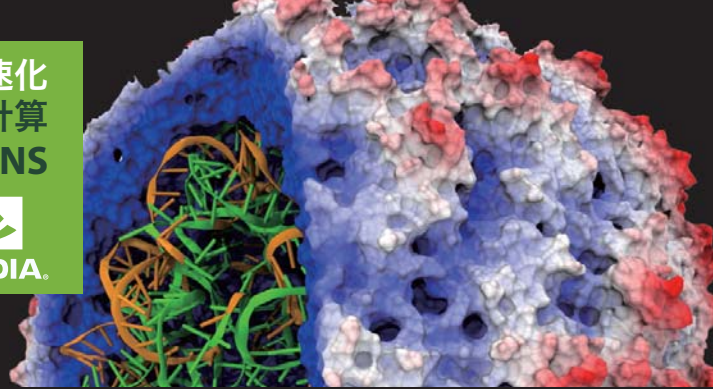


MDシミュレーション高速化  
GPUで加速する分子動力学計算  
AMBER, NAMD, GROMACS SIMULATIONS

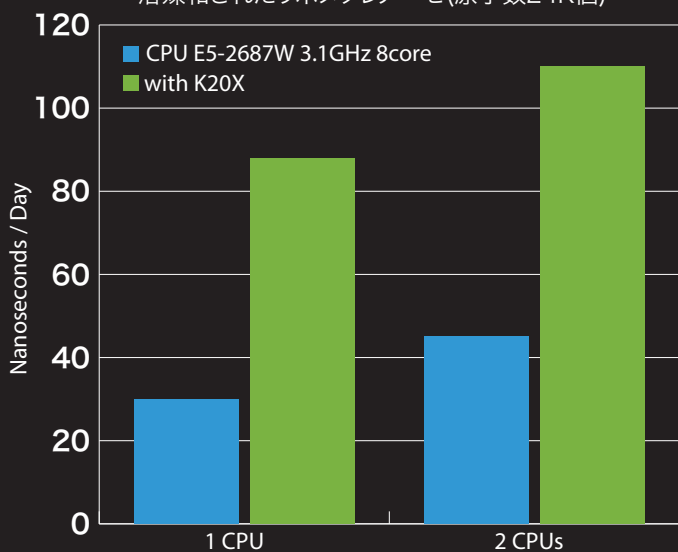


## GROMACS 3倍加速

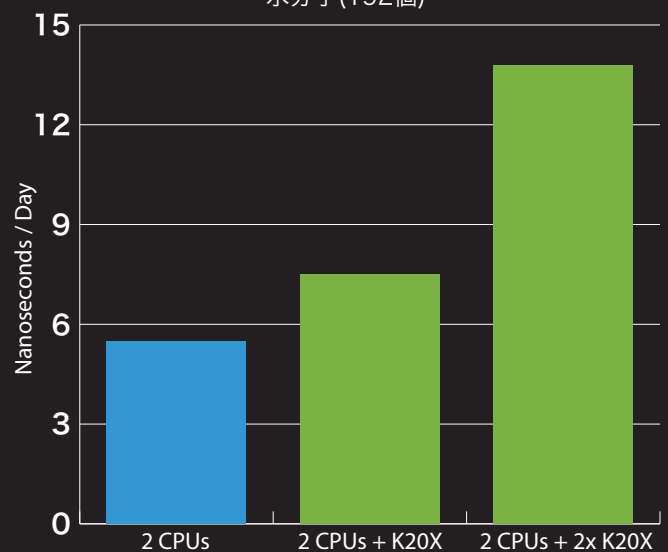
CPUには、Intel E5-2687W(3.1GHz 8 core, 2CPU 16 core)を、GPUには、NVIDIA Tesla K20X(2688 core Mem6GB)を用いています。どちらも現行世代では最速かつ最上位モデルです。下の左図は、溶媒和されたリボヌクレアーゼ(原子数24K個)に対するベンチマーク結果を示しています。1 CPUの場合に比べ、「1 CPU + 1 Tesla K20X」の場合では、性能が3倍向上しています。また、「2 CPU」の場合と「2 CPU + 2 Tesla K20X」の場合でも、2.5倍の性能が得られています。

次に右図は、水分子(192 K個)に対するベンチマーク結果を示しています。「2x CPU + K20X」の場合では、CPUのみの演算に比べ若干の性能向上が見られる程度ですが、これに対して「2x CPU + 2x K20X」の場合には、CPUのみの場合に比べ、2.5倍の性能向上が見られています。これよりTesla K20XあたりのCPU数を増やすことの利点はなく、Tesla K20Xの個数の比率は、1:1が最も効率のよい使い方であると考えます。

溶媒和されたリボヌクレアーゼ(原子数24K個)



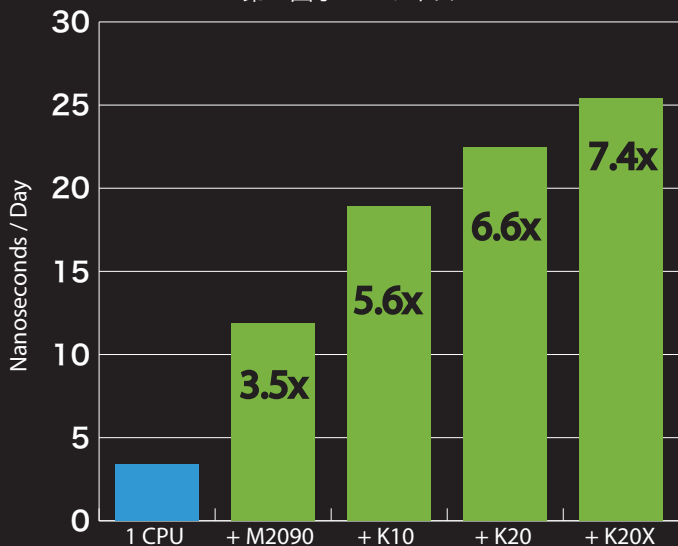
水分子(192個)



## AMBER 7.4倍加速

IX因子として知られるヘモフィリアBに対するベンチマーク結果を示します。評価は、AMBER 12 GPU Support Revision 12.1を用いて行いました。Teslaを併用した場合の全てにおいて、性能の向上が見られています。前世代のGPU Tesla M2090にて3.5倍の性能向上を示し、現行のTesla K20Xが7.4倍と最も性能向上に寄与することがわかります。

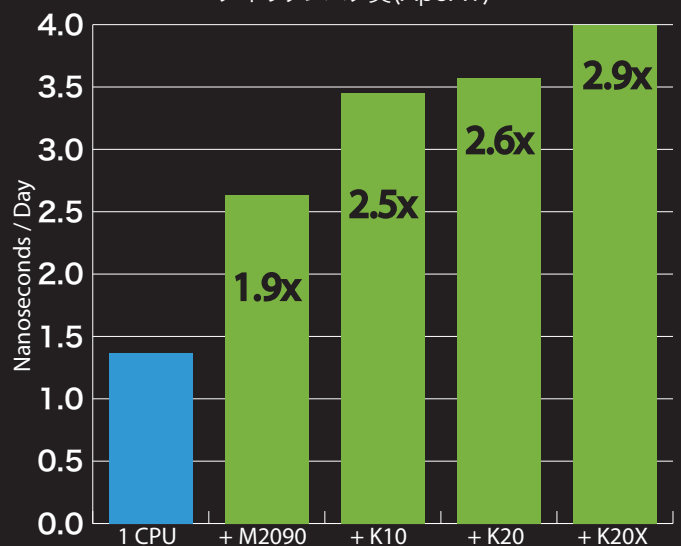
第IX因子 ヘモフィリアB



## NAMD 2.9倍加速

アポリタンパク質(ApoA1)に対するベンチマーク結果を示しています。評価は、NAMD version 2.9を用いて行われました。AMBER同様、Teslaを併用した場合の全てにおいて、性能の向上が見られています。Tesla K20Xでは、1 CPUに対して、2.9倍に達し、Amberにおけるベンチマーク結果と同様の傾向を示しました。

アポリタンパク質(ApoA1)



# GPUで高速化されるかは、 やってみないと分かりません。やりましょう。

MD計算におけるGPU対応が広がっており、ユーザにとって良い環境が整ってきました。例えばAmberにおけるGeneralized Bornや、PMEMDシミュレーションは、GPUを用いて高速化されることが知られています。「2日かかった計算が、数時間で終わる」という夢のような話が数多く、もはやGPU計算は実装ステージ真っ最中なのです。とはいえ計算対象は人それぞれ、多岐に渡ります。果たしてGPUによる高速化が期待できるのか、**HPCテック社とNVIDIA社が全面バックアップ**致します。

アプリケーション・ライブラリ・ハウスコードなどをお知らせ頂き、議論を重ねて高速化への検討

ターゲットパフォーマンスの策定と  
高速化に必要な環境とコストや期間のご案内

作業及び継続的な支援  
次世代アーキテクチャのご案内や講習会開催



世界最速パソコン Titan は GPU搭載 20PFlops



※対応した電源ユニットが必須となります

**NVIDIA® Tesla® K20**  
¥ 360,000

搭載GPUタイプ Kepler GK110  
CUDAコア数 2496  
周波数 706MHz  
搭載メモリ GDDR5 SDRAM 5GB ECC  
メモリバンド幅 208 GB/sec  
コネクタ PCI Express Gen2 x16  
電源供給 PCIe 6ピンコネクタ x2  
消費電力 最大 225watt  
ボード長 267mm x 111mm x 38mm



**HPCT W210s / K20**  
¥ 988,000~

CPU インテル Xeon プロセッサ E5ファミリー  
Mem 最大 512GB DDR3-1600MHz  
HDD 3.5inch HDD 及び SSD搭載可能  
NIC GbitEth x2, 10G, Infiniband搭載可能

1050Watt 高効率80Plus Platinum 電源  
奥579mm x 幅252mm x 高530mm

CUDAセットアップ無償 セットアップ済み



※対応した電源ユニット及び冷却機能が必須となります

**NVIDIA® Tesla® K20X**  
¥ 単体販売無し

搭載GPUタイプ Kepler GK110  
CUDAコア数 2688  
周波数 732MHz  
搭載メモリ GDDR5 SDRAM 6GB ECC  
メモリバンド幅 250 GB/sec  
コネクタ PCI Express Gen2 x16  
電源供給 PCIe 6ピンコネクタ x2  
消費電力 最大 235watt  
ボード長 267mm x 111mm x 38mm



**HPCT R120gs / K20X**  
¥ 988,000~

CPU インテル Xeon プロセッサ E5ファミリー  
Mem 最大 512GB DDR3-1600MHz  
HDD 2.5inch HDD 及び SSD搭載可能  
NIC GbitEth x2, 10G, Infiniband搭載可能

1800Watt 高効率80Plus Platinum 冗長化電源  
1U 奥787mm x 幅437mm x 高43mm

CUDAセットアップ無償 セットアップ済み

## サポート体制

### ハードウェア保守

標準で1年センドバック保守が付帯。3年保守やオンサイト他、ご希望に合わせて様々なサポート体制をご利用頂けます。

### GPUポーティング

既存のプログラムをGPU化するサービスです。既にGPU化されたものを最適化することも出来ます。計算規模やアルゴリズムに応じて適切な手法を検討し、疑問や問題を解決します。

### トレーニング / 講習会

GPUの基本的な使い方やプログラミング手法などのトレーニングをご提供します。学生向けの講習会や、並列計算クラスタの使い方など、GPUに限らずご利用の環境に合わせた内容のセミナーを行います。

日本総代理店ACTICA 正規代理店 Mellanox, CAPS, BrightComputing

## 株式会社HPCテック

〒103-0005 東京都中央区日本橋久松町 4-7 日本橋エビスビル 1F

<http://www.hpctech.co.jp/>

# HPC TECH

High Performance Computing Technology

●インテル, Intel, Intel Core, Pentium, およびXeonは、Intel Corporationまたは子会社の米国およびその他の国における商標または登録商標です。●NVIDIA, NVIDIAのロゴ, CUDA, Teslaは、米国およびその他の国におけるNVIDIA Corporationの商標または登録商標です。●その他の会社名および製品名は、それぞれの所有企業の商標または登録商標である可能性があります。●記載事項は予告なく変更される場合があります。●製品の外観や色は実際のものとは異なる場合があります。

お気軽にご連絡ください



TEL: 03-5643-2681  
FAX: 03-5643-2682



[sales@hpctech.co.jp](mailto:sales@hpctech.co.jp)