

## 特別 1

演 題	計算化学専用機の開発 - より安くより大きな計算のために -	
発 表 者 ( 所 属 )	○長嶋雲兵( 産業技術総合研究所グリッド研究センター)	
連 絡 先	〒305-8568 つくば市梅園 1-1-1 産業技術総合研究所グリッド研究センター	
キーワード	special purpose computer, computational chemistry	
開発意図 適用分野 期待効果 特徴など	計算化学のコストを下げるために、専用計算機を開発し、その効果をみた。	
環 境	適 応 機 種 名	
	O S 名	
	ソース言語	
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 ( 右 の い ず れ か に ○ を つ け て く だ さ い )	<ul style="list-style-type: none"> <li>・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする</li> <li>・独自に頒布する</li> <li>・ソフトハウス、出版社等から市販</li> <li>・ソフトの頒布は行なわない</li> <li>・その他 ○・未定</li> </ul>	<p style="text-align: center;">具 体 的 方 法</p> <p>Program の問い合わせ先</p>

### 1. はじめに

第一原理に基づいた計算化学シミュレーションは計算量が非常に多いが、使える計算機資源が一般にはパーソナルコンピュータやワークステーション程度であるため、応用範囲が限られている。このような数値シミュレーションでは、一部の数値計算に全計算時間のほとんどを費やしている場合が多い。したがって、この部分のみを超高速計算できる PCI ボードタイプの組み込み型ハードウェアがあれば、比較的小さな計算機環境への投資で、現場で必要とされる大規模なシミュレーションが可能になる。

このような科学技術専用計算機の開発は、分子動力学(MD)シミュレーションや天体の軌道計算などの分野では行われてきた。しかしながら、分子軌道(MO)法や密度汎関数(DFT)などに対する専用計算機開発は、計算が複雑なため、これまでほとんど行われてこなかった。そこで汎用的な規格である compact-PCI のボードに計算量の大きなコア部分 (例えば、MO 計算における 2 電子積分計算) の計算を行う専用 LSI を搭載した「組み込型科学技術専用計算機システム」を開発している。(Figure 1)

今までのところ、専用 LSI の代わりに汎用プロセッサ(Hitachi SH4)を搭載した評価計算機システム (Figure 2)が完成して、その性能評価が終了した。その結果、使用するプロセッサ数、ボード数が増加

しても計算効率の低下が見られず、開発中の組み込み型の専用計算機アーキテクチャが非常に効率よく動作することが分かった。今後は、現在開発中の専用 LSI を搭載した PCI ボードを組み込んだ小型の PC クラスタでタンパクの MO 計算のような大規模な数値計算を行い、大規模計算機以上の計算性能を小規模、省電力、高いコストパフォーマンスで実現できることを実証する。

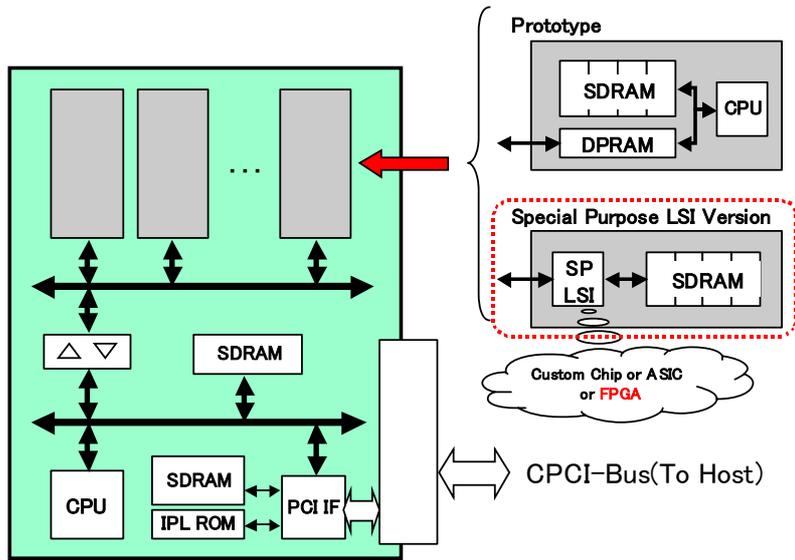


Figure 1 Board Block Diagram

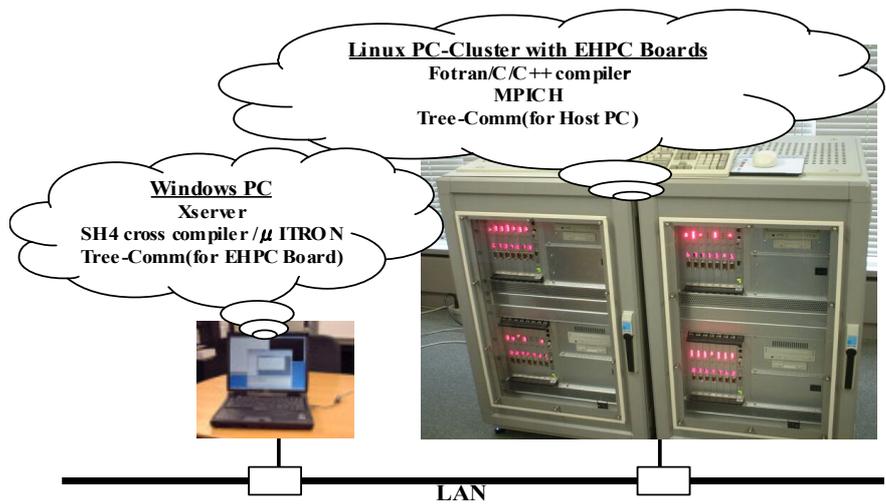


Figure 2. System Overview