

理研分子動力学シミュレーション用超高速専用計算機 (MDM) が世界最 高速コンピューターに

理化学研究所 (小林俊一理事長) が開発した「分子動力学シミュレーション専用計算機 (MDM : Molecular Dynamics Machine)」が 10 日 (現地時間 9 日午後)、米国・ダラスで開かれた国際会議「Supercomputing 2000^{*1}」で、計算速度世界一の計算機に与えられる“Gordon Bell 賞^{*2}”のピークパフォーマンス賞を受賞しました。

MDM は、当研究所の情報基盤研究部の戎崎俊一基盤研究部長が中心となり、同部計算科学技術推進室が開発。分子動力学シミュレーションに特化した超高速・超並列のコンピューターです。今回、計算科学技術推進室では、実アプリケーションでの性能評価を実施。その結果得られた実効速度は 1.34Tflops で、この結果をまとめた論文が今年の“Gordon Bell 賞”にノミネートされ、計算速度最高を示すピークパフォーマンス賞に選ばれました。

1. 分子動力学シミュレーション

分子動力学シミュレーションは、タンパク質などの生体高分子の構造や働き、結晶の構造や固体の物性、蒸発や液化などの相変化、割れ目の伝播などの研究に広く用いられています。これらのシミュレーションのためには、多数の原子の間に働く静電力や分子間力を扱う必要がありますが、これまでは扱える原子数が数万個程度に限られていたため、十分な精度の計算ができませんでした。この問題を打破する方法として、計算機の用途を限定することで計算機の演算パフォーマンスを上げ、より高速で、高性能な計算機が開発が行われています。

2. 理研分子動力学シミュレーション専用計算機 MDM

MDM は、原子の間に働く静電力や分子間力をフーリエ変換を使って高速に計算するためのシステムと、静電力の実空間部分や分子間力を計算するシステムとを合わせたものです。それぞれのシステムを分けて専用計算機とすることで、高性能・超高速のシミュレーションが可能になります。研究チームでは、前者を「WINE-2」システム、後者を「MDGRAPE-2」システムと名付けました。MDM は、ワークステーションクラスターに「WINE-2」と「MDGRAPE-2」という二つの専用計算機がつけられています。

MDM の開発は 1996 年から始まり、「WINE-2」は完成。「MDGRAPE-2」も完成に向けて組み立てられており、2001 年 3 月には全システムが完成する予定です。

3. MDM の性能評価

今回の MDM の性能評価にあたっては、約 2 千万原子の塩化ナトリウム (NaCl) に熱を加え溶解していく様子 (溶解塩の分子動力学) をシミュレーションしました。本計算を行った MDM の設計速度は 46Tflops ですが、実際のアプリケーションを

実行して得られたパフォーマンス（実効速度）は 1.34Tflops となりました。現在最も早いパソコンは約 1Gflops の性能を有していますが、実効速度は設計速度の 15% 程度ですので、約 1 万倍の性能差があります。

本年度末に完成する MDM は、75Tflops の性能を持っており、今回と同じ NaCl のシミュレーションを行った場合、およそ 10 倍早い実効速度が得られる予定です。最終的には 100Tflops まで性能を引き上げることを目指しています。

また、計算科学技術推進室では、MDM 上でタンパク質の分子動力学シミュレーション用プログラムとして有名な「AMBER」というプログラムが作動するようにしており、今後、このシステムを用いてタンパク質の熱変性などのシミュレーションを行っていく予定です。

(問い合わせ先)

独立行政法人理化学研究所 広報室

嶋田 庸嗣

Tel : 048-467-9272 / Fax : 048-462-4715

※1 「Supercomputing 2000」

米国電気電子学会（IEEE）を中心に、世界中の高速計算科学技術の専門家により開催される国際会議。1988 年より毎年 1 回開催され、同会議において世界高速コンピューターに対して“Gordon Bell 賞”が贈られます。

※2 「Gordon Bell 賞」

その年の科学技術計算の実効速度を競い合うものであり、ハイパフォーマンスコンピューティングの世界では最も権威のある賞のうちの一つ。今日コンピュータのピーク速度のみが注目される中、実アプリケーションでの計算速度を元に判定を行う点がユニークな点です。なお、本年のピークパフォーマンス賞には、東京大学の「GRAPE-6」開発チームも選ばれました。



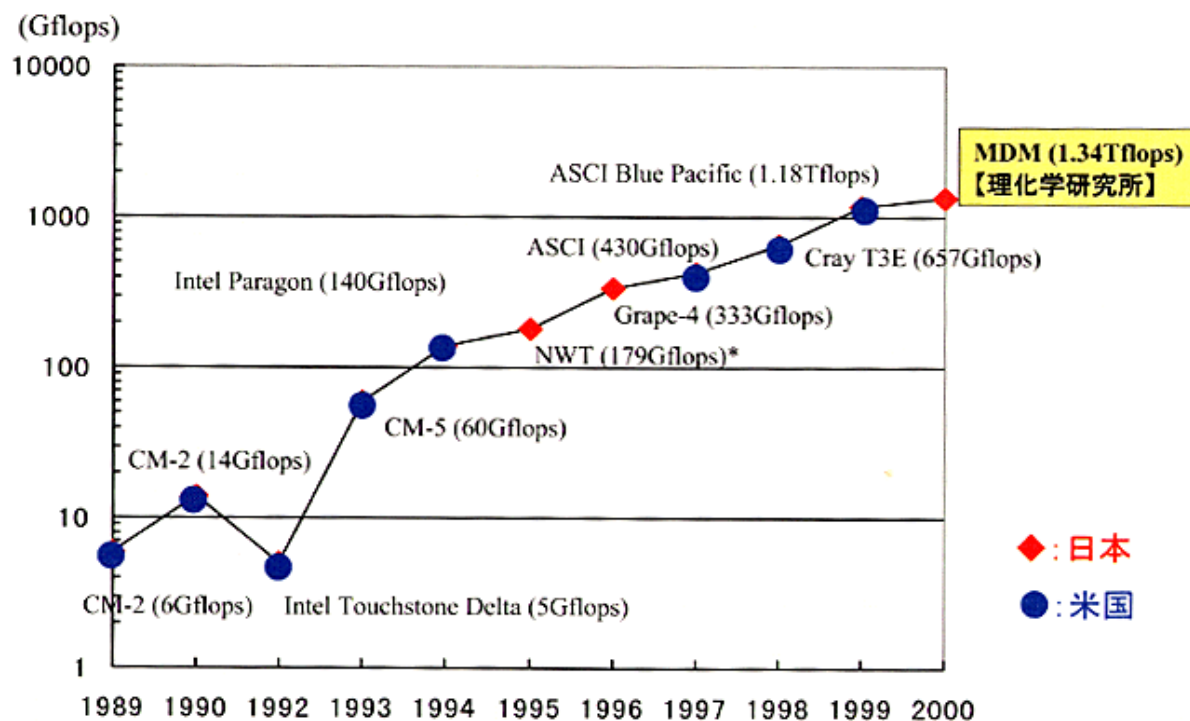
分子動力学専用計算機には
約 5,000 個のチップが搭載

分子動力学専用計算機に
搭載されているボード



ピーク演算性能 100 テラフロップスを誇る分子動力学専用計算機

ゴードン・ベル賞 計算速度の推移



*数値風洞(航空宇宙技術研究所)