

1P07

Embedded High Performance Computing

○長嶋 雲兵¹、村上 和彰²、大谷 泰昭³

¹産業技術総合研究所グリッド研究センター(〒305-8568 つくば市梅園 1-1-1)

²九州大学大学院システム情報科学府(〒816-8580 春日市春日公園 6-1)

³(株)富士総合研究所科学技術グループ(〒101-8443 千代田区神田錦町 2-3)

【緒言】

計算化学、計算物理学に代表される「数値シミュレーション」は今日、産業界の多くの現場での需要が大きい情報科学技術の基盤技術である。しかし、技術者が日々の設計開発業務で計算を実行できるプラットフォームはワークステーションやパーソナルコンピュータというのが実状であり、まだその計算能力の非力さ故に数値シミュレーションの応用が一部にのみ限定されるという問題を抱えている。本研究ではこの状況に鑑み、「専用ロジック組込み型数値シミュレータ構成のためのアーキテクチャ」を開発する。

【方法】

分子軌道法、密度汎関数法に関して、以下の特徴を備えたアーキテクチャの開発を行っている。①計算物理、計算化学、等の各計算科学分野が有する計算上の独自性を反映した専用/準専用システム、②システム LSI 技術と並列分散処理技術を駆使、③従来のスーパーコンピュータに比べて飛躍的に優れたコスト・パフォーマンス、④研究現場、設計開発現場におけるパーソナル・ユースに供することが可能、⑤組込み機器システムのようにユーザ・フレンドリーなハードウェア/ソフトウェア一体型システム

【結果】

現在までに、汎用 CPU である SH4 を用いたプロトタイプシステムが完成し、分子軌道法、密度汎関数法のプログラムを動作させ、良好な結果を得ている。特に、フラグメント MO 法のプログラム ABINIT-MP の移植を行ってプロトタイプシステム上で動作検証した結果、積分値の一部再利用を行う Buffer 法採用の積分プログラムを用いた 4 筐体のシステムで、PentiumIII800MHz 単体に比べ 61 倍の性能が得られることが分った。

おわり