

2025.10.24 Fri ▶ 2026.1.14 Wed



インテル® Xeon® スケーラブル・プロセッサー

Emerald Rapids Sapphire Rapids

キャンペーン

数量限定

Emerald Rapids



製品型番 : HPC5000-XER216TS

「Intel 7」製造プロセスにより微細化され、1ソケットに最大64コアを搭載可能になったことに加え、CPU間のUPI接続速度が20 GT/sに向上しました。また、コア間で共有される Last Level Cacheの容量を320MBに拡大、メモリアクセスを多用するAI、HPCワークロード向けに機能強化されています。さらに、新たにDDR5-5600のメモリに対応、より太いメモリ帯域に進化しました。前世代に比べ大幅な機能追加は少ないですが、着実に機能強化を継続しているインテル社の姿勢がうかがえます。

32core 搭載モデル

CPU :
Xeon Gold 6526Y (16core 2.8GHz)×2
Memory :
256GB
Storage :
960GB 2.5インチ NVMe×2
OS :
Ubuntu24.04 / AlmaLinux8.9
※Windows OSをご希望の場合には別途ご相談ください

キャンペーン価格

税込 ¥ 1,595,000

64core 搭載モデル

CPU :
Xeon Gold 6530 (32core 2.1GHz)×2
Memory :
256GB
Storage :
960GB 2.5インチ NVMe×2
OS :
Ubuntu24.04 / AlmaLinux8.9
※Windows OSをご希望の場合には別途ご相談ください

キャンペーン価格

税込 ¥ 1,810,000

Sapphire Rapids



製品型番 : HPC3000-XSR108TS

Sapphire Rapidsで採用されている、
複数ヘテロジニアス・ダイを接続する
EMIB (Embedded Multi-die Interconnect Bridge)
パッケージング・テクノロジーを採用。
処理のボトルネックを緩和し、
シングルソケットで最大 56 個のコアを実現、
プロフェッショナル向けの
ハイエンド・コンピューティング・ニーズに対する
パワーとスケーラビリティにおいて、アーキテクチャーの
転換点となる製品です。

22core 搭載モデル

CPU :
Xeon w7-2575X (22core 3.0GHz)×1
Memory :
256GB
Storage :
480GB SSD×1
OS :
Ubuntu24.04 / AlmaLinux8.9
※Windows OSをご希望の場合には別途ご相談ください

キャンペーン価格

税込 ￥1,100,000

26core 搭載モデル

CPU :
Xeon w7-2595X (26core 2.8GHz)×1
Memory :
256GB
Storage :
480GB SSD×1
OS :
Ubuntu24.04 / AlmaLinux8.9
※Windows OSをご希望の場合には別途ご相談ください

キャンペーン価格

税込 ￥1,210,000

36core 搭載モデル

CPU :
Xeon w9-3475X (36core 2.2GHz)×1
Memory :
256GB
Storage :
480GB SSD×1
OS :
Ubuntu24.04 / AlmaLinux8.9
※Windows OSをご希望の場合には別途ご相談ください

キャンペーン価格

税込 ￥1,540,000

56core 搭載モデル

CPU :
Xeon w9-3495X (56core 1.9GHz)×1
Memory :
256GB
Storage :
480GB SSD×1
OS :
Ubuntu24.04 / AlmaLinux8.9
※Windows OSをご希望の場合には別途ご相談ください

キャンペーン価格

税込 ￥2,000,000

大学・官公庁様限定

2025.10.24 Fri ▶ 2026.1.14 Wed



NVIDIA RTX PRO Blackwell

数量限定 Campaign

数量限定

Blackwellアーキテクチャは、演算ユニットとコア性能を大幅に強化。第5世代Tensorコア、第4世代RTコアを搭載し、AI演算およびレイトレーシング性能を飛躍的に向上させます。GeForce RTX 5090では前世代比最大2倍の性能向上を実現しており、RTX PRO 6000 Blackwellも同等の進化を遂げています。AIアクセラレーターとしての役割を担い、様々なAIワークロードを高速化します。



製品型番 : HPC2000-CARL104TS

NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell
Max-Q Workstation Edition



キャンペーン価格

税込 ¥1,347,500

※ GPU 単品でもご購入いただけます。

1GPU 搭載モデル

CPU :
Core Ultra 5 45(14C[6P+8E],3.5/3.0GHz)×1
Memory :
128GB
Storage :
480GB SSD×2
GPU :
RTX PRO 6000 Blackwell
Max-QWorkstation Edition ×1
OS :
Ubuntu24.04
AlmaLinux8.9
※Windows OSをご希望の場合には別途ご相談ください。

キャンペーン価格

税込 ¥2,200,000

2GPU 搭載モデル

CPU :
Core Ultra 5 45(14C[6P+8E],3.5/3.0GHz)×1
Memory :
128GB
Storage :
480GB SSD×2
GPU :
RTX PRO 6000 Blackwell
Max-QWorkstation Edition ×2
OS :
Ubuntu24.04
AlmaLinux8.9
※Windows OSをご希望の場合には別途ご相談ください。

キャンペーン価格

税込 ¥3,850,000



製品型番 : HPC3000-TR5PR104TS



NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell
Max-Q Workstation Edition



キャンペーン価格

税込 ¥1,347,500

※ GPU 単品でもご購入いただけます。

1GPU 搭載モデル

CPU :
Ryzen Threadripper 9970X(32Core 4.0GHz)×1
Memory :
384GB
Storage :
960GB NVMe ×2
GPU :
RTX PRO 6000 Blackwell
Max-QWorkstation Edition ×1
OS :
Ubuntu24.04
AlmaLinux8.9
※Windows OSをご希望の場合には別途ご相談ください。

キャンペーン価格

税込 ¥3,200,000

2GPU 搭載モデル

CPU :
Ryzen Threadripper 9970X(32Core 4.0GHz)×1
Memory :
384GB
Storage :
960GB NVMe ×2
GPU :
RTX PRO 6000 Blackwell
Max-QWorkstation Edition ×2
OS :
Ubuntu24.04
AlmaLinux8.9
※Windows OSをご希望の場合には別途ご相談ください。

キャンペーン価格

税込 ¥5,000,000



製品型番 : HPC3000-EGNGPU10R4S



NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell
Max-Q Workstation Edition



キャンペーン価格

税込 ¥1,347,500

※ GPU 単品でもご購入いただけます。

GPU枚数 選択モデル

CPU : EPYC 9354 (32Core 3.25GHz)×1
Memory : 512GB
Storage : 1.92TB NVMe ×2
GPU : RTX PRO 6000 Blackwell Max-QWorkstation Edition
※最大8枚搭載可能
OS : Ubuntu24.04、AlmaLinux8.9
※Windows OSをご希望の場合には別途ご相談ください。

GPU搭載選択

選択① 2枚搭載
選択② 4枚搭載
選択③ 8枚搭載

**研究者には研究する力、
開発者には製品を開発する力を**

お役立ち情報

デスク上のAIスーパーコンピュータ NVIDIA DGX Spark 取り扱い開始



主な特長

GB10 Grace Blackwell Superchip

1,000 AI TOPS Blackwell GPU、20コア Arm CPU

AI、データサイエンス、コンピュート、レンダリング、ビジュ
アライゼーションのワークロードを高速化

NVIDIA ConnectX ネットワーキング

2台のDGX Sparkシステムを接続し、最大4,050億パラメータ
を持つAIモデルを活用可能

最大2台のDGX Sparkシステムをクラスタリング可能

柔軟な導入構成

AIワークステーションとしても、ネットワーク接続型の個人向
けAIクラウドとしても構成可

ユニファイド・システム・メモリ

128GBのコヒーレント統合システムメモリ

CPUとGPUがすべてのシステム・メモリにアクセス可能

最大2,000億パラメータの大規模AIモデルを処理可能

最大700億パラメータのモデルを調整可能

DGX OSとNVIDIA AIソフトウェアスタック

NVIDIAエンタープライズグレードのDGX OSと高速化されたAI
ソフトウェア

DGX Sparkでのワークロードを、DGX Cloud や他の高速な
データセンター/クラウド環境へスムーズに移行可能

コンパクトで電力効率に優れた設計

標準的なコンセントで駆動し、どんなデスクにも簡単に設置
可能

HPCシステムズはNVIDIA認定エリートパートナーです

当社は、NVIDIAのパートナー認定制度「NVIDIA Partner Network (NPN)」の最上位ランクの「Elite Partner」に認定されており、同社のエンタープライズ製品に付加価値をつけて販売しています。



Elite
Partner



nVIDIA

RTX PRO

NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell 受注開始のお知らせ

NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell WorkStation Edition



先行販売特別価格 税抜 **1,500,000** 円
(税込 1,650,000円)

NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell Max-Q Workstation Edition



先行販売特別価格 税抜 **1,500,000** 円
(税込 1,650,000円)

スペック	NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell WorkStation Edition	NVIDIA RTX PRO 6000 Blackwell Max-Q Workstation Edition
CUDAコア	24064	24064
Tensorコア	752	752
RTコア	188	188
単精度浮動小数点演算性能	125 TFLOPS	110 TFLOPS
AI TOPS	4000	3511
RTコア演算性能	380 TFLOPS	333 TFLOPS
TDP	600W	300W

HPCシステムズはNVIDIA認定エリートパートナーです

当社は、NVIDIAのパートナー認定制度「NVIDIA Partner Network (NPN)」の最上位ランクの「Elite Partner」に認定されており、同社のエンタープライズ製品に付加価値をつけて販売しています。



GPUソリューション

ローカルLLMスターターセット

ローカルLLM・RAG開発に最適なGPU環境を最短で構築
機密性の高いデータを用いて生成AIを活用

大規模言語モデル（LLM）とRAG（Retrieval-Augmented Generation）とは

大規模言語モデル（LLM）は、膨大な量のテキストデータを学習することで、人間の言語を理解し生成する能力を持ったAIモデルです。

文脈を把握して自然な文章を生成することが可能で、質問応答、文章の自動要約、翻訳、創作文章の生成など、さまざまな言語処理タスクを実行できます。

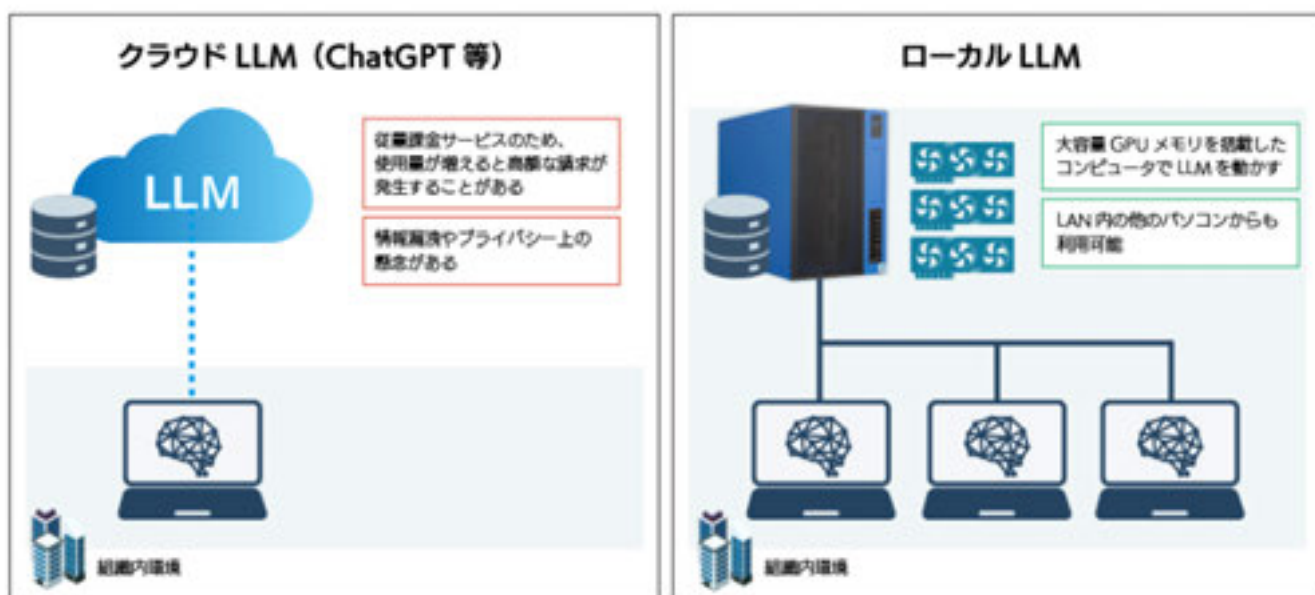
この技術によって、チャットボット、検索エンジン、推薦システム、自然言語インターフェースなど、多岐にわたる分野で活用され、業務の自動化や顧客対応の効率化に役立つと期待されています。また、専門分野に特化したカスタムモデルを構築することで、特定の業界や用途に最適化された応用が可能です。

また、LLMは大量のパラメータを持つため、効率的な計算資源（GPUサーバーなど）の活用が求められます。適切なハードウェアと最適化手法を組み合わせることで、実用レベルでの高速な応答や大規模な処理が実現されています。

しかしながら、LLMは膨大なデータから言語パターンを学習する一方で、「ハルシネーション」と呼ばれる、事実と反する情報や誤った応答を生成するリスクがあります。これは、学習データの偏りや情報の更新遅れ、あるいは単純にモデルの生成アルゴリズムの特性によるものです。



ローカル環境でLLMを構築するメリット



ローカル環境とは、システムやアプリケーションを自社内のサーバーやネットワーク上で構築・運用する環境です。これにより、セキュリティやプライバシーの管理が安全になり、外部依存を避けられる利点があります。さらに、高いカスタマイズ性により自社のニーズに合わせた最適な構成を選ぶことができ、特別な用途向けの高度な処理が可能になります。

ローカル環境でLLMとRAGを組み合わせたシステムを構築することで、機密性の高いデータや社内情報が外部に流出するリスクを抑え、安心して運用できます。全てのデータが社内に留まるため、情報漏洩対策も徹底可能です。

また、社内の業務内容や特定のニーズに合わせたチューニングやドメイン特化の知識の組み込みが容易です。RAGを活用することで、最新データや社内特有の情報を元に正確な回答が提供できます。

サイエンスクラウド



計算化学/CAEを
高額な初期投資やサーバー構築不要の
クラウドで利用しませんか？

計算化学ソフトやCAEソフトなど
クラウドで提供

計算化学ソフトやCAEソフトなど
クラウドで提供

サイエンスクラウドとは？

POINT
01



ハードウェア調達と
計算化学ソフトの
ライセンス取得も不要！

POINT
02



セットアップ不要で
動作確認済み環境を提供
すぐに計算をスタート！

POINT
03



システム運用管理はお任せ！
Microsoft、IDCFをはじめとする
堅牢なパブリッククラウドを利用

Entryプラン

計算化学の
未経験者・初心者に！

価格

月額5,000円～

利用条件

計算1回あたりの上限時間
30分～

オススメユーザー

- ・触媒・材料の研究開発用途に
- ・個人～数名チーム～十数名の教室規模
- ・アカデミックユーザーに

Standardプラン

計算化学の
中級者以上に！



価格

月額148,000円～

利用条件

計算時間は無制限
[サイエンスクラウドサービス利用規約](#)

オススメユーザー

- ・触媒・材料・創薬・高分子の研究開発用途に
- ・一部署の数名チーム規模に
- ・一時的に大量な計算環境が欲しい方に

CAEプラン

CAEシミュレーションを
利用されている方に！

価格

お問い合わせ

利用条件

お問い合わせ

オススメユーザー

- ・CAE(構造・流体など)に
- ・一部署～数部署で利用できる環境に
- ・一時的に大量な計算環境が欲しい方に

プログラム高速化サービス(GPU化)

お客様がお持ちのソースコードGPU化を強力にサポート！



GPUはCPUに比べて桁違いに多い計算コアを有しており、その計算コアを同時に多数活用して並列計算を行わせることで、CPUに比べて劇的に高速に計算を行うことが可能です。しかし、実際にGPGPUで高速に計算を行わせるには、GPUのハードウェアアーキテクチャ・ソフトウェアアーキテクチャを深く理解した上で、アプリケーションに合わせてGPU性能を最大限発揮させる並列プログラム開発のノウハウが必要となります。HPCシステムズでは、長年にわたりGPGPUを専門に研究し、さらにOpenMPによるマルチスレッド並列とノードをまたぐMPI並列にも精通した、高いプログラミングスキルを備えた技術者がご依頼に迅速に対応いたします。プログラムを高速化したいとお悩みの方は、是非私たちにご相談ください。既にGPGPUによる数々の劇的な高速化効果を実現しています。

プログラム高速化サービス(並列化)

お客様がお持ちのソースコードの並列化を強力にサポート！



CPUの速度向上率が停滞している今、プログラムの書き換えによって実行速度を劇的に伸ばす手段として、複数コアを並列に使用して計算を行う“並列化技術”が注目されています。複数のコアを効果的に使い、計算を正しく実行するためには、これまでと少し異なるプログラム技術が必要になります。弊社には、コンピュータに搭載されているすべてのコアを1つの計算に対して集中的に、有効に使用するための知識と技術の蓄積があります。私たちの知識と技術を、是非ご活用ください。

ソフトウェア



M-EVO®

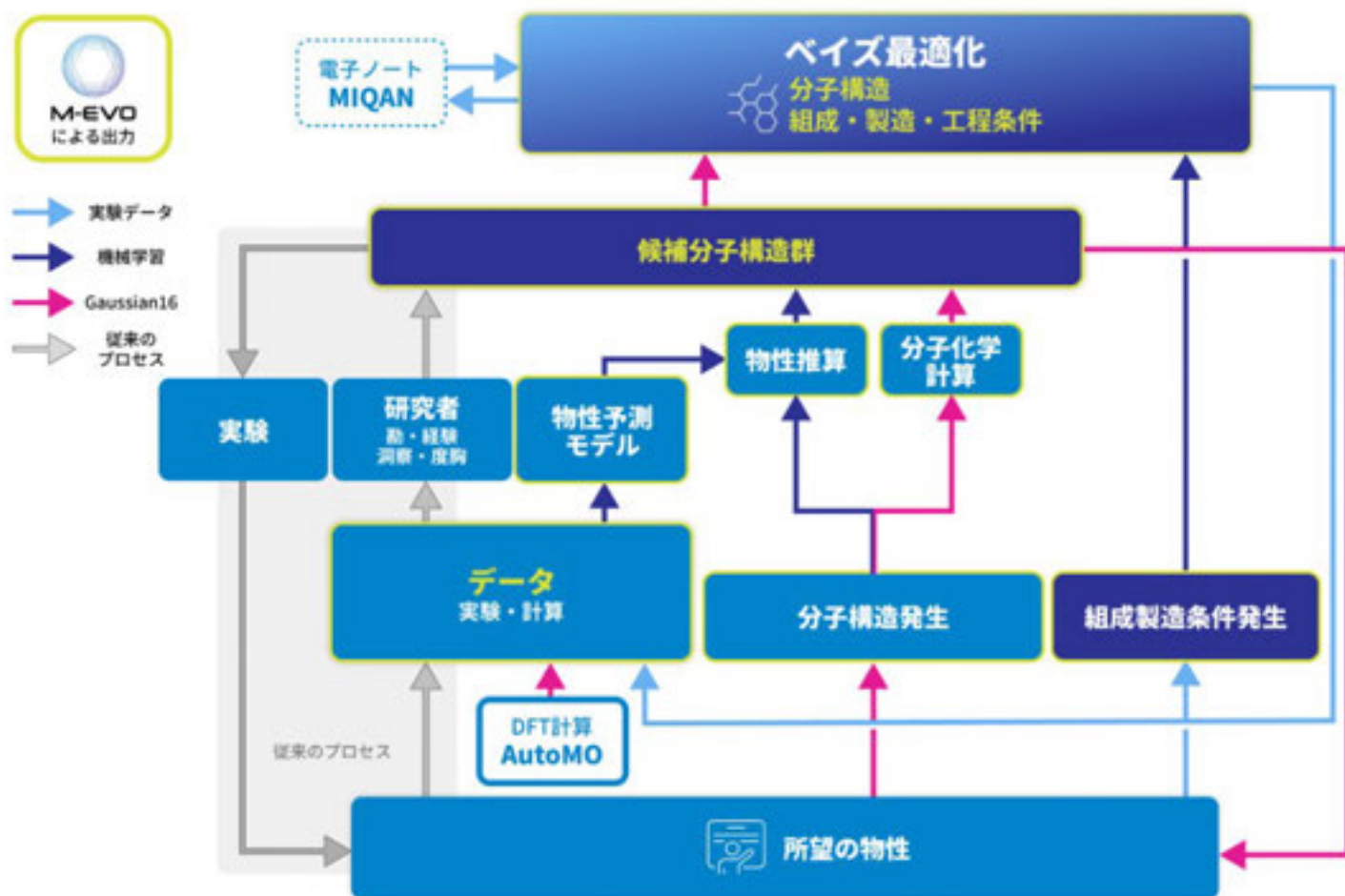
AI×分子科学の融合で 新規高機能材料開発を加速

— M-EVO®とは —

所望の物性を有する分子構造の探索 — データベースレスで実現するMIを用い 新たな
新素材開発のステージへ —

実験・計算・データサイエンスを1つのツールでカバー M-EVO®は、開発実験担当者が一人で実験・計算・データサイエンスの3役をこなして、研究開発を効率的に行うためのツールです。M-EVO®は、当社オリジナルのアルゴリズムにより所望の物性を有する多様な分子構造を探索し、提案します。複数の目的物性を考慮でき、合成の可能性や溶剤溶解性等の指標も含めたスコアを算出し、実用的な分子構造の探索ができます。

— M-EVO®による開発フローイメージ —

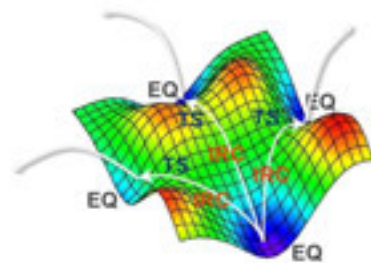


MIを素材の研究開発で有効活用するためには、開発実験担当者と計算担当者とデータサイエンティストの3者が協力することが大切です。現実的には、この3者が同じ土俵で議論することは容易なことではありません。開発担当者は常に実験の様子を見ながらどうしようか考えています。計算担当者は理想的な系で厳密な議論をしがちです。データサイエンティストは多量のしかも均質なデータを要求しがちです。この3者のベクトルをタイムリーに合わせるとい難事を、M-EVOを使えば実現可能です。

ソフトウェア

GRRM23

反応のすべてがわかります。



たった1つの分子をインプットするだけで、そこから生成されるすべての生成物やそれを生成しうるすべての反応物、そしてそれらすべての反応経路を自動的に探索できる、それがGRRM。触媒設計、材料スクリーニングなどさまざまな分野で活用できます。

特徴

量子化学的逆合成解析 (QCaRA)

GRRM20以降のバージョンでは、RCMC (Rate Constant Matrix Contraction) 法と呼ばれる反応速度論的解析手法が利用可能で、それを複雑な反応経路ネットワークに対して適用できます。GRRM23では、逆向きの反応速度論的解析機能がRCMCに基づいて実装されました。この機能は、反応経路ネットワーク上の他の化学種から出発するすべての反応について、目的生成物の収率を予測します[1]。この逆向きの反応速度論的解析機能を速度論ナビゲーションツールとして用いることで、量子化学的逆合成解析(QCaRA)が実施されます。生成物の構造をその唯一の入力として受け取るQCaRAは、小さな天然生成物の合成を含む、様々な既知の反応に対して正しい反応物を同定する能力を実証しました[2]。

[1] Y. Sumiya, Y. Harabuchi, Y. Nagata, S. Maeda, Quantum chemical calculations to trace back reaction paths for the prediction of reactants., JA CS Au, [2022, 2, 1181-1188](#).

[2] T. Mita, H. Takano, H. Hayashi, W. Kanna, Y. Harabuchi, K. N. Houk, S. Maeda, Prediction of high-yielding single-step or cascade pericyclic reactions for the synthesis of complex synthetic targets., J. Am. Chem. Soc., [2022, 144, 22985-23000](#).

ユーザー開発ツールを容易に実装可能にするユーティリティ

GRRM23は、ユーザーが開発した外部モジュールを用いて構造最適化や探索を制御する機能を提供します。これらのモジュールは、局所最小値付近の探索順序を変更したり、局所最小値から探索される経路を変更したり、システムに外部バイアスポテンシャルを適用したりすることができます。これらのオプションは、高速探索型ランダムツリーアルゴリズム[3]やグラフニューラルネットワークベースの経路選択アルゴリズム[4]などのアルゴリズムを組み合わせることで特定用途のSC-AFIR探索を加速するために使用されています。さらに、遷移金属触媒の仮想配位子の開発・応用にも利用されています[5]。

[3] A. Nakao, Y. Harabuchi, S. Maeda, K. Tsuda, Leveraging algorithmic search in quantum chemical reaction path finding., Phys. Chem. Chem. Phys., [2022, 24, 10305-10310](#).

[4] A. Nakao, Y. Harabuchi, S. Maeda, K. Tsuda, Exploring the quantum chemical energy landscape with GNN-guided artificial force., J. Chem. Theory Comput., [2023, 19, 713-717](#).

[5] W. Matsuoka, Y. Harabuchi, S. Maeda, Virtual-ligand-assisted screening strategy to discover enabling ligands for transition metal catalysis., A

さまざまな研究開発に利用できます

例えば薬剤の合成。目的の薬剤分子を合成しうるすべての反応経路を明らかにすることで、律速反応への触媒設計や副産物の抑制に活用できます。

例えば燃焼反応。数千、数万の素反応が高精度な量子化学計算に基づいて得られるので、自動車やロケットのエンジン設計CAEにおいて要求される反応速度の精度に応えることができます。



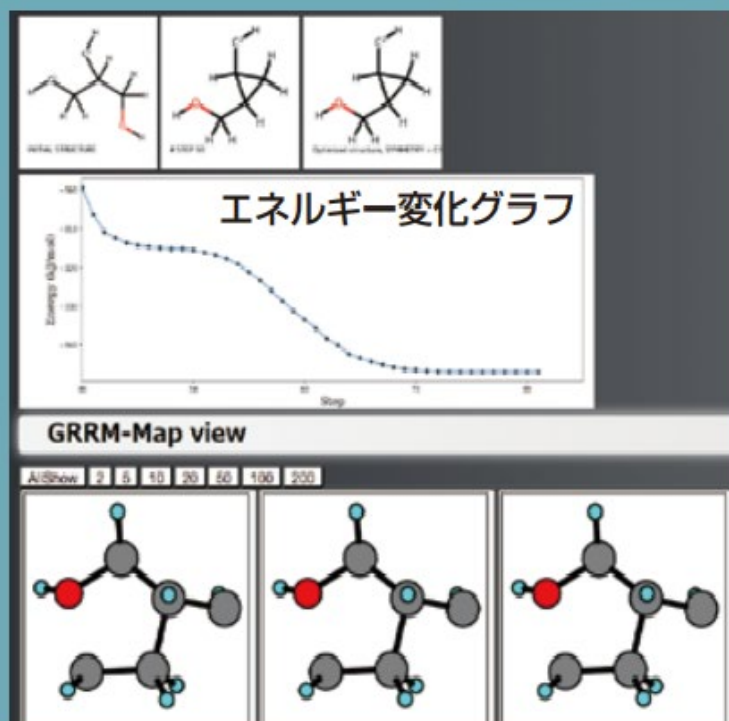
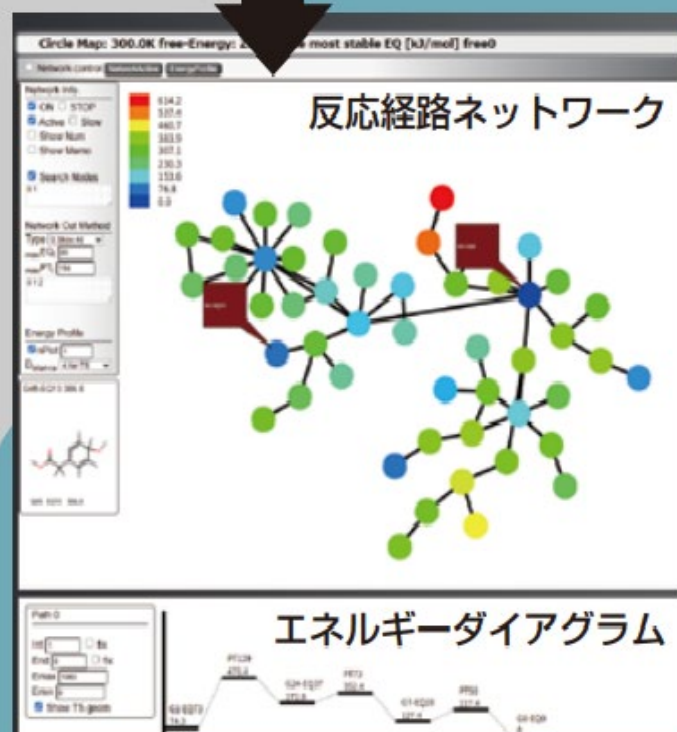
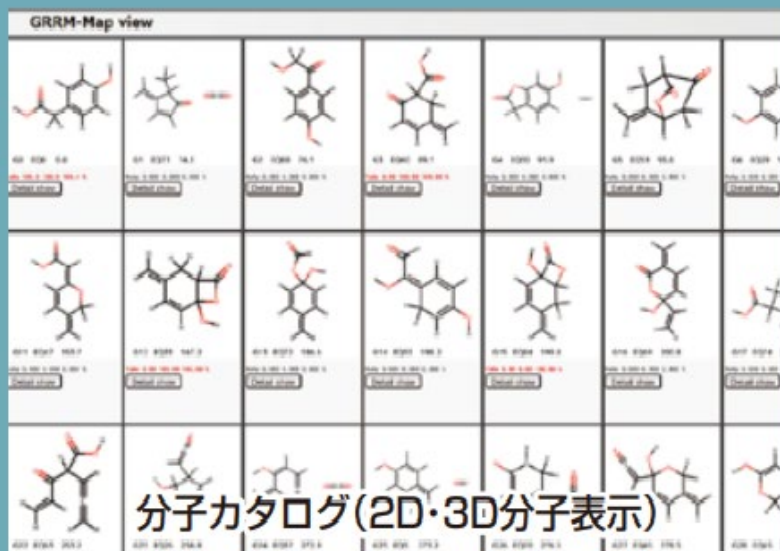
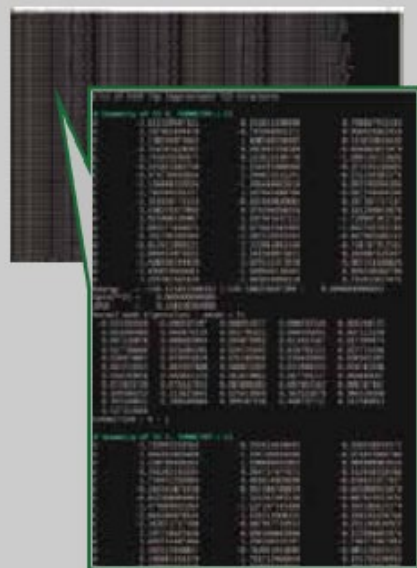
ソフトウェア

GRRMmap

GRRMの計算結果を効率よく解析できます

GRRMの大量の探索結果ファイル
(～数千・数万分子)

→解析しやすいように可視化



GRRMmapは、北海道大学 原測 祐 特任教授によって開発された、GRRM用ポスト処理プログラムです。GRRMmapは、GRRMの探索結果からユーザーが必要とする情報に短時間で視覚的にアクセス可能とします。GRRMmapの出力の形式はHTMLやJavaScript等を用いたWebページ形式となっており、Google Chrome等のWebブラウザで閲覧しやすくなっています。

Reaction plus Pro 2 / Express 2

これまで反応経路を求めるには経験と勘が必要とされ、特に肝となる遷移状態(TS)構造の最適化には大変な苦勞を強いられることが常でした。また、せっかくTSが求まっても、振動解析してみると反応とは全然関係ないTSだったり、TSからIRC計算が上手く走らず、結局反応経路が求まらないというケースもよくありました。Reaction plus Pro/Expressは「研究者のセンス」と「シミュレーション技術」をうまく活用したソフトウェアです。反応物と生成物と指定するだけで自動的に反応経路が求まります。

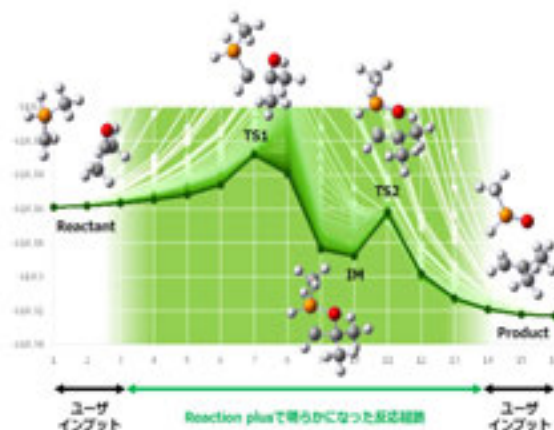
特長1. 遷移状態が手軽に見つかります。

従来の遷移状態最適化法では、これから求めたい遷移状態構造に近い構造を初期構造として指定しなければならず、職人技が要求されました。

Reaction plusではNudged Elastic Band (NEB)法に基づいて反応経路全体を最適化します。指定するのは反応前後の構造だけ。反応経路が自動的に最適化され、経路上の遷移状態構造が容易に求まります。

Reaction plus Pro 2の特長

- 特長1・[遷移状態が手軽に見つかります。](#)
- 特長2・[ONIOM反応系、不均一反応系、開裂反応系に対応しました。](#)
- 特長3・[インプット作成には、GaussViewのほか、AMBERやGROMACSが利用できます。](#)
- 特長4・[化学反応の様子がアニメーションで分かります。](#)
- 特長5・[よくわかるチュートリアル付き。サポートオプションもあります。](#)



価格

	Reaction plus Pro 2	Reaction plus Express 2
新規ライセンス	200万円 (アカデミック：80万円)	60万円 (アカデミック：30万円 ※1)
Ver.1からのアップグレード ※2	50万円 (アカデミック：30万円)	無償

- ◆ 表示価格は税抜価格です。
- ◆ インストールした計算機1台(=1ノード)のみで使用できます。
- ◆ アカデミックパッケージに機能制限はありません。ただし、研究成果を論文等で公開する際には本ソフトウェアを使用した旨を記載してください(詳細は[こちら](#))。
- ◆ 保証期間は購入後1年間となります。ソフトウェアの活用方法に関するサポートは「サポートオプション(下記)」をご利用ください。

※1 アカデミックのお客様で、Reaction plus Proと同時購入の場合は18万円となります。

※2 ExpressからProへのアップグレードはできません(新規ライセンスのご購入となります)。

計算化学セミナー

セミナーのご案内

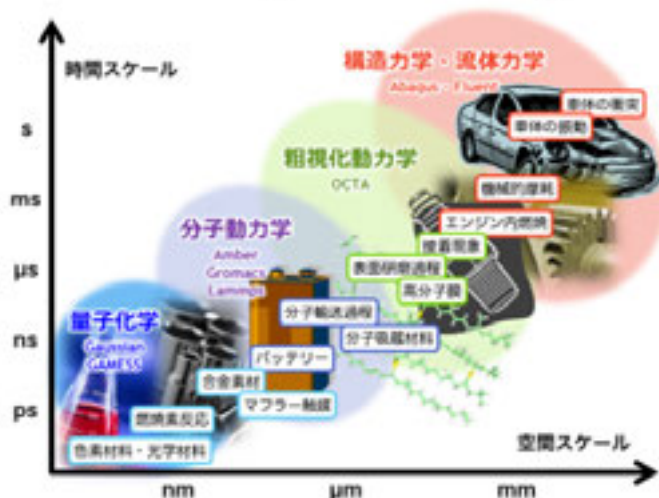
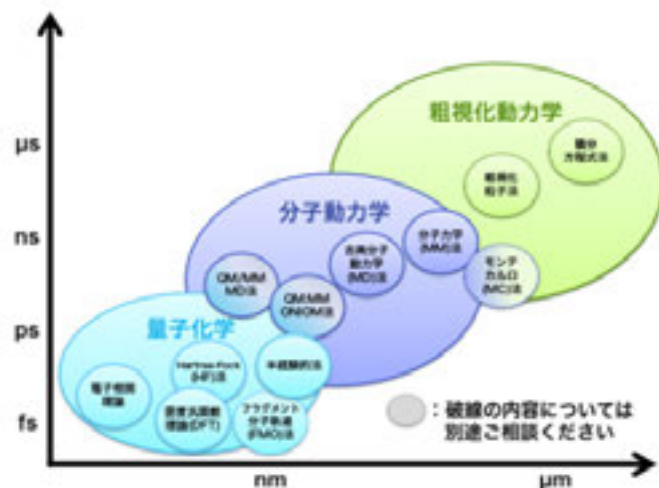
太陽電池色素材料や高効率触媒材料を、計算で新規設計も！

化学計算は理論研究者でしか扱えない難解なものではなく、誰にでも使えるツールになってきました。計算機はいまや単なる実験装置の一つであり、その「装置」を使えば、分子構造、各種スペクトル、電気/磁気的物性、反応エネルギー障壁、活性部位等、さまざまな情報が手軽に予測できます。

また産業利用という観点からも化学計算は有効であり、実際に以下のような開発分野で積極的に利用されています。

- ・ 太陽電池色素材料の分子設計
- ・ 有機ELなどの発光材料の分子設計
- ・ 触媒材料の分子設計
- ・ 創薬候補分子の探索
- ・ 電池構成分子の移動度制御
- ・ 分子吸蔵・分子選別・接着材料の性能向上等々

しかしいざ計算となると、自分の研究対象に適切な手法を選択するところで悩み、さらにはその理論の習得やソフトウェアの操作方法で苦労するのが常でした。実は「ものづくり」という視点で考えれば、計算化学の全てを理解する必要はありません。このセミナーでは実験をメインに研究開発されている研究者が本当に知りたかったテクニックや考え方を提供いたします。



本セミナーの特徴

- ・ 計算化学の有用性が判断できる豊富な事例をご用意
- ・ 最低限知っておきたい基礎的な知識が短時間で習得可能
- ・ 従来のセミナーにありがちなソフトウェアの使い方の説明に終わらず、より実践的な応用力が身に付く講習内容をご用意
- ・ お客様のご興味やレベルに合わせて内容をカスタマイズ
- ・ 少人数のクローズドセミナー制を採用：質問がしやすく、また受講者の理解度の乖離によって起こる、講習内容の消化不良が起こりにくい

過去開催されたセミナー

企業・アカデミック合わせて、100サイト以上での開催実績がございます。

計算のプロフェッショナルが求める性能と品質をお約束します ソフトウェアセットアップの職人技、「ビルド」。

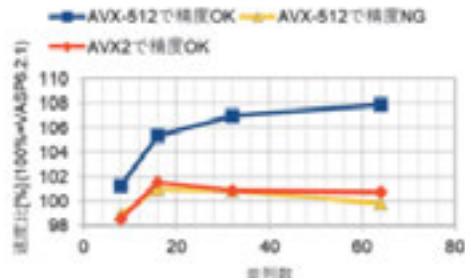
対応実績

Gaussian★	GAMESS★	Amber★	GROMACS★	LAMMPS★
VASP★	ABINIT-MP★	Quantum ESPRESSO★		ABINIT
BAGEL	CPMD	DALTON	DeepMDkit-LAMMPS	
DFTB+	DL_POLY	GENESIS	GULP	Molpro
myPresto	NAMD	NWChem	OpenMOLCAS	OpenMX
ORCA	PHASE/0	Pymol	WIEN2k	WRF
		XCrySDen		

(★：経験多数)

事例紹介

VASP6.3.1速度比較
(1,000原子 USPP)



必要な数値精度と計算速度を両立

VASP 6.3.1ではAVX-512を活用して高速化したかったのですが、コンパイルオプションを色々振ってみても、どうしても数値精度がNGになりました。そのため数値精度と計算速度を両立できるAVX2バイナリを採用しました。

エラー対処に手間のかかるアプリのビルドもお任せ

LAMMPSでは外部ライブラリの最新バージョンを常に使用できるとは限りません。例えばpaceのv2021.10.25はLAMMPSで使う場合に致命的なバグがある為、v2021.4.9を採用しました。vtkでは9.1は互換性に問題があり、LAMMPSのビルド手順に手を加えて8.2を採用しました。こうした動作チェックやトラブル対処を弊社が代わりに実施することで、お客様は研究と計算に集中できます。

安定したコンパイラバージョンを注意深く選定

弊社ではコンパイラを使うとき、マイナーバージョンの違いであっても、まず、HPL等で過去のバージョンとの違いを調べ、さらに多数のプログラムを実際にコンパイルして動作をチェックし、異常挙動や不安定な動作になりがちなバージョンを排除しています。例えばifort 17は、様々なプログラムで相性問題が生じたため不採用としました。他にも、ifortのOpenMPの仕様が19.0と19.1とで異なっており、古い仕様のOpenMPを扱うアプリではエラーとなるためOpenMPを無効にしたビルドを行う対応を行いました。



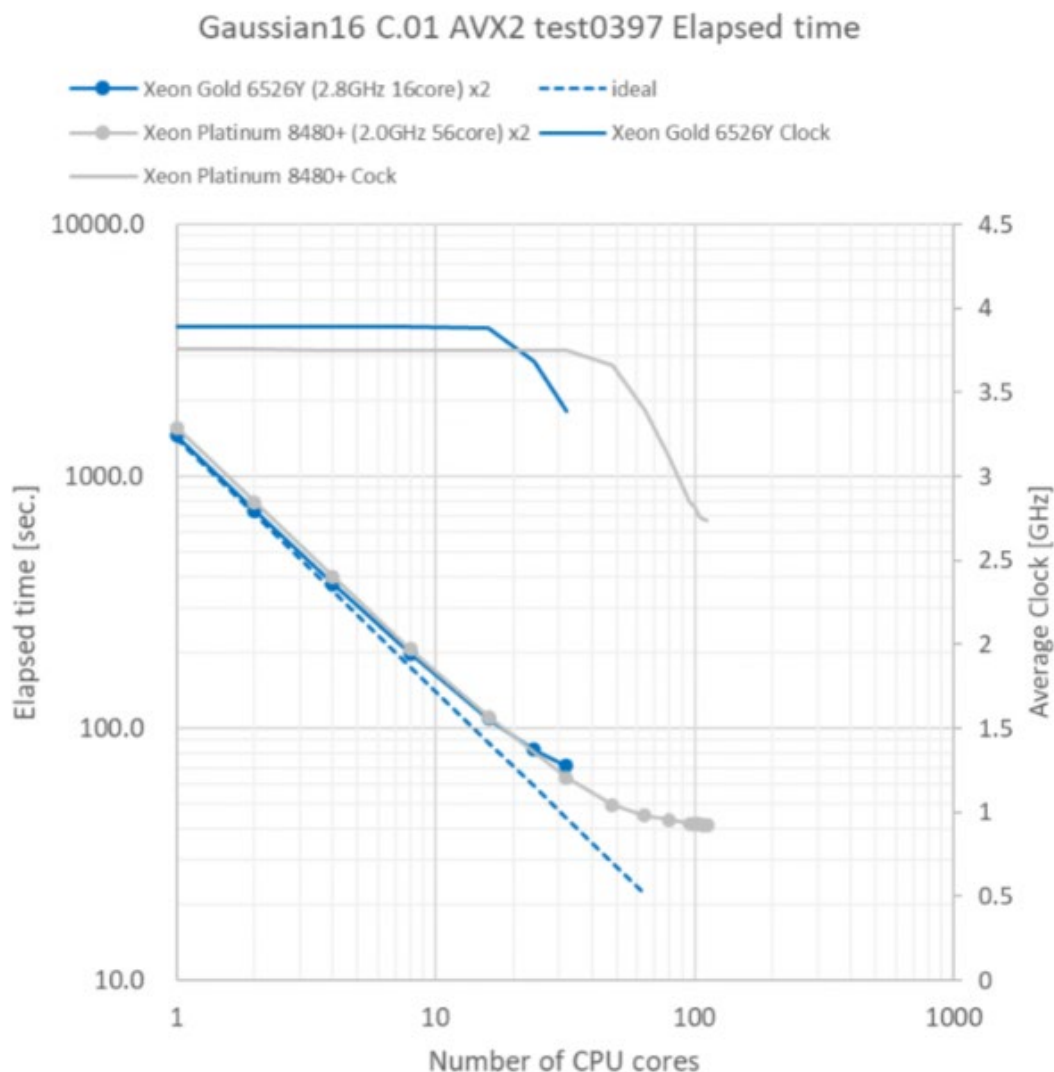
技術情報

CPU・GPU・各種アプリケーションのベンチマークを公開

ベンチマーク

量子化学計算のデファクトスタンダードである[Gaussian](#)でのベンチマークを行いました。AVX2に最適化されたGaussian社標準のBinary版パッケージを用いました（AVX-512には未対応）。

Gaussianパッケージに付属のtest0397インプット（Valinomycin分子C₅₄H₉₀N₆O₁₈、RB3LYP/3-21GでのForce計算）で経過時間を取得しました。さらに、基底関数系を6-31G(d,p)に変えたインプット（rkest0397と呼んでいます）についても経過時間を取得しました。Linux付属のperfコマンドを用いた平均実効動作クロックもグラフ中に併せて記載しています。



特長：前世代と同等の実効性能を達成

CPU動作クロック差で換算して、前世代と同等の実効性能がEmerald Rapids環境で得られました。前世代と比べてCPUやコアのアーキテクチャに大きな差が無いため、ほぼ同じ実効性能となるのは妥当と考えられます。



製品情報・科学ニュース・技術情報等を発信しています

https://twitter.com/HPCS_marketing



技術情報

HPCシステムズのエンジニア達による技術ブログ

Tech Blog


自社サーバーでのLLMに挑戦！ ローカルLLM+RAG環境を構築 してみた

はじめに 近年、生成AIや大規模言語モデル（LLM）の活用がビジネス・研究・開発の現場でも急速に進んでいま

◎ 2025.05.09  matsuo
■ HPC ■ DL

Samsung製 M.2 SSD 「PM9A3」の性能検証

今回は、Samsung製のデータセンター向けM.2 SSD「PM9A3」の検証内容についてまとめました。概要 前回の記事

◎ 2025.04.16  hpc
■ HPC ■ 未分類

ASUS M.2 アダプタ「HYPER M.2 X16 GEN 4 CARD」性能検証

今回は、ASUS製のM.2 SSDマウントPCIeカード「HYPER M.2 X16 GEN 4 CARD」の検証内容についてまとめまし

◎ 2025.04.09  hpc
■ HPC


Winmostar TechDay 2025 が 6/2 に開催されます！

Winmostar開発元の株式会社クロスアビリティ主催で Winmostar TechDay 2025 が 2025年6月2日(月) に開催され

◎ 2025.04.08  nabeo
■ 計算化学


拡張カード11枚フル装填！11 スロット産業PCを検証

今回は、弊社が提供している拡張スロットを11スロット搭載した産業用コンピュータ「IPC-C621ASM-R4」に、実

◎ 2025.03.31  matsuo
■ 産業用コンピューティング


高温高湿 vs PC！恒温槽試験を やってみよう！

HPCシステムズ CTO事業部では、恒温恒湿槽試験機を使用した環境試験を実施しています。本ブログではその概要

◎ 2025.02.10  matsuo
■ 産業用コンピューティング


Supermicroサーバー管理者必 読！「SuperDoctor 5」ログ設 定ガイド

ここでは、Supermicro社が提供するサーバー監視アプリ「SuperDoctor 5」のログファイル出力を制御する方法につ

◎ 2025.01.22  matsuo
■ 産業用コンピューティング

OpenVINO™ × Ubuntu × Intel GPU で加速するAI推論に チャレンジ！

前回の技術ブログでは、Windows環境でOpenVINO™を試しました。Intel OpenVINO™でAIを加速させよう！ イン

◎ 2024.12.17  matsuo
■ 産業用コンピューティング

L40S, H100 NVL上でのLLM推 論学習検証報告

目的 ローカルLLMを用いた生成AI活用に向けて、推論を中心としたパフォーマンス（体感速度、同時アクセス数）

◎ 2024.12.13  nabeo
■ DL



製品情報・科学ニュース・技術情報等を発信しています

https://twitter.com/HPCS_marketing



HPCシステムズ株式会社

本社（東京）：☎ 03-5446-5531
西日本営業所（京都）：☎ 075-353-0120

www.hpc.co.jp
hpcs_sales@hpc.co.jp

■担当窓口

文教チーム 長谷川菜摘

03-5446-5531
na-hasegawa@hpc.co.jp

※ 会社名及び製品名は、当社及び各社の商標または登録商標です。価格、写真、仕様等は予告なく変更する場合があります。製品の色調は実際と異なる場合があります。