

# 高性能分子シミュレータ

[調達情報サイトマップ](#)[調達総合案内](#) > [調達情報](#) > [政府調達情報検索](#) > [検索結果【資料等の提供招請】](#) > 調達情報詳細

## 資料提供招請に関する公表

次のとおり物品の導入を予定していますので、当該導入に関して資料等の提供を招請します。

令和3年1月12日

大学共同利用機関法人

自然科学研究機構長 小森 彰夫

◎調達機関番号 416 ◎所在地番号 23

○第2号－岡崎

### 1 調達内容

(1) 品目分類番号 14

(2) 導入計画物品及び数量

高性能分子シミュレータ 一式

(3) 調達方法 借入

(4) 導入目的

自然科学研究機構岡崎共通研究施設計算科学研究センターは、基礎生物学研究所、生理学研究所と分子科学研究所の研究者に対する計算処理サービスに加えて、大学共同利用施設として全国の分子科学およびバイオサイエンス分野の研究者に対して、大学等他の計算機環境では処理が困難な大規模かつ超高速の演算処理機能を提供している。本調達では原子・分子に関わる量子化学計算、分子シミュレーションなどの大規模計算を超高速で処理する高性能分子シミュレータを導入する。

(5) 導入予定時期

令和4年度11月以降

(6) 調達に必要なとされる基本的な要求要件

#### A 要求要件の概要

- a 256 bit幅のSIMD演算命令相当までの命令セットにおける倍精度総演算性能（以下、総演算性能と記す）が9.5 PFLOPS以上の並列計算機であること。GPUを除いたCPUの総演算性能は7.5 PFLOPS以上であること。
- b GPU非搭載の演算ノードは同一種類のCPUを有し、ノードあたり256GB以上のメモリを搭載したノードと1TB以上のメモリを搭載したノードであること。
- c GPU搭載の演算ノードは同一種類のCPUを有し、ノードあたり256GB以上のメモリを搭載し、CPU数とGPU数の比率を1対8とすること。
- d 会話処理用サーバはGPU非搭載の演算ノードと同一構成のCPUとノードあたり256GB以上のメモリを搭載した構成で4ノード具備し、キャンパスネットワークと10GbEで接続すること。
- e ジョブキューイングシステム管理サーバなど運用に必要なサーバを具備すること。
- f 8PB以上の高速な外部磁気ディスク装置を具備すること。
- g 仮想ホストクラスタは、ハードウェア仮想化支援機能を有し、ノードあたり16コア以上を有する16ノード以上の単一種類のノードを具備し、キャンパスネット

ワークと10GbEで接続すること。仮想ホストクラスタ用の独立した20TB以上の外部磁気ディスクを具備すること。

h 仮想ホストクラスタ以外の各装置を100Gbps以上で接続するインターコネクト装置を具備すること。

i UPSにより、演算ノードは1秒以上、それ以外のコンピュータ機器は10分以上運転を維持できること。

j 自動並列化を有するFORTRANおよびC, C++の処理系を備え、対応する科学技術演算ライブラリを具備すること。

k オペレーティングシステムはUNIXまたはLINUXに準拠すること。

l 全ての装置を十分に冷却する設備を具備すること。

m システムの信頼性が高く、安定した保守・支援体制を有すること。

## B 性能評価試験の概要

性能評価のために行うベンチマークテストの概要は導入説明書に示す。

2 資料及びコメントの提供方法 上記1(2)の物品に関する一般的な参考資料及び同(6)の要求要件等に関するコメント並びに提供可能なライブラリーに関する資料等の提供を招請する。

(1) 資料等の提供期限 令和3年2月24日17時00分（郵送の場合は必着のこと。）

(2) 提供先 〒444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中38 自然科学研究機構岡崎統合事務センター財務部調達課課長補佐 二村 浩臣 電話0564-55-7151

3 説明書の交付 本公表に基づき応募する供給者に対して導入説明書を交付する。

(1) 交付期間 令和3年1月12日から令和3年2月24日まで。

(2) 交付場所 上記2(2)に同じ。

4 説明会の開催 本公表に基づく導入説明会を開催する。

(1) 開催日時 令和3年1月19日13時00分

(2) 開催場所 オンライン開催とするため、参加希望者は事前に上記問合せ先に連絡すること。

5 その他 この導入計画の詳細は導入説明書による。なお、本公表内容は予定であり、変更することがあり得る。

## 6 Summary

(1) Classification of the products to be procured : 14

(2) Nature and quantity of the products to be rent : High Performance Molecular Simulator 1 Set

(3) Type of the procurement : Rent

(4) Basic requirements of the procurement :

A Outline of Basic Demand Requirement

a The product is a parallel computing system that total double-precision computational performance in the instruction set of SIMD operation instructions or less of 256 bit width (hereinafter referred to as the total computational performance) is 9.5 PFLOPS or more; the total computa

- l performance of the CPU, excluding the GPU, must be 7.5 PFLOPS or more.
- b Non-GPU compute nodes should have the same type of CPU and have at least 256 GB of memory per node and at least 1 TB of memory per node.
- c The GPU-equipped compute nodes must have the same type of CPU and at least 256 GB of memory per node, and the ratio of the number of CPUs to the number of GPUs must be 1:8.
- d Interactive nodes shall have four nodes with the same configuration of CPUs as the compute nodes without GPU and 256GB or more of memory per node, and shall be connected to the campus network via 10GbE.
- e The system must be equipped with the necessary servers for operation, such as a job queuing system management server.
- f The total amount of external disk storage is 8 PB or more.
- g The virtual host cluster shall have hardware virtualization support capabilities and shall be equipped with at least 16 nodes of a single type with at least 16 cores per node, and shall be connected to the campus network via 10GbE. The virtual host cluster shall be equipped with a minimum of 20 TB of independent external magnetic disks for the virtual host cluster.
- h It must be equipped with an interconnect device that connects each device other than the virtual host cluster at 100 Gbps or higher.
- i The UPS must be able to keep the computing nodes running for at least 1 second and the rest of the computer equipment running for at least 10 minutes.
- j The system supports FORTRAN, C and C++ programming environments for parallel computation and library programs for general numerical purposes.
- k The operating system is based on UNIX or LINUX.
- l The product must have enough ability of cooling with cooling devices.
- m The system is highly reliable. Applicants for the procurement are requested to provide reliable support and maintenance services.

#### B Outline of Performance Evaluation

The procedures of benchmark tests and performance evaluation are described in another document.

- (5) Time limit for the submission of the requested material : 17:00 24 February, 2021

(6) Contact point for the notice : Futamura Hiroomi, Deputy Manager, Procurement Division, Okazaki Administration Center, National Institutes of Natural Sciences, 38 Nishigonaka, Myodaiji-cho, Okazaki-shi, Aichi-ken 444-8585 Japan, TEL 0564-55-7151

---

[《検索結果画面へ》](#)