

## 分子軌道専用計算機の開発と性能評価

○梅田宏明<sup>1,2</sup>、本田宏明<sup>3</sup>、中村健太<sup>3</sup>、稲富雄一<sup>1,2</sup>、小松晴信<sup>4</sup>、  
佐々木徹<sup>5</sup>、小原繁<sup>6</sup>、長嶋雲兵<sup>1,2</sup>、上原正光<sup>4</sup>、村上和彰<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 科学技術振興機構 CREST、<sup>2</sup> 産業技術総合研究所 計算科学研究部門、  
<sup>3</sup> 九州大学大学院 システム情報科学府、<sup>4</sup> セイコーエプソン、  
<sup>5</sup> アプリオリ・マイクロシステムズ、<sup>6</sup> 北海道教育大学 釧路校

計算用途を限定した専用計算機の利用は、大規模科学技術計算を実現するための解決策の一つである。ある種の科学技術計算においては特定の方程式を解くためだけに非常に大きな計算量を要しており、この方程式を高速に計算することに特化した専用のアーキテクチャを持つ計算機システムが作成できれば、一般の PC よりもはるかに性能の高い計算機を比較的安価に利用することが可能になる。例えば生体分子のような大規模系の分子軌道計算ではフォック行列の生成に全計算時間の 9 割以上の時間を費やすことが知られており、専用計算機によってフォック行列を高速に生成することができれば、比較的手軽に大規模分子軌道計算が実行できる環境が実現できると思われる。

EHPC (Embedded High Performance Computing) プロジェクトでは、性能/消費電力に優れた二電子積分計算専用 LSI による超高並列高速分子軌道計算を目的としている。プロジェクトでは二電子積分専用 LSI (ERIC, Fig. 1) の開発をはじめ、超高並列計算を可能にするプラットフォームシステム (Fig. 2) や並列計算アルゴリズムの開発が行なわれた。本発表では、分子軌道専用計算機の概要を紹介するとともに性能評価の結果を報告する。

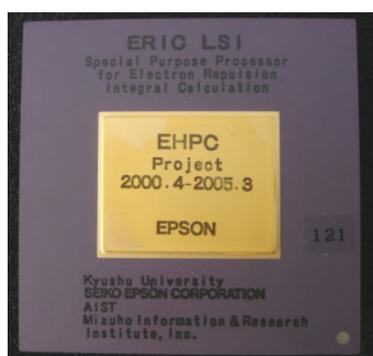


Fig. 1. ERIC processor



Fig. 2. EHPC platform

謝辞: 本研究の一部は科学技術振興調整費 総合研究「科学技術計算専用ロジック組込み型プラットフォーム・アーキテクチャに関する研究」(代表 村上和彰 九州大学教授)によるものである。