

## 提供サービス

### 基本サービス

スーパーコンピュータシステム、研究クラウドシステムに共通するサービスです。スーパーコンピュータシステムのアプリケーションサーバ(\*)、ストレージシステムのhome領域の基本ストレージ容量、研究クラウドシステムのJupyter対話型計算環境、クラウドストレージの基本ストレージ容量を提供します。  
(\*)民間企業等利用、公募型利用を除きます。

### 付加サービス

#### スーパーコンピュータシステム

##### 演算サービス

###### 共用コース

演算時間（トークン）を申請し、それを消費することでジョブを実行する利用形態です。申請したトークンの範囲内で計算デバイス数（CPUソケット数またはGPUカード数）や経過時間を柔軟に設定して、プログラムを実行することができます。したがって、多数の計算ノードを必要とする大規模シミュレーションの実行も可能となります。トークンの消費量は、利用したCPUソケット数またはGPUカード数と演算時間との積に基づいて算出されます。

###### 占有コース

申請した計算デバイス（CPUソケットまたはGPUカード）を、申請者とその共同研究者で年間を通じて占有利用できます。他のユーザのジョブに影響されることがないため、繁忙期においても計算資源を待ち時間なく実行することができます。そのため、研究室の基盤計算資源として、教員・学生の日常的なプログラム開発・実行等に活用できます。CPUソケット1基またはGPUカード1基とストレージシステムのwork領域4TBを最小単位として利用申請できます。

##### ストレージサービス

二種類のノード群（CPUノード群とGPUノード群）およびアプリケーションサーバと高速なネットワークで接続された、スーパーコンピュータシステムのストレージ領域（home領域/work領域）を提供します。利用するストレージ領域は容量の追加が可能です。

(\*)演算資源とストレージシステムのwork領域は、複数の利用者がグループを構成し、グループのメンバーで共有利用することが可能です。

## 研究クラウドシステム

### コンテナ環境サービス

#### 共用クラスター (Sクラスター)

単一のKubernetesクラスターを全利用者で共有して利用します。利用者間の分離はnamespaceの機能を使用して行います。

#### 占有クラスター (Eクラスター)

独立したKubernetesクラスターを他の利用者と分離して提供します。提供可能数には限りがあります。

### クラウドストレージ (Nextcloud)

クライアント端末にインストールされたソフトウェア、またはWebのGUIによるファイル共有サービスを提供します。本ストレージに格納されたデータは、BCP対策として北見工業大学に設置しているアーカイブシステムに自動的にバックアップされます。基本サービス経費の負担者は一般1TB/学生100GBまで追加負担なしで利用可能です。

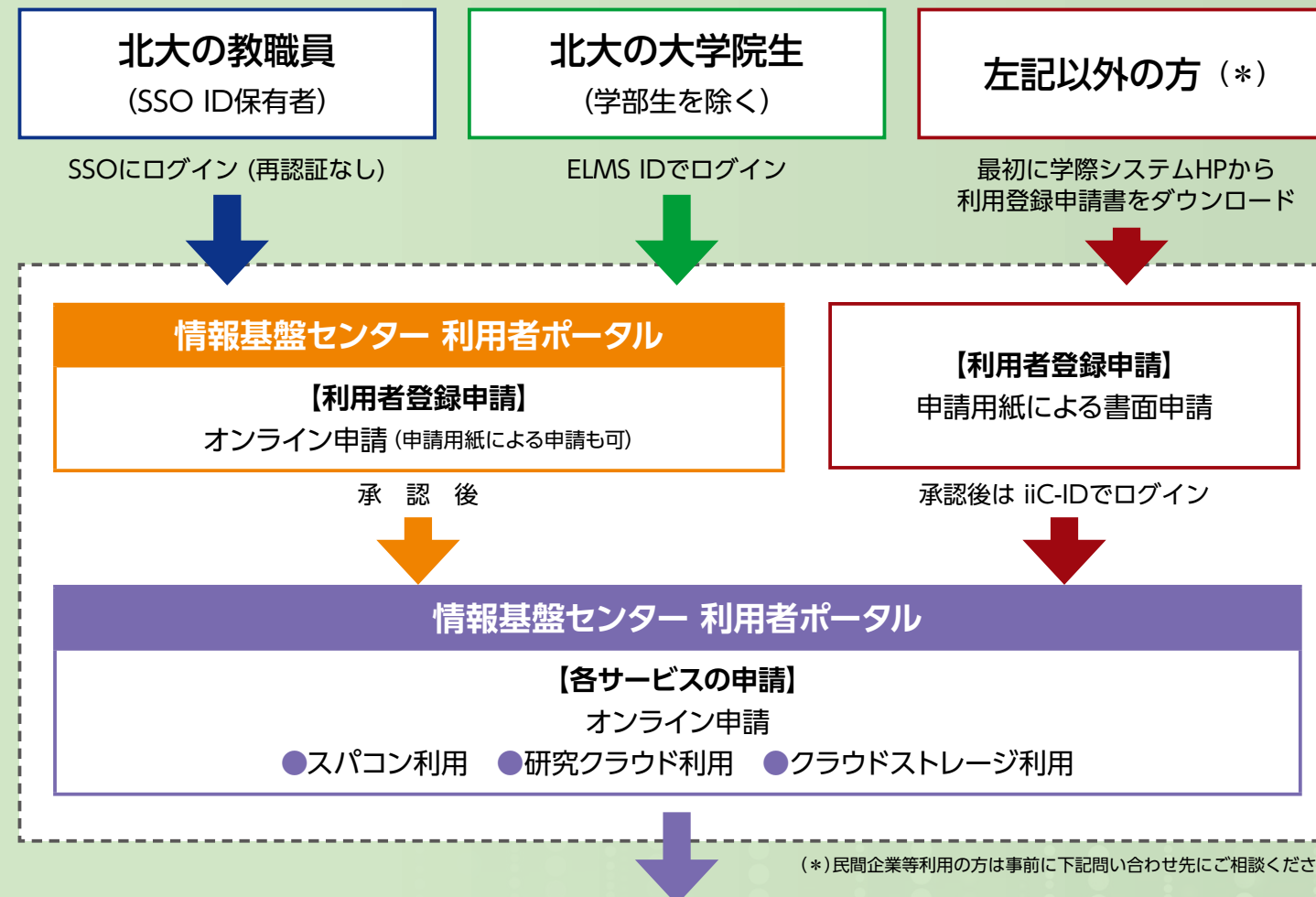
#### アプリケーションサーバ

Mathematica, MATLAB, Gaussian, GaussView, COMSOL Multiphysics, FieldView, Pointwise等のアプリケーションをGUIベースで利用できる環境を提供します。(\*)一部のアプリケーションは北海道大学に所属する研究者・学生のみが利用可能となります。

#### 大判プリンタ

学際大規模計算機システムの利用者にポスターサイズ (A0/A1/B0) での大判カラープリント出力サービスを提供します。

## 利用申請の流れ



### スパコン / 研究クラウド / クラウドストレージ 利用開始

## 利用形態

大学・企業を問わず、様々な利用形態をご用意しております

利用負担金 (有償)	一般利用 (大学・研究機関向け)	民間企業等利用 (成果公開型)	民間企業等利用 (成果非公開型)
公募型利用 (計算機資源を提供)	HPCI (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 High Performance Computing Infrastructure	JHPCN (学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点) JHPCN	北海道大学 情報基盤センター 萌芽型共同研究 Hokkaido University

学際システムに関する情報はこちら：<https://www.hucc.hokudai.ac.jp/>  
北海道大学情報基盤センター：<https://www.iic.hokudai.ac.jp/>  
【問い合わせ先】  
共同利用・共同研究担当  
電話：011-706-2951 E-mail：kyodo@oicte.hokudai.ac.jp



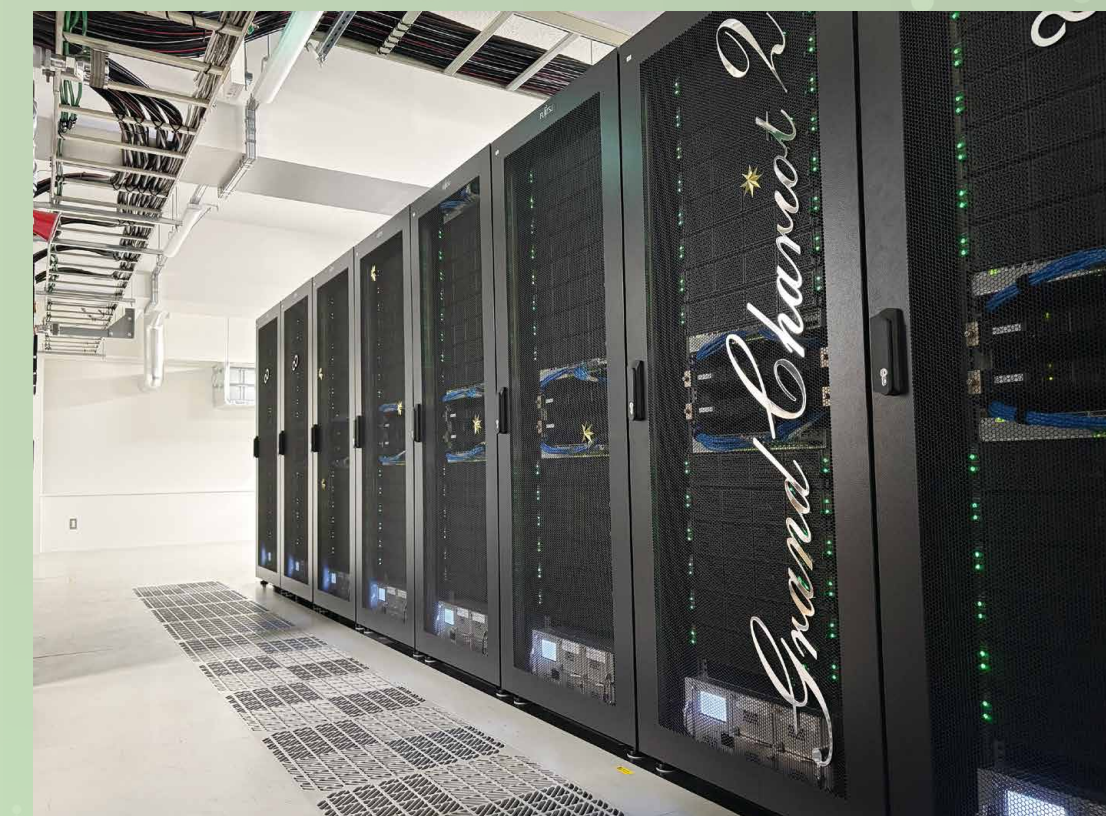
学際大規模計算機システムHP



情報基盤センターHP

# 学際大規模計算機システム

## Interdisciplinary Large-scale Computing System



HOKKAIDO UNIVERSITY  
INFORMATION INITIATIVE CENTER



北海道大学情報基盤センター

北海道大学情報基盤センターは、スーパーコンピュータシステムと研究クラウドシステムから構成される「学際大規模計算機システム」を更新し、2025年7月より新システムによるサービスを開始しました。本システムは、北海道大学をはじめとする全国の大学・研究所等における計算科学、計算機科学、データ科学、AI・機械学習関連の研究開発に活用されるとともに、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)、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) の公衆型共同研究へ資源を提供し、大学など学術関係の研究者に加えて、企業など民間を含む全国の研究者を支援します。

## 研究クラウドシステムの概要

研究クラウドシステムでは、次世代の学術情報基盤の提供を目標に、従来の仮想マシンを中核とした基盤システムから、OSのコンテナ技術とKubernetesを活用したコンテナ基盤システムへと全面的に移行しています。

### ■ハードウェア

2基のIntel Xeon (Emerald Rapids)を搭載したWorkerサーバ20台と、4基のNVIDIA H100 GPUと30.72TBのSSDを格納したPCIe BOXから構成されています。PCIeスイッチを経由してラック単位でサーバとGPU・NVMeストレージの接続や構成変更を可能とするディスクアグリゲータッド・コンピューティング技術であるComposable Disaggregated Infrastructure (CDI)を新たに採用しています。

### ■ソフトウェア

長期間にわたる安定的なKubernetesクラスタの運用を目標に、SUSE Rancher Primeを採用しています。Rancherでは、Kubernetesクラスタに関するほとんど全ての操作がGUIから可能となっています。また、Rancherが提供するアプリケーションカタログからソフトウェアを高速かつ簡単に導入することも可能です。

### Kubernetesクラスタ

OSのコンテナ技術とKubernetesを活用し、研究アプリケーションの高速かつ柔軟な展開や公開のためのプラットフォームを提供します。

基本サービスとしてJupyter対話型計算環境、および付加サービスとして共有・占有Kubernetesクラスタ環境を提供します。

Workerサーバ	
機種名	FUJITSU Server PRIMERGY CDI / PRIMERGY RX2530 M7 for CDI
ノード数	20
CPU	Intel Xeon Gold 6538N (32コア、2.1GHz) × 2
メモリ	256GB
ネットワーク	25Gb Ethernet × 2

PCIe BOX	
機種名	PCIe Box for CDI
GPU	NVIDIA H100 × 4
ストレージ	NVMe SSD 30.72TB (960GB × 32)



## クラウドストレージ (Nextcloud) の概要

クラウドストレージとして、Nextcloudに基づくWebDAVストレージのサービスを提供します。共有ストレージとしての利用に加えて、オープンサイエンスの基盤としても活用することができます。さらに、クラウドストレージに格納されたデータは、BCP対策として北見工業大学に設置された磁気テープライブラリ装置に自動遠隔バックアップされます。

### ■ハードウェア

Lustreに基づく分散ファイルシステムを採用した物理容量が1.2PBの大容量ストレージであり、オンラインストレージ機能を提供するとともに、Kubernetesクラスタの永続ボリュームとしても利用されています。

### ■ソフトウェア

提供基盤としてNextcloudを採用しています。Nextcloudでは共有ストレージとしての利用に加えて、オープンサイエンスの基盤として活用することもできます。さらに、クラウドストレージに格納されたデータは、北見工業大学に設置された磁気テープライブラリ装置に自動遠隔バックアップされます。

### クラウドストレージシステム

利用者の端末にインストールしたクライアントソフトウェアおよびウェブブラウザからアクセスできる、高速・大容量なストレージシステムです。



機種名	DDN ES200NVX2
物理ディスク容量	1.2PB (HDD)

### クラウドアーカイブシステム (北見工業大学に設置)

研究証跡の記録等、および遠隔バックアップによるディザスタリカバリ (DR) に対応し、研究データの長期保管を可能にするアーカイブシステムです。



機種名	ETERNUS LT140
物理テープ容量	17PB (LTO Ultrium9)

## スーパーコンピュータシステムの概要

スーパーコンピュータシステム“Grand Chariot 2”は、x86アーキテクチャに基づく第5世代インテルXeonプロセッサ (Emerald Rapids) と大容量メモリを搭載し、OSとしてLinuxを採用することで、オープンソースソフトウェアを含む広範なソフトウェアスタックの活用に適しており、前システムの“Grand Chariot”の設計思想を踏襲したシステムとしています。また北海道大学情報基盤センターのスーパーコンピュータシステムとしては初めてGPUを搭載するノード群を導入するとともに、オールフラッシュ構成による大規模かつ高速なストレージシステムの採用により、昨今のAI・機械学習分野へのニーズに対応します。さらに、高性能なコンパイラ、科学技術計算ライブラリ、通信ライブラリを整備し、最先端の計算科学・データ科学やHPCI・JHPCN共同研究を支えるプログラム開発基盤としての役割を果たしていきます。

### ■ハードウェア

ハードウェアは、CPUノード群とGPUノード群の二つのノード群、およびストレージシステムから構成されます。二つのノード群とストレージシステムとの間は、InfiniBand NDR規格の高速ネットワークで接続されています。二つのノード群はいずれも水冷方式の冷却設備を有しており、また全体の総理論演算性能は9.0PFLOPSになります。

### Grand Chariot 2 (CPUノード群)

2基のIntel Xeon (Emerald Rapids)を搭載したマルチコア・クラスタ型のスーパーコンピュータシステムです。フリーソフト・アプリケーションから大規模シミュレーションの実行までの幅広いニーズに対応します。



機種名	FUJITSU Server PRIMERGY CX2550 M7 / CX400 M7
ノード数	480
理論演算性能 (倍精度)	2.45PFLOPS
総メモリ容量	245TB
CPU	Intel Xeon Gold 6548Y+ (32コア、2.5GHz) × 2
メモリ	512GB
インターコネク	InfiniBand NDR × 1 (400Gbps × 1)
ネットワークポジ	Full-bisection Fat Tree

### Grand Chariot 2 (GPUノード群)

2基のIntel Xeon (Emerald Rapids)と4基のNVIDIA H100を搭載したGPUスーパーコンピュータシステムです。AI・機械学習分野へのニーズに対応します。



機種名	FUJITSU Server PRIMERGY GX2560 M7
ノード数	24
理論演算性能 (倍精度)	6.55PFLOPS
総メモリ容量	12.288TB
CPU	Intel Xeon Gold 6548Y+ (32コア、2.5GHz) × 2
メモリ	512GB
GPU	NVIDIA H100 × 4
GPUメモリ	80GB (HBM3)
インターコネク	InfiniBand NDR × 2 (400Gbps × 2)
ネットワークポジ	Full-bisection Fat Tree

### ■ソフトウェア

インテル製の開発環境・数値計算ライブラリ、およびNVIDIA製の開発環境・数値計算ライブラリをはじめとする各種ライブラリ、さらに計算科学分野や機械学習分野等における様々なフリーソフトウェアを整備しています。

コンパイラ・開発環境	・CPU向け：インテルoneAPIベース & HPCツールキット (Fortran/C/C++, VTune Profiler, Advisor)、GCC ・GPU向け：NVIDIA HPC SDK & CUDA Toolkit ・その他：Python、Java
ライブラリ (抜粋)	・CPU向け：インテルMPI (通信)、インテルoneMKL (数値計算)、インテルIPP (画像・信号処理、データ圧縮)、インテルoneDAL、oneDNN、oneCCL (ビッグデータ、機械学習) ・GPU向け：NVIDIAライブラリ (cuBLAS、cuSPARSE、cuFFT、cuDNN、NCCL)、MAGMA
ジョブ管理	PBS Professional
アプリケーション	Gaussian、V-FaSTAR
フリーソフト (抜粋)	・計算科学関連：OpenFOAM、PHASE、FrontFlow/red、GROMACS、LAMMPS、NAMD、Quantum ESPRESSO ・機械学習関連：Tensorflow、PyTorch、Keras、Horovod、Apache MXnet
コンテナ環境	Singularity Community Edition

### ストレージシステム

全てのドライブがSSDで構成された大容量かつ高速なオールフラッシュストレージシステムです。二つのノード群からの大規模ファイルの書き込みや、大量の機械学習ファイルへのアクセスに対応します。



機種名	DDN ES400NVX2 / SE2420
ファイルシステム	DDN EXAScaler (Lustre)
総物理容量	16.95PB
ドライブ構成	フルSSD (オールフラッシュ)

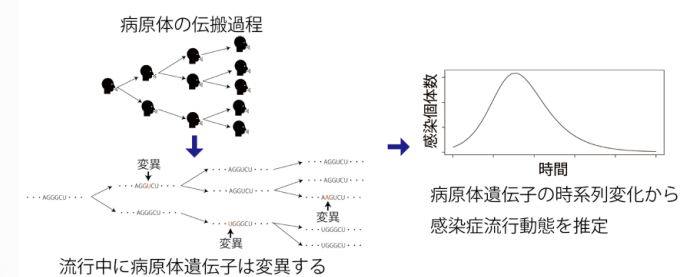
## 学際システム利用予定の研究事例 (北海道大学内)

### 人獣共通感染症国際共同研究所

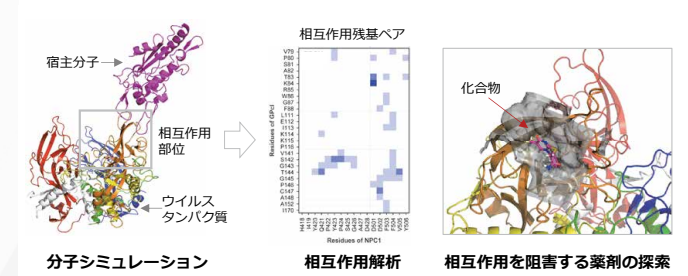
昨今、新型コロナウイルス感染症をはじめとした様々な感染症が社会的な問題になっており、感染症流行に対する適切な介入が急務となっています。感染症の流行制御の為に、流行状態の把握と予測、介入の有効性を理解する必要がありますが、それらは全て感染症の流行動態の把握から始まります。しかしながら、感染症の流行は病原体の進化、多様な宿主の行動、気候変動など様々な要因から影響を受け、非常に複雑です。私達は、詳細な感染症流行シミュレーションを北海道大学情報基盤センターの学際大規模計算機システムで行い、感染症流行動態の究明と感染症の流行制御を目指しています。また、病原体の塩基配列の時系列データからの流行動態の推定や、感染症の流行データから共通の感染経路をもつ別の感染症の流行を推定するといった、データ解析手法の考案も行っています。

加えて、近年、新たな病原体による感染症が次々に出現しています。その多くはウイルス性の人獣共通感染症です。ウイルスは単独では増殖できず、ヒトや動物などの宿主細胞に侵入し、その細胞機能を利用して増殖します。この増殖過程では、ウイルスタンパク質が他のウイルスタンパク質や宿主細胞の因子と相互作用することで、さまざまな機能を発揮します。したがって、ウイルスタンパク質の相互作用や機能部位を、化合物やペプチドといった医薬分子で的確に阻害できれば、ウイルスの増殖を合理的に制御できると考えられます。私たちは、学際大規模計算機システムを活用し、ウイルスタンパク質の立体構造を分子動力学シミュレーションにより解析しています。これにより、ウイルスの増殖に関与するタンパク質の作用機序を原子・分子レベルで理解することを目指しています。さらに、得られた解析情報に基づき、ウイルスタンパク質の機能部位や相互作用領域を標的とした抗ウイルス薬の探索・設計にも取り組んでいます。

### 病原体の進化や宿主の行動を考慮した 詳細な感染症流行シミュレーション



### ウイルスタンパク質の分子シミュレーション解析と 抗ウイルス薬の研究



### 化学反応創成研究拠点 (ICReDD)

化学反応は自然界のあらゆるところに存在しており、その制御は人類を豊かにする根幹をなす技術となります。ICReDDが確立しようとしている「化学反応創成学」では、化学反応の発見や設計を単なる偶然や科学者の経験に基づいた直感に頼るのではなく、計算科学による予測に基づいて化学反応を意図的に制御することを目指しています。化学反応を意図的に設計・制御するには、分野横断的なコラボレーションが必要不可欠です。ICReDDでは、「Revolutionize Chemical Reaction Design and Discovery」をスローガンに、計算科学・情報科学・実験科学の融合によって反応開発の進め方を一新し、現在および将来の人類の課題を解決します。また私たちは、世界中に開かれた拠点を形成し、その効果を全世界へ波及させることにより、豊かな未来社会の創造に貢献します。

計算科学による予測の計算では、反応経路自動探索法である人工力誘起反応 (AFIR) 法により、反応経路ネットワークを算出します。その後、情報科学によって、実験的に検討する意味のある情報を抽出して実験条件を絞り込み、実験科学によって反応を可視化します。これにより、これまで膨大な量の試行錯誤を強いられてきた化学反応の開発速度を大幅に向上させます。さらに実験科学のデータを、情報科学を通じて計算科学へとフィードバックすることにより、三つの分野が一体となって化学反応の設計手法を向上、洗練させることが可能です。

新たな反応や機能性材料の設計には、反応経路探索や反応速度予測といった分子レベルでの詳細な計算が不可欠です。特に、ICReDDの研究の基盤となる反応経路ネットワークデータの計算には、大きな計算リソースが必要になります。ICReDDでは、これまで北海道大学情報基盤センターをはじめとしたスーパーコンピュータを活用し、新たな化学反応の発見や材料設計を推進してきました。ICReDDでは、今後も、北海道大学情報基盤センターのリソースを活用しながら、新たな理論開発と実践的なシミュレーションの両面から、次世代の化学創成に挑戦していきます。

### Revolutionize chemical reaction design and discovery

