

TSUBAME 共同利用サービス

High-Performance Computing at Tokyo Tech TSUBAME 2.5

みんなの

ピーク性能5.7PFlops、1400ノード、16800CPUコア、GPU4200台搭載。

スパコン

東京工業大学のスパコン TSUBAME 2.5 圧倒的な規模と性能をご利用ください。

TSUBAME 2.5

TSUBAME 共同利用のお問い合わせは ▶▶▶ kyoyo@gsic.titech.ac.jp

みんなのスパコン TSUBAME 共同利用サービスは、 ピーク性能 5.7PFlops、1400ノード、16800CPU コア、4200GPU 搭載、 世界トップクラスの東京工業大学のスパコン TSUBAME 2.5を 東京工業大学以外の皆さまにもご利用いただくための制度です。

TSUBAME 共同利用サービスの利用区分とカテゴリ

TSUBAME 共同利用サービスには「学術利用」と「産業利用」の利用区分があります。

「学術利用」は、HPCI（革新的ハイパフォーマンスコンピューティングインフラ）、JHPCN（学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点）の採択により無償でご利用になれる制度と、東京工業大学学術国際情報センターが実施する有償の制度がご利用になります。

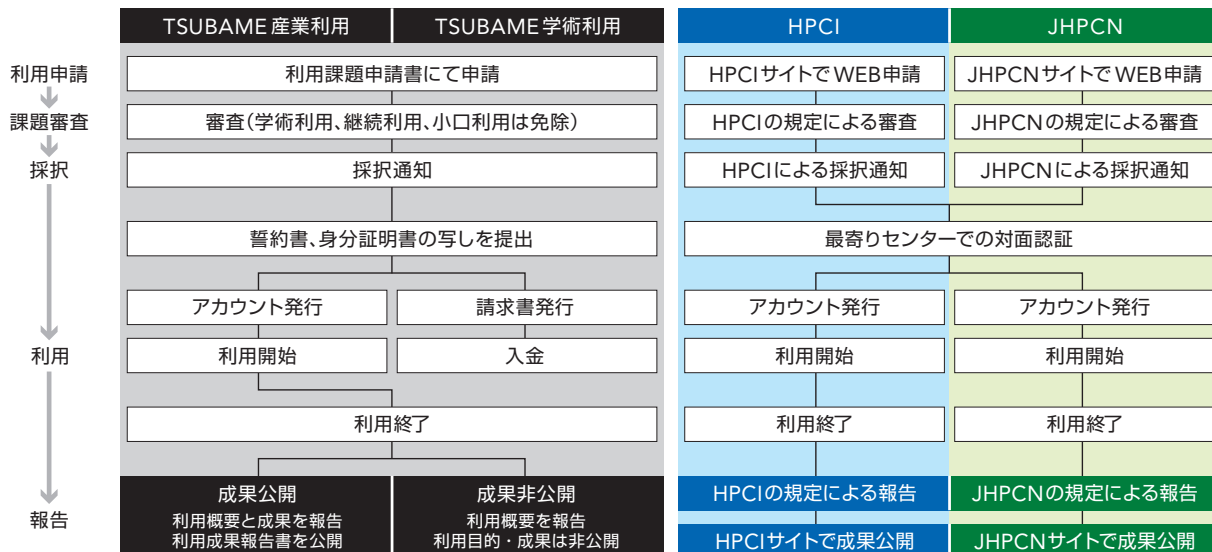
「産業利用」は、HPCI の採択により無償でご利用になれる制度と、東京工業大学学術国際情報センターが実施する有償の制度があり、有償の制度には利用目的や利用成果を非公開とする「成果非公開」のカテゴリもあります。

TSUBAME 共同利用サービスの利用料金

TSUBAMEにおける計算資源は口数を課金単位としております。1口は3000ノード時間積で、1計算ノード(12CPUコア、3GPU、58GBメモリ搭載)を3000時間、あるいは300計算ノードを10時間というように、ご利用の用途に合わせて自由にご利用になります。TSUBAME 共同利用サービスの利用区分・カテゴリ・利用料金を下表に示します。

利用区分	利用者	制度	募集時期	申請および審査	成果	利用料金(税別)	
学術利用	他大学 または 研究機関等	HPCI	年1回10月頃	HPCI 運用事務局 (高度情報科学技術研究機構)	公開	無償	
		JHPCN	年1回1月頃	JHPCN 拠点事務局 (東京大学 情報基盤センター)	公開	無償	
		TSUBAME 学術利用	随時募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開	1口：120,000円	
産業利用	民間企業	HPCI	実証利用	年1回10月頃	HPCI 運用事務局 (高度情報科学技術研究機構)	公開	無償
			トライアルユース	随時募集中			
		TSUBAME 産業利用	随時募集中	東京工業大学 学術国際情報センター	公開 非公開	1口：120,000円 1口：480,000円	

TSUBAME 共同利用サービスの利用申請フロー



建築物の室内外環境の連成解析とその高速化技術の開発

清水建設株式会社 技術研究所

室内外環境の連成解析モデルとその解析例

解析対象建物



解析結果例



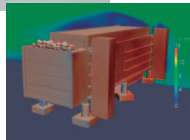
下図 / 気流・風圧
コンター

連成解析モデル (計算格子)

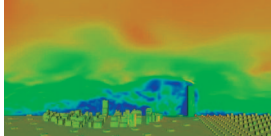


屋外 屋内

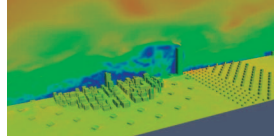
上図 / 光レンダリング



中層市街地の解析モデル:



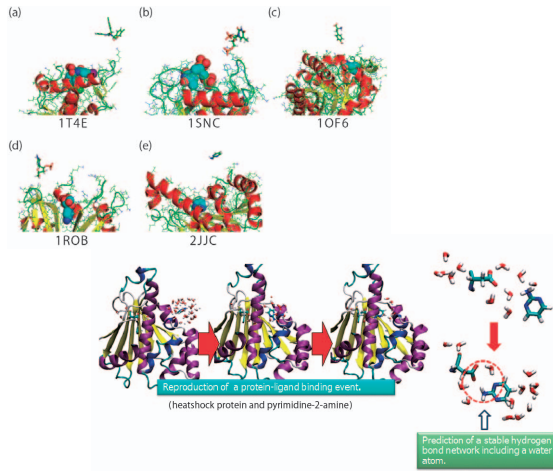
風速コンター・風圧力



建築物の快適な室内環境の創出及び居住性の向上の他、その建築物の運用による環境への負荷を最小限に抑えるために、屋外の自然環境の活用及びその環境の変化に応じる室内設備の制御による室内外環境の連成解析の実施が必要となる。その連成解析は非常に大規模となり、通常の計算機で実施することは困難であるため、大規模計算クラスターや高速な計算方法の確立が必要となる。本件利用は、スパコンTSUBAMEの計算資源を利用することで、建築物の室内外環境の解析モデル及び連成解析システムを構築し、超並列CPU及びGPUによる数値解法を開発するとともに、大規模計算による建築物の室内外環境の評価を可能にする。

拡張アンサンブルシミュレーションによるタンパク質とリガンドの結合構造予測法の開発

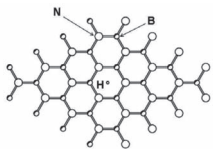
武田薬品工業株式会社 医薬研究本部 探索研究センター



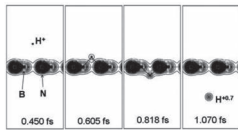
タンパク質と結合するリガンドの結合構造の予測法を開発した。我々の方法は拡張アンサンブル法の一つであるレプリカ交換アンブレラサンプリング法と、平均力ポテンシャル、主成分軸上のリガンド自由エネルギー地形解析に基づいた方法である。テストケースとして5つのタンパク質リガンド複合体に適用したところ、タンパク質とリガンドが完全に離れた状態からシミュレーションを始めて、PDBに登録された実験構造と類似した結合構造を予測することに成功した。これは、タンパク質-リガンド結合過程におけるタンパク質、リガンド及び溶媒水のエンタルピー・エントロピー効果や結合に伴う構造変化を原子レベルで取り入れた初めての計算であり、水分子を含んだ安定な水素結合ネットワークを予測することができた。

ワイドギャップナノ構造体精密加工のシミュレーション

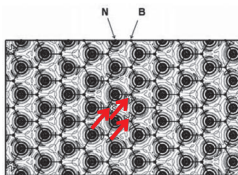
日本電気株式会社 グリーンイノベーション研究所



今回のシミュレーションの配置。
入射する方向より、hBN膜を見ている。
H+の位置が入射のインパクトポイント。



高速でプロトンがhBNを通過する際
の全電荷分布移動の様子。
表示の時間はシミュレーション中の時間



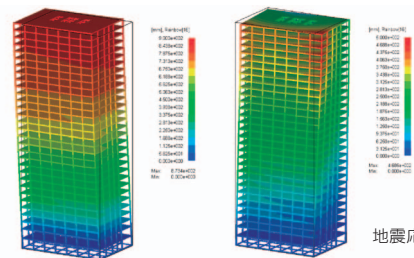
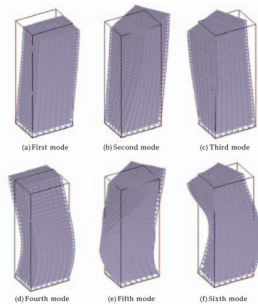
電荷分布と通常のhBNの電荷分布の差。
赤い矢印はプロトンが通過した周辺に
局在する正孔の存在を示した。

BNナノチューブを電子励起やCoulomb explosionなどで構造変化させることを、シミュレーションで調べる目的をもつ。その準備段階として、時間依存密度汎関数理論を応用して電子とイオンの運動を扱う計算コードの安定動作を、TSUBAME上で確認した。テストケースとして、プロトンがhBN層を通過する計算を行い、hBN層内の電子集団励起によるプロトンの制動、プロトンより注入された正孔が、一瞬だけプロトンがhBN層を通過した点に局在することが観測でき、この計算コードがTSUBAME上で安定に動作し、今後予定しているさまざまな研究テーマに応用可能であることを確認した。

高層ビルの大規模非線形地震応答解析

株式会社アライドエンジニアリング

TSUBAME16ノード
4コアを使用した
固有値解析を行った。
1次と4次モードは
短辺方向並進1次と2次、
2次と3次および5次と6次は
長辺方向並進とねじれの
連成1次と2次である。



地震応答解析

建築構造物をソリッド要素を用いて標準的な有限要素法解析を行う試みは、実施者らの知り得る限り、世界的に見ても例がない。当社は、汎用並列有限要素法コードADVENTUREClusterソルバに大規模地震応答解析の機能を備えるべく開発を進めている。本課題ではTSUBAMEの並列性能を最大限引き出し大規模地震応答解析コードの実用化を目指した。

TSUBAME 2.5

Compute Node

CPU: Intel Xeon X5670 (6core) × 2
GPU: NVIDIA Tesla K20X × 3

Performance: 4.08 TFLOPS
Memory: 58.0GB (CPU)
18.0GB (GPU)



Rack (30 nodes)

Performance: 122 TFLOPS
Memory: 2.28 TB



System (58 racks)

1442 nodes: 2952 CPU sockets, 4360 GPUs
Performance: 224.7 TFLOPS (CPU) ※ Turbo boost
5562 TFLOPS (GPU)

Total: 5787 TFLOPS
Memory: 116 TB



Interconnect

InfiniBand QDR (40Gbps) × 2 Topology: Fat-Tree

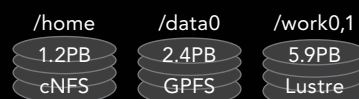
Operating System

SUSE Linux Enterprise Server 11 SP3

Job Scheduler

PBS Professional

Storage System



TSUBAMEで利用実績のあるアプリケーション

分野	アプリケーション（「*」は、GPUに対応）
分子動力学	AMBER*, CHARMM*, DesmondMD*, GROMACS*, Lammps*, NAMD*, Tinker, VSOP, etc.
量子化学	ABINIT-MP, GAMESS*, Gaussian, OpenMX, PHASE, Quantum Espresso*, VASP*, etc.
バイオ	BLAST, MEGADOCK*, etc.
流体	ANSYS Fluent*, OpenFOAM*, Particleworks*, Power Flow, Star-CCM+, etc.
構造	Abaqus*, ANSYS Mechanical*, COMSOL Multiphysics, LS-DYNA*, MSC Nastran*/Marc*, etc.
電磁界	ANSYS HFSS*, CST MW-Studio*, KeySight EMPro*, Remcom XFDTD*, etc.
その他	MATLAB*, R*, Caffe*, Chainer*, Python*, WRF, ParaView*, POV-RAY, AVS, etc.

TSUBAME 共同利用サービスの利用実績

利用区分	2007年度	2008年度	2009年度	2010年度	2011年度	2012年度	2013年度	2014年度	2015年度	合計	
学術利用	HPCI	-	-	-	-	6	5	10	14	35	
	JHPCN	-	-	-	4	6	5	11	10	46	
	有償利用	-	-	1	4	9	14	17	22	90	
産業利用	無償利用	11	15	15	8	10	12	21	17	122	
	有償利用	成果公開	-	-	3	6	7	9	8	10	51
		成果非公開	-	-	2	7	6	4	10	12	51
合計	11	15	21	29	38	50	72	81	78	395	

お問い合わせ

- 東京工業大学 学術国際情報センター 共同利用推進室
- e-mail kyoyo@gsic.titech.ac.jp Tel. 03-5734-2085 Fax. 03-5734-3198

詳しくは

<http://www.gsic.titech.ac.jp/tsubame/>

