

ANN ポテンシャル学習用 GPU 計算機の購入
仕様書

令和 7 年 6 月

原子力基礎工学研究センター
照射材料工学研究グループ

1. 概要

JST 創発的研究支援事業の研究課題「欠陥ダイナミクスに基づく力学機能設計と材料開発への挑戦」において、リユーラルネットワークポテンシャル開発のための学習を行うことを目的として、GPU 計算機を購入する。

2. 購入品仕様（相当品可）

R-XG GPU x2 Editon Xeon Gold 5418Y(2.0GHz)-256GB + A800-40G

リアルコンピューティング(株)製 ハードウェア

4U ラックマウント筐体に 1CPU を有する基本構成、クラスター計算機の計算ノードとして設定及び設置をすること。

Chassis : 4U ラックマウントケース

CPU : Intel Xeon Gold 5418Y(2.1GHz) x1CPU(24Cores)

GPU: NVIDIA A800 40G Avtive x1GPU (Mem: 40GB HBM2 ECC)

RAM : 256GB(32GB x 8) DDR5-4800 ECC REG

SSD : 1TB (NVMe M.2)

NIC : 10GbE x2, InfiniBand HDR(200Gb/s) x1

電源 : 2200W 冗長電源

ソフトウェア

1. OS として Rocky Linux をプリインストールすること。
2. Intel コンパイラ(インテル Parallel Studio XE 2020 Composer Edition for Fortran & C++ Linux) コンパイラを使用できるように設定をすること。
3. スレッド計算用 OpenMPI を設定すること
4. Nvidia CUDA コンパイラおよび CUDA Toolkit を使用できるように設定をすること。
5. ジョブ管理ソフト Torque+RC W-CS 2 のクライアント設定をすること。
6. ジョブ管理ソフトで一括に管理できるように設定すること。
7. 原子シミュレーションソフトウェアとして、VASP (ACC 版)、OpenMX、Phonopy、Lammps を使用できるように設定をすること。

その他

- ・ラックマウントレール,
- ・200V 電源ケーブル、InfiniBand ケーブル、LAN ケーブル

3. 納入場所及び納入条件

(1) 納入場所

日本原子力研究開発機構 原子力科学研究所
照射材料工学研究グループ 第2研究棟 206号室

(2) 納入条件

持込渡し

4. 納期

令和7年10月31日

5. 検収条件

納入場所に納入後、員数検査、外観検査、動作確認の合格及び第一原理計算のベンチマークが正しく実行されたことの確認をもって検収とする。

6. グリーン購入法の推進

本契約において、グリーン購入法(国等による環境物品等の調達の推進等に関する法律)に適用する環境物品の採用が可能な場合は、これを採用するものとする。

7. 協議

本仕様書に記載されている事項及び本仕様書に記載のない事項について疑義が生じた場合は、当機構と協議のうえ、その決定に従うものとする。

以 上