS1	SQUID	OCTOPUS2	OCT2/ SQUID
CPU	Intel Xeon Gold 6126 (Skylake-SP) x2	Intel Xeon Platinum 8368 (IceLake-SP) x2	Intel Xeon 6980P (Granite Rapids) x2	-
コア数/CPU	12 コア	38 コア	128 コア	3.3x
演算性能/CPU	0.998 GFLOP/s	2.918 TFLOP/s	8.192 TFLOP/s	2.8x
メモリ帯域幅/CPU	127 GB/s	204 GB/s	614 GB/s	3.0x
メモリ容量	192 GB	256 GB	768 GB	3.0x
LLC容量/CPU	19 MB	57 MB	504 MB	8.8x
電力/CPU	125 W	270 W	500 W	1.8x

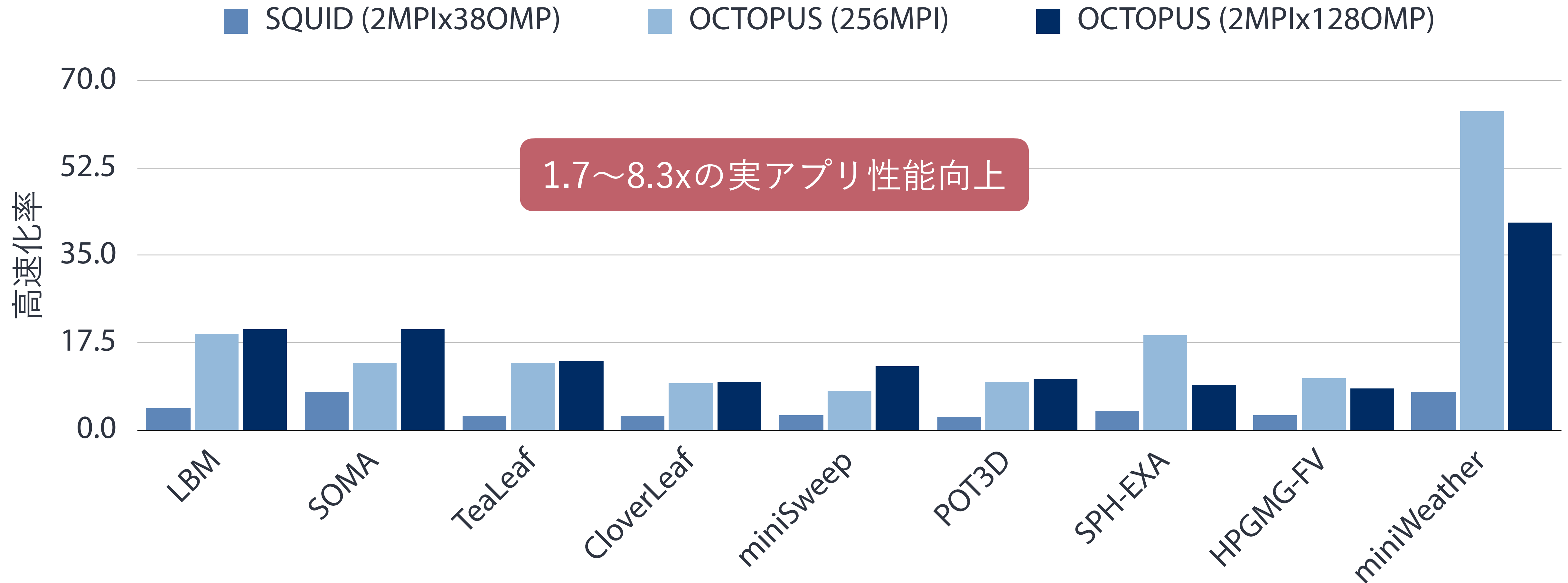
アプリ性能



※ <https://www.phoronix.com/review/intel-xeon-6980p-performance>を元に編集

※上記はあくまで一例で、OCTOPUSの性能を保証するものではありません

アプリ性能 (SQUIDとの実測による比較)



※ SPEChpc 2021 ベンチマークの tiny サイズを用い、SQUID と OCTOPUS で実測した結果

※ 縦軸はベースラインシステム (TU Dresden の Taurus) と比較した相対性能

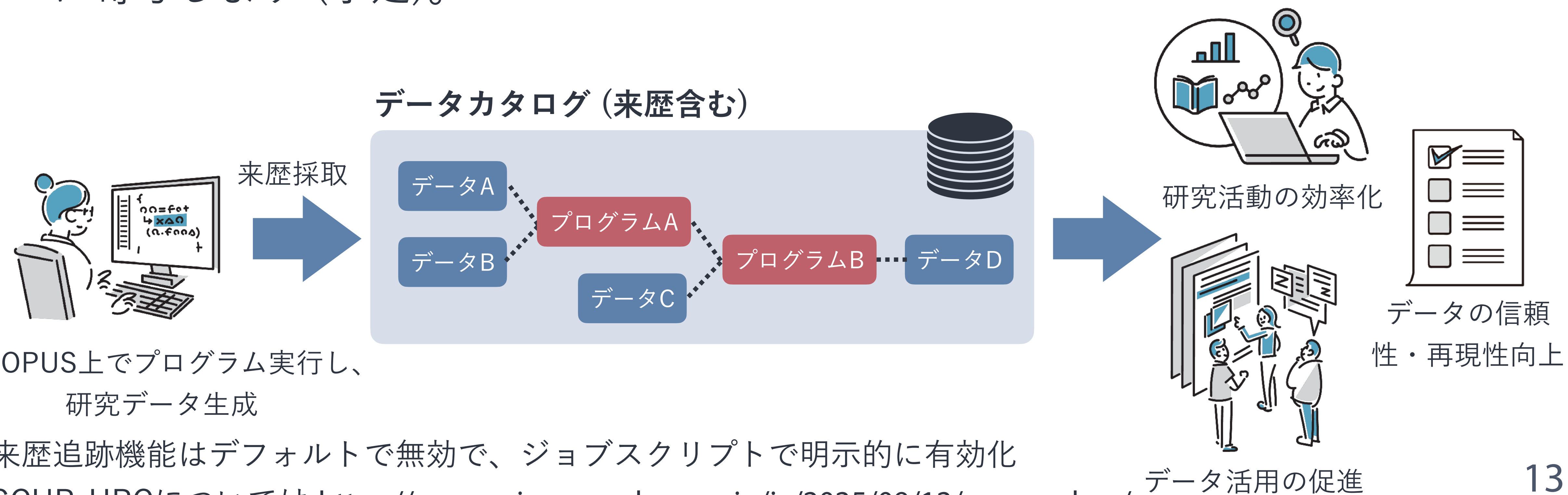
提供ソフトウェア

分類	名称
言語処理系	Intel oneAPI Base/HPC Toolkit, GNU Compiler Collection, Python, R, Octave, Julia
ライブラリ	Intel MPI, Open MPI, Intel oneMKL, GNU Scientific Library, netCDF, PnetCDF, HDF5, TensorFlow, Keras, PyTorch, pbdR
コンテナランタイム	Podman, Apptainer, Docker
ISVアプリ	Gaussian, IDL, AVS/Express, Amazon DCV
アプリ	GROMACS, OpenFOAM, LAMMPS, GAMESS, ABINIT-MP, RELION, ADIOS, VisIt, CTFFIND, Flash Code, FreeFem++, GENESIS, MotionCor3, SMASH, Quantum Espresso, ResMap, NEC Vector Annealing, ParaView, Gnuplot, ImageMagick, NcView

※各ソフトのバージョンは <https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/octopus2-use/software/>

来歴追跡・管理 (SCUP-HPC)

- 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、いかにして生成されたか (**計算来歴**) 追跡・管理する機能を提供します。
- 来歴情報はOCTOPUSユーザ以外も閲覧可能となり、研究データの再現性向上に寄与します (予定)。



OCTOPUS上でプログラム実行し、
研究データ生成

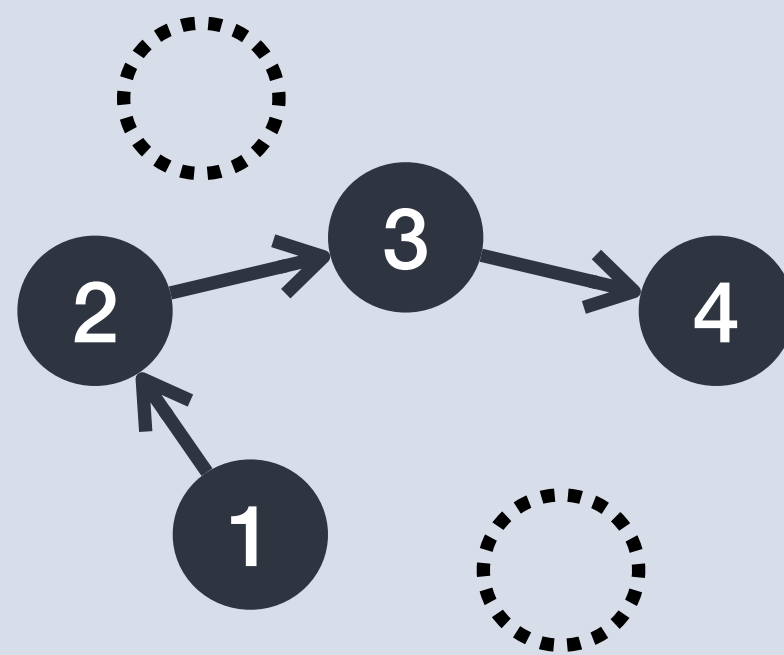
※ 来歴追跡機能はデフォルトで無効で、ジョブスクリプトで明示的に有効化

※ SCUP-HPCについては <https://www.nri.cmc.osaka-u.ac.jp/ja/2025/09/12/pr-scup-hpc/>

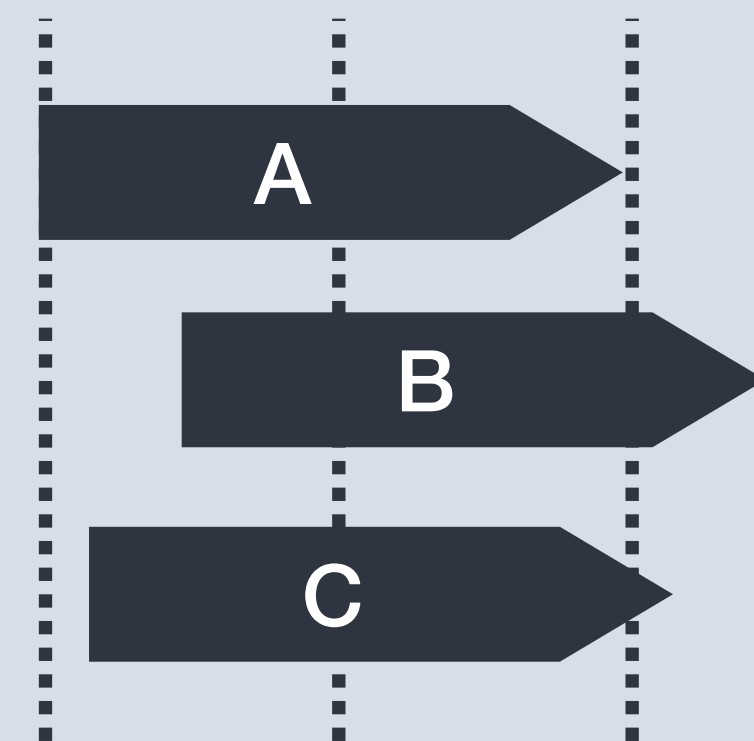
擬似量子アニーリング (NEC Vector Annealing)

- **組合せ最適化問題**（膨大な選択肢から、制約条件を満たし評価関数を最小化・最大化する組み合わせを見つける）を高速に解くソフトウェアを無償で提供
- Python/C++のAPIを備え、QUBO形式で記述された最適化問題を求解

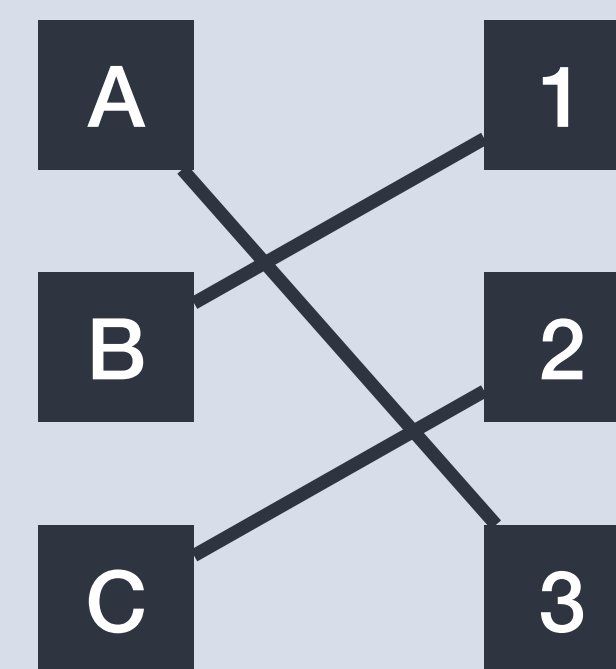
順番決め



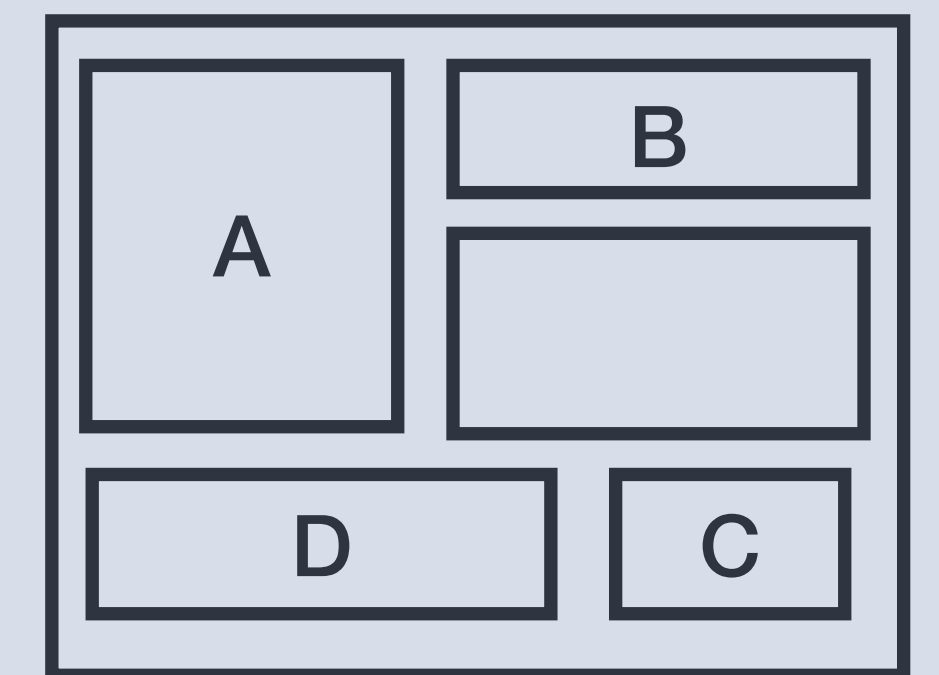
スケジューリング



マッチング



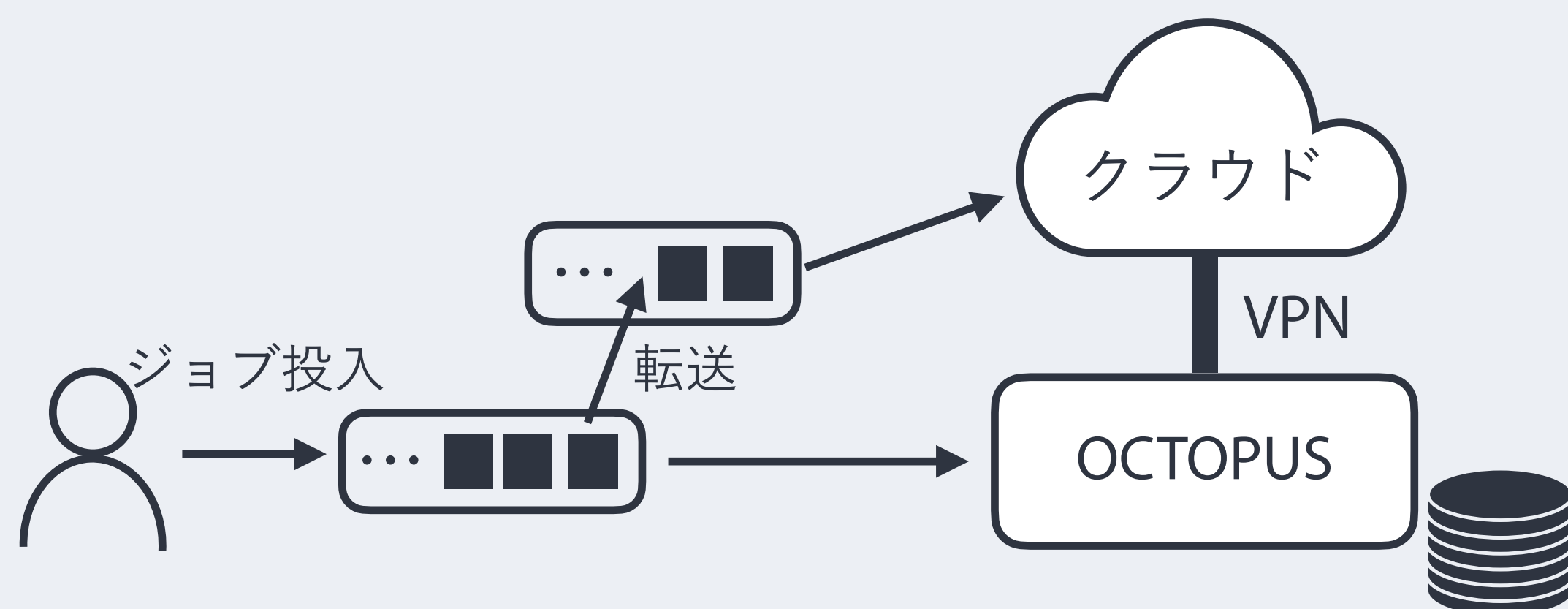
資源配分



その他の特徴的な機能

クラウド連動機能

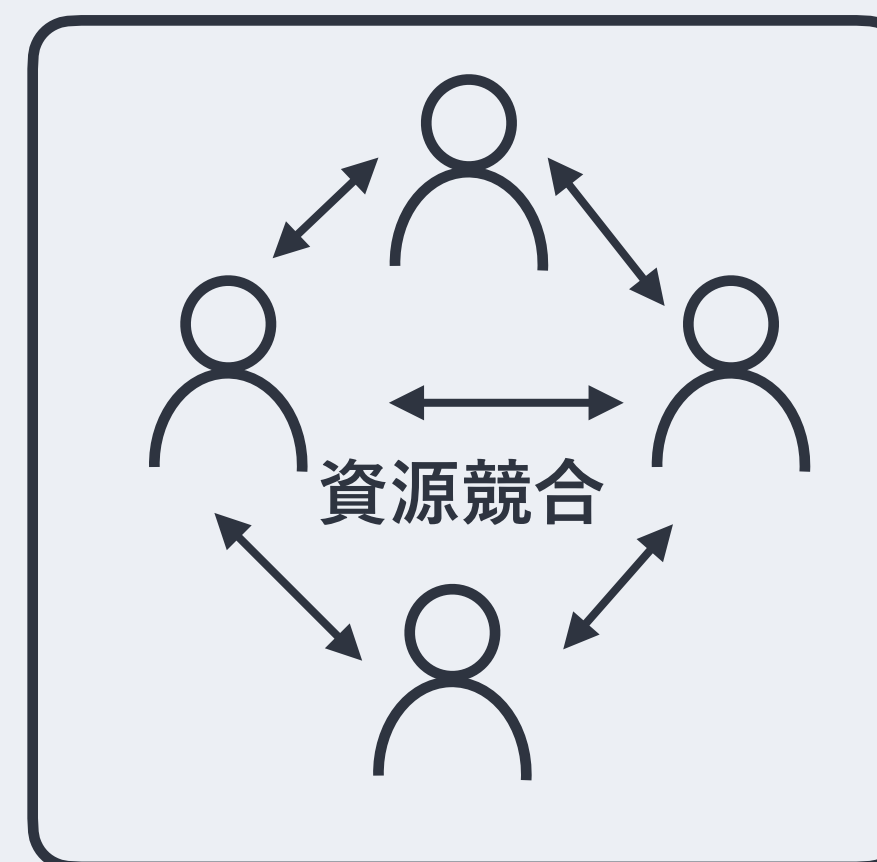
- OCTOPUSに投入されたジョブの一部をパブリッククラウドへ転送し、実行することで待ち時間を短縮します。
- ジョブスクリプトで明示的にクラウド転送を許可したジョブのみ転送されます。



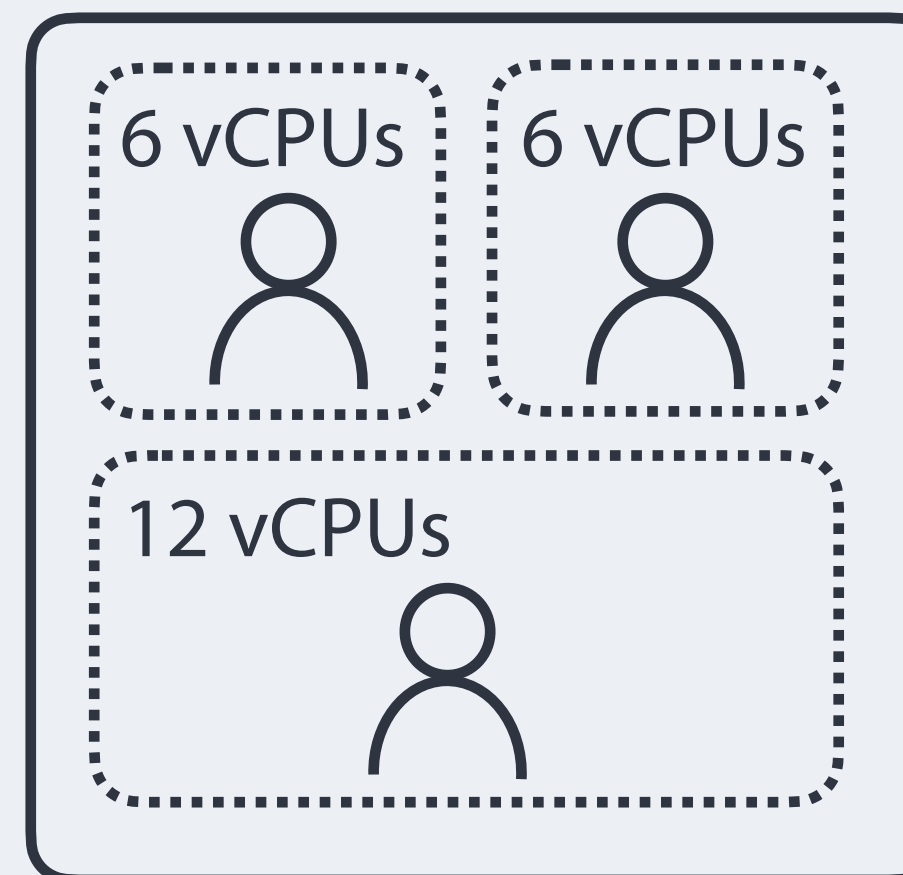
占有型フロントエンドノード

- グループ毎に占有可能な仮想フロントエンドサーバを提供します (追加料金が発生します)。
- 負荷が高いプリ・ポスト処理などお使いいただけます。

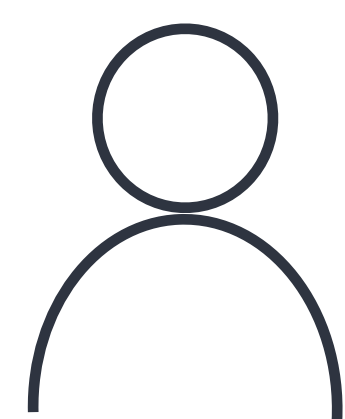
HPCフロントエンド



占有型フロントエンド



OCTOPUS利用の流れ



利用者

1. フロントエンドへ接続



フロントエンドx2台

2. プログラム・ジョブスクリプト準備

3. ジョブスクリプト投入

5. 結果確認

ジョブスケジューラ
NQS



CPUノード x140台

4. ジョブ実行

ログイン方法

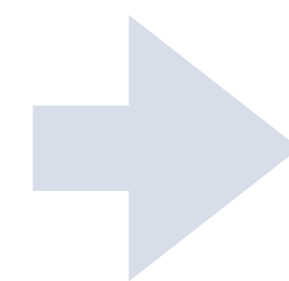
- フロントエンドにSecure SHell (SSH)で接続します。
- パスワードとワンタイムパスワード (OTP) の2要素認証が必須です。
 - PCやスマートフォンに2要素認証アプリをインストールしてください。
 - 公開鍵認証は利用いただけません。
 - SQUIDとはパスワード・OTPが異なります。

```
ssh <利用者番号>@octopus.hpc.osaka-u.ac.jp
```

sshクライアント

Windows: Windows Terminal, PuTTY, ConEmu等

macOS: Terminal, iTerm2, Ghostty等



2要素認証アプリ

Google Authenticator

Microsoft Authenticator等

ジョブの投入方法

ジョブスクリプトの例

```
#!/bin/bash

#PBS -q OCT
#PBS --group=G12345
#PBS -l elapstim_req=00:01:00
#PBS -T intmpi
#PBS -b 4

module load BaseCPU

cd $PBS_O_WORKDIR

mpirun ${NQSV_MPIOPTS} -np 1024 ./a.out
```

ジョブクラス表

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	
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

資源要求

- -q OCT: ジョブクラス (上表を参照)
- --group=…: 利用グループ名
- -l elapstim_req…: 最大経過時間

計算ノードで実行するコマンド

- module load…: Intelコンパイラ環境を読み込み
- cd …: ジョブ投入時のディレクトリに移動
- mpirun…: MPIプログラムを起動

`qsub job.sh` で投入

詳しくは <https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/octopus2-use/jobscript/>

ジョブの状態の確認方法

ジョブの状態の確認

QUE: 実行待ち, RUN: 実行中 CPU: 累積CPU時間, Elapse: 経過時間

```
$ qstat
RequestID      ReqName  UserName Queue      Pri STT S      Memory      CPU      Elapse R  H  M  Jobs
-----
22038.oct      job.sh   x12345  08          0  QUE -      0.00B      0.00      0  Y  Y  Y    4
```

ジョブの予定実行開始時刻の確認

予定実行開始時刻

```
$ sstat
RequestID      ReqName  UserName Queue      Pri STT Date(PLANNED START)
-----
22038.oct      job.sh   x12345  08          0  QUE 2025-11-06 01:25:48
```

標準出力と標準エラー出力は実行終了後にファイルに出力されます

※ ジョブの実行中でも、qcatコマンドを用いれば出力を確認できます

標準出力: <job script name>.o<request ID>

標準エラー出力: <job script name>.e<request ID>

SQUIDとの利用方法の共通点・相違点

- ログイン方法

- OCTOPUS専用フロントエンドにssh (パスワード+OTP) でログインします。

- ジョブ投入方法

- SQUIDと同一のスケジューラ (NQSVM) のため、大きな違いはありません。
- キュー構成 (キュー名、ノード数、投入数・実行数制限等) は異なります。

- ファイルシステム

- ホーム領域: 10GB/ユーザ→100GB/ユーザ、グループ領域: 5TB/グループ
- SQUIDのファイルシステムをアクセス可能です (フロントエンドのみ)。

詳しい使い方は <https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/system/manual/octopus2-use/>

まとめ

- 2025年12月より、新OCTOPUSの本番運用を開始します。
 - 旧OCTOPUSや現SQUIDと比較し、実アプリケーションで数倍の性能向上が期待できます。
 - オープンサイエンス支援や擬似量子アニーリングなど、特色のある先進的な機能を提供する予定です。
- ぜひ、この機会にOCTOPUSをご利用ください。
- メール・電話での質問対応、対面利用相談、各種講習会、チューニング支援など、当センターの教職員が万全にサポートいたします！



FAQ (1/3)

- **旧Intelコンパイラ (icc/icpc/fort) は導入されないのですか**
 - 旧Intelコンパイラは既に開発終了しており、バグ修正を含む一切のアップデートがされないため、本システムでは提供予定はございません。
- **自動並列化機能を使用したいのですが**
 - 新Intelコンパイラ (icx/icpx/fort) は自動並列化機能を備えていません。OpenMPによるハイブリッド並列化をご利用ください。
- **SQUIDとのファイルのやり取りはどうすればよいですか**
 - SQUIDとOCTOPUSは互いのファイルシステムをマウントしています。SQUIDでは/octfs、OCTOPUSでは/sqfsからご利用ください。
- **擬似量子アニーリングの使い方を教えてください**
 - こちらの[ページ](#)をご参照ください。

FAQ (2/3)

- **HPCI/JHPCN/公募型利用で利用可能ですか**
 - 2026年度課題より、HPCIおよびJHPCNへ計算資源を拠出します。また、公募型利用で利用いただくことも可能です。
- **OCTOPUSの正式名称はなんですか**
 - 和文「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」、英文 “Osaka university Compute & sTOrage Platform Urging open Science” です。
- **GPUは提供はされないのですか**
 - OCTOPUSはCPUオンリーのシステムです。GPUのご利用を希望される場合は、SQUIDやmdxIIのGPUノードをご検討ください。

FAQ (3/3)

- フロントエンドでプログラムを実行してよいですか
 - 軽量・短時間であれば問題ありませんが、高負荷・長時間のプログラムは必ずジョブとして実行してください。フロントエンド上で高負荷・長時間実行されているプログラムは予告なしに強制終了する可能性があります。
- SQUIDとOCTOPUSのいずれが待ち時間が短いですか
 - 需要に依存しますので、現時点では不明です。
- 複数のデバイスでOTPを使いたいです
 - 2要素認証ソフトのエクスポート機能や、パスワードマネージャをご利用ください。
- 1ノード未満のコア数しか使わなくても同じ価格ですか
 - 1/2または1/4ノード未満分の資源を要求する場合、消費ポイントが少なくなります。OCT-Sジョブクラスを指定の上、cpunum_jobとmemsz_jobを指定してください。