

仕様書

1. 件名 構造予測設計計算機システムの購入
2. 目的 量子科学技術研究開発機構（以下量研）量子生命科学研究所では、計算機シミュレーションを用いて生体分子の解析を行っている。その研究遂行能力強化のため、タンパク質立体構造予測ならびにタンパク質配列設計用計算機システムを購入する。1台は管理ノード兼ゲノム配列データベース検索サーバーとし、2台は構造予測実施用の計算機サーバーとなる。
3. 納入期限 令和7年3月17日

4. 納入場所

千葉県千葉市稲毛区穴川 4-9-1
量研 量子生命科学研究所 4階

5. 仕様

概要

- ・ 調達する計算用サーバーは大容量メモリを搭載する1台と、GPUを搭載する2台とで構成が異なる。以降、前者を管理ノードと記述し、後者を計算ノードと記述する。
- ・ 42Uの19インチラックを本調達に含めること。
- ・ 上記の19インチラックは既設の並列計算機システムの右あるいは左隣に設置する。
- ・ 10ギガビットイーサネットスイッチ(8ポート以上)を本調達に含めること。
- ・ 管理ノードを接続するUPS（無停電電源装置）を本調達に含めること。
- ・ 管理ノード、各計算ノード、UPSおよび10ギガビットイーサネットスイッチは、上記19インチラックに搭載すること。
- ・ 管理ノードおよび各計算ノードは、200V電源に接続できること。
- ・ 各計算ノードを接続する200V仕様のPDU（電源タップ）を本調達に含めること。なお、200V電源のソケットの規格は、L6-20Rである。
- ・ 各計算ノードをPDUに接続するケーブル（C13-C14ケーブル等）を本調達に含めること。
- ・ 管理ノードおよび各計算ノードは、ハードウェア及びソフトウェアの両面にわたって信頼性を有すること。特に、**排熱・電源容量等の考慮に遺漏の無いようにすること**。また、保守については、迅速な保守支援体制を有すること。

詳細

(1) ハードウェア要件（管理ノード）

- 1) CPU：AMD社製EPYC CPU 9274F（ベースクロック 4.05 GHz, 24-core）またはそれ以上相当のCPUを1基搭載すること。

- 2) メインメモリ：DDR5-4800 以上、ECC 搭載の RDIMM メモリを 768GB（例えば、64GBx12）以上搭載すること。
- 3) システムディスク：200GB 以上のソリッドステートドライブ(SSD)2 台以上を冗長化構成とし、オペレーティングシステム(OS)等を搭載すること。
- 4) ハードディスクおよび RAID コントローラ：RAID 6 (dual parity) 相当の冗長化を行える RAID コントローラを搭載すること。冗長化による容量減少を除いた後の容量が 100TB 以上となるようにハードディスクドライブを搭載すること。
- 5) 追加 SSD：システムディスクと異なる SSD を 2 台以下の台数使い、合計 7TB 以上のディスク容量を確保すること。本ディスク領域は冗長性を必要としない。
- 6) ネットワーク：10 ギガビットイーサネットインタフェースを 2 つ以上搭載し、それぞれ既設の 10 ギガビットイーサネットスイッチおよび今回調達する 10 ギガビットイーサネットスイッチにいずれもカテゴリ 6 A 以上の LAN ケーブルで接続すること。
- 7) 管理ノードは、UPS を経由して、2 0 0 V 電源に接続すること。
- 8) 管理ノードは、5U サイズ以下の筐体に設置すること。

(2) ハードウェア要件(計算ノード)

- 1) CPU：各計算ノードには AMD 社製 EPYC 9254 CPU(ベースクロック 2.9GHz, 24-core)またはそれ以上相当の CPU を 1 基搭載すること。
- 2) メインメモリ：各計算ノードには DDR5-4800 以上の ECC 搭載の RDIMM メモリを 96GB 以上搭載すること。
- 3) システムディスク：3.5TB 以上のソリッドステートドライブ(SSD)にオペレーティングシステム(OS)等を格納すること。本ディスクは冗長性を必要としない。
- 4) GPU：各計算ノードに NVIDIA 社製の 32GB 以上のメモリを持つ GPU を 1 ノードあたり 2 基搭載すること。
- 5) ネットワーク：各計算ノードに 10 ギガビットイーサネット(10GbE)インタフェースを 1 つ以上搭載し、10GbE スwitch にカテゴリ 6 A 以上の LAN ケーブルで接続すること。
- 6) 各計算ノードは、PDU を経由して、2 0 0 V 電源に接続すること。
- 7) 各計算ノードは 5U サイズ以下の筐体に設置すること。
- 8) 各計算ノードには、GPU がフル稼働に入った場合でも障害を起こさないように適切な電源を選択すること。
- 9) ノード台数は 2 台とする。

(3) ハードウェア要件(イーサネットスイッチ)

- 1) 10GBase-T のポートを 8 ポート以上搭載すること。
- 2) 200V 電源で動作すること。
- 3) イーサネットスイッチは PDU を経由して 2 0 0 V 電源に接続すること。

(4) ハードウェア要件(UPS)

- 1) 入力電圧・出力電圧として 200V をサポートすること。
- 2) 3000VA 以上の容量を持つこと。

(5)ソフトウェア要件

1) オペレーティングシステム

オペレーティングシステム (OS) は AlmaLinux 9 または RockyLinux 9 とする。管理ノード、各計算ノードに同じ OS を搭載すること。

2) アカウント管理 (FreeIPA あるいは LDAP 等)

ユーザー管理を管理ノードに一元化するために設定を行うこと。

3) ファイルアクセス (NFS)

各計算ノードから、管理ノードのハードディスクドライブ上のファイルにアクセスできるようにすること。

4) ジョブ管理システム

ジョブ管理を行うため、Slurm によるジョブ管理システムを導入すること。管理ノードを Slurm 等の管理ノード、計算ノードを Slurm 等の計算ノードとして設定し、管理ノードから GPU を利用するジョブが投入可能になるようにすること。1 ノードに GPU を複数枚搭載する構成の場合、ジョブから見える GPU デバイスおよび CPU コアが適切に制限されることで複数ジョブの同一 GPU での実行を防ぎ、また CPU のコンテキストスイッチを防ぐように、Slurm 等の設定を適切に行うこと。

5) 電源管理

UPS への電源供給が遮断された場合、管理ノードのシャットダウンを自動で行うよう設定を行うこと。

6) その他のソフトウェア

以下のソフトウェアを各管理ノード・各計算ノードで利用できるようにすること。

- ・ Apptainer (旧称 SingularityCE)
- ・ CUDA toolkit 11.8 および 12.6 ならびに対応 cuDNN(管理ノードは GPU を持たないが、開発と利用を容易にするため、ツールキットをインストールすること)。
- ・ CUDA container toolkit (Apptainer 上で CUDA 利用プログラムを使用可能にするため)

(6)その他

1) 据付調整作業

① 据付配線工事

本調達には、据付配線工事を含めること。

② ケーブル等

本調達には、据付配線工事において並列計算機システムを接続するため必要となるケーブル及びその配置、配線、調整等の作業を含めること。

③ 梱包等

本調達の設置作業の際に発生した梱包材等の廃棄物は受注者側で持ち帰り処分すること。

2) 保守・運用支援体制

- ① 保守については、メールや電話での運用支援が行える窓口を用意すること
- ② 設置より3年間、構成機器の故障の際には、センドバック等による無償修理、あるいは交換部品の無償提供を行うこと。

6. 検査条件

第4項に示す納入場所に据付調整が完了し、正常動作確認後、当機構立会いのもと、「検査要領書」に基づき納入時検査を実施し、検査合格および第8項に示す提出図書の提出をもって検査とする。「検査要領書」には、第7項に示す検査項目について、検査の方法、判断基準、それらの根拠、妥当性等を記載すること。

7.検査項目

(1) 員数検査、外観検査、据付配線検査

納入物品が本仕様書の通り納入及び設置されていることを検査する。

(2) 機能検査

ソフトウェア等の機能が満たされていることを検査する。

(3) 性能検査

ハードウェア等の機能が満たされていることを検査する。

8.提出図書

納入時に以下の書類を提出すること。

- | | |
|------------------------|----|
| ・ 検査要領書 | 1部 |
| ・ 機器構成表 | 1部 |
| ・ 保証書 | 1部 |
| ・ システム操作手引書（電子媒体及び印刷物） | 1部 |
| ・ システム環境設定書（電子媒体及び印刷物） | 1部 |
| ・ その他必要な書類 | 1部 |

(提出場所)

量研 量子生命科学研究所 量子生命システムグループ 生体分子シミュレーションチーム

9. その他

受注者は、量研が量子科学技術の研究・開発を行う機関であり、高い技術力及び高い信頼性を社会的に求められていることを認識するとともに、量研の規程等を順守し、安全性に配慮しつつ業務を遂行しうる能力を有する者を従事させること。

受注者は、本件業務を実施することにより取得したデータ、技術情報、成果その他のすべての資料及び情報を量研の施設外において、発表若しくは公開することはできない。ただし、あらかじめ書面により量研の承認を受けた場合はこの限りではない。

受注者は、異常事態等が発生した場合、量研の指示に従い行動するものとする。

10.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）に適合する環境物品（事務用品、OA機器等）が発生する場合は、可能な限りこれを採用するものとする。

本仕様で定める提出図書（納入印刷物）については、グリーン購入法の基本方針で定める「紙類」の基準を満たしたものであること。

11.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、量研と協議のうえ、その決定に従うものとする。

（要求者）

部課（室）名：量子生命科学研究所 量子生命システムグループ 生体分子シミュレーションチーム
氏 名：櫻庭 俊