

1999年11月16日  
独立行政法人 理化学研究所

## 50Tflops の分子動力学専用計算機完成

理化学研究所（小林俊一理事長）は、50Tflops の分子動力学専用計算機 WINE-2 を完成した。この計算機は、これまで世界でもっとも速いとされていたマシンの約 18 倍の速さである。これにより、理化学研究所が開発をすすめている世界最高性能の分子動力学シミュレーション用超高速専用計算機 MDM(Molecular Dynamics Machine)の完成に向けて大きく前進したことになる。

この計算機は、11月16日から19日に米国オレゴン州ポートランドで行われる Supercomputing'99 に出展する。

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動き、結晶の構造や固体の物性、蒸発や液化などの相変化、割れ目の伝播などを研究するのに広く用いられてきた。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るが、これまでは、扱える原子の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なかった。

理化学研究所情報基盤研究部部長 戎崎俊一（えびすさきとしかず）を中心とする研究グループは、計算機の用途を限定することにより高速・高性能なシミュレーションが可能になると考え、分子動力学シミュレーション用の超高速専用計算機 MDM の開発を進めている。

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体したものである。それぞれのシステムを分けて専用計算機とすることにより、高性能・超高速のシミュレーションが可能になる。研究グループは、前者を WINE-2 システム、後者 MDGRAPE-2 システムと名付けた。

このたび、WINE-2 システムが完成し、また、MDGRAPE-2 システムに使用するための LSI である MDGRAPE-2 チップの開発に、日本 IBM 株式会社東京基礎研究所の協力を得て成功した。これにより、MDM の完成に向けて大きく前進したと言える。

WINE-2 システムの開発にあたっては、まず、専用の LSI を特別に開発し、WINE チップと名付けた。WINE チップは、66MHz のクロックで駆動され、その計算性能は 20Gflops（1 秒間に 200 億回の演算をする）である。これは現在もっとも早いパソコン用 CPU である Pentium III チップ（733MHz 版）の約 27 倍の速さである。このような高性能は、チップを専用化し無駄な部分を徹底的に削ることにより達成された。

この WINE チップを 2688 個並列接続して WINE - 2 システムが完成した。そのピーク性能は 50Tflops を超える。これは、現在世界でもっとも速いとされている、米国サンディア研究所の ASCI RED マシンの約 18 倍である。これまでに測定した実効性能は、約 10Tflops で、これも上記 ASCI RED マシンの 5 倍である。

一方、MDGRAPE-2 チップと名付けた LSI は、100MHz のクロックで駆動され、演算性能は 16Gflops である。このチップを 4 個搭載した PCI カードも完成し、パーソナルコンピュータに接続して動作が確認された。

今後、MDGRAPE-2 チップを 3000 個程度並列接続することで、MDGRAPE-2 システムを完成させる。あわせて、WINE-2 のソフトウェアの整備とハードウェアの拡張によって実効性能を 30Tflops 程度まで向上する見込みである。これによって、全体として 100Tflops の MDM を完成させる予定である。

用途を絞り無駄をなくした専用計算機は、汎用計算機に比べて 100 倍から 1000 倍高い演算性能が得られる。このような専用計算機のアプローチの有用性は、1995 年に東京大学教養学部が開発した、世界最初の 1Tflops マシン GRAPE - 4 でも実証されている。これは銀河の衝突や星団の進化のシミュレーションのための専用計算機であり、MDM はその流れを汲むものである。MDM ならば、百万個の原子を含んだシミュレーションが可能であり、水中で働く生体高分子の大規模なシミュレーションが実現できると予想される。

理化学研究所では、さらにこの考え方を進めて、分子動力学シミュレーションだけでなく、電子状態のシミュレーションやゲノム系列の解析用の専用計算機を開発する提案をしている。これらの専用計算機の目標性能は 1Pflops (1 秒間に 1000 兆回の演算) である。

なお、WINE-2 システムおよび MDGRAPE-2 チップは、11 月 16 日から 19 日に米国オレゴン州ポートランドで行われる High Performance Networking and computing conference '99 (通称 Supercomputing'99) に出展する。Supercomputing '99 は、スーパーコンピューティング、ネットワーク、通信技術、計算科学などの先端技術に関する世界最大の国際会議・展示会である。米国で 1988 年より毎年開催され、今年で 11 回目を迎える。

(問い合わせ先)

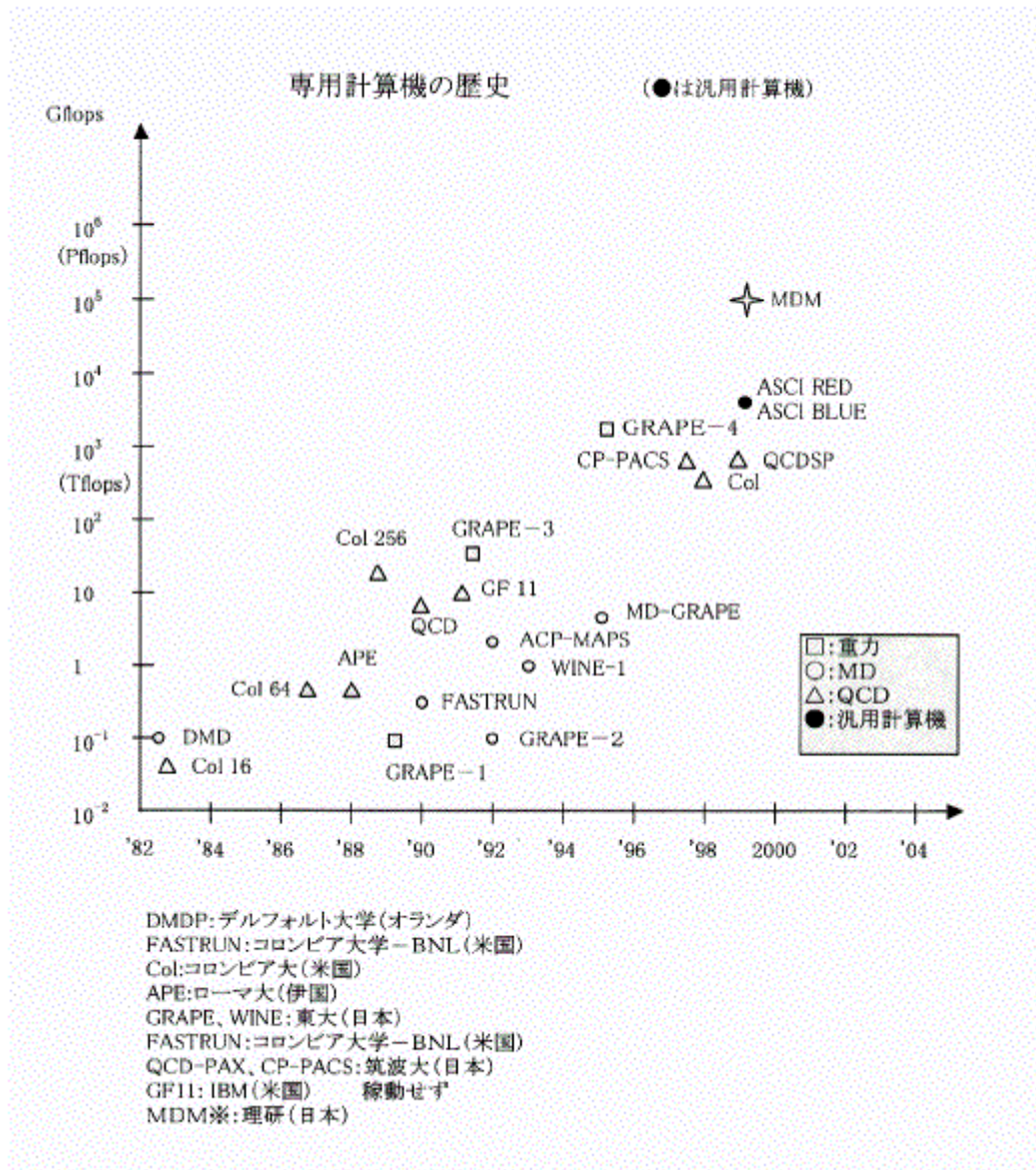
独立行政法人理化学研究所 情報基盤研究部 基盤研究部長  
戎崎 俊一 (えびすさきとしかず)

Tel : 048-462-1111 ext.3621 / Fax : 048-467-4078

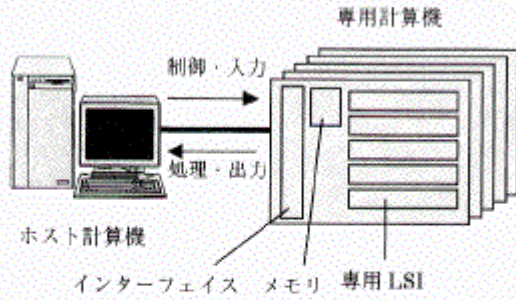
(報道担当)

独立行政法人理化学研究所 広報室

吉垣



超高速専用計算機システムの仕組み



ホスト計算機

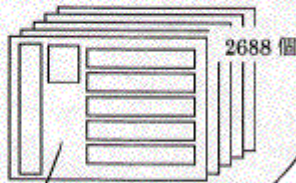
ホスト計算機は、計算量は多くないが複雑で頻繁に変更が必要な部分を担当。

専用計算機

一連の計算のうち、特定の部分だけをハードウェア化したもので、ホスト計算機と結合したシステムで稼動する。専用計算機は、定型で単純だが計算量が多い部分を担当。この際、専用計算機はホスト計算機のバックエンド・プロセッサとして働く。

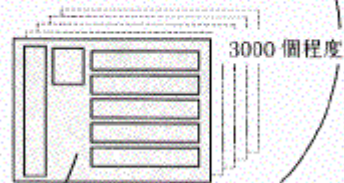
分子動力学シミュレーション用の  
超高速専用計算機  
MDM: 100Tflops  
(調整中)

WINE-2 システム: 50Tflops 超  
(完成)



WINE チップ: 20Gflops  
(完成)

MDGRAPE-2 システム  
(調整中)



MDGRAPE-2 チップ: 16Gflops  
(完成)

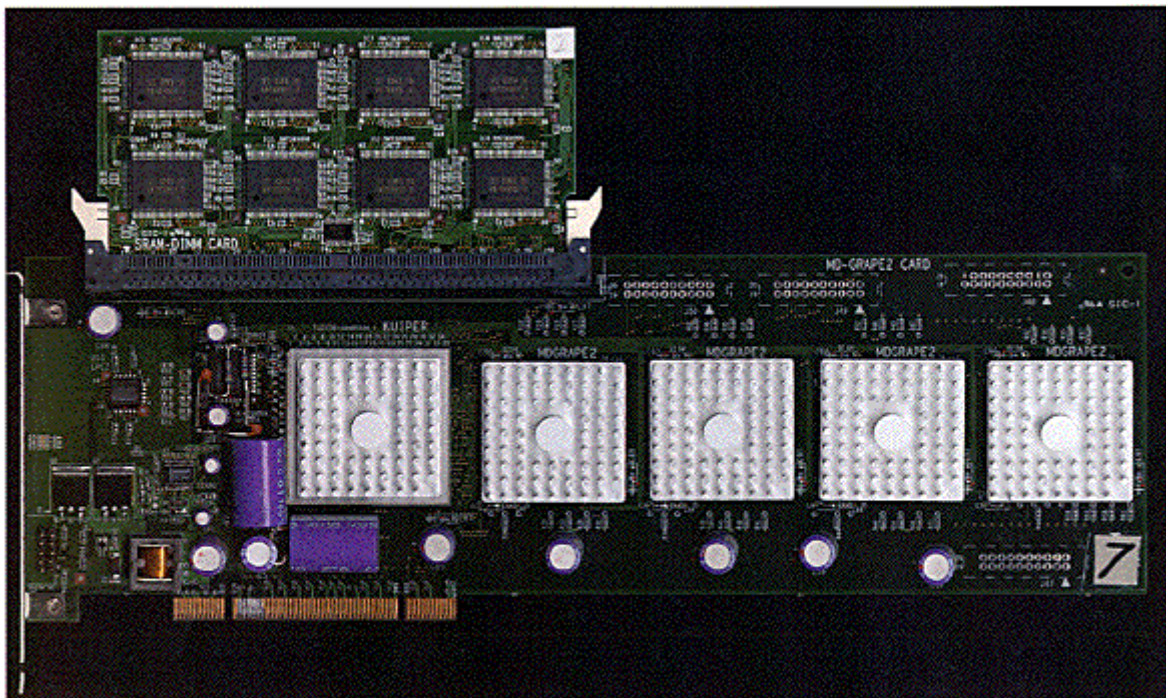




#### WINE-2 システム

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

- ・ピーク性能：50Tflops 超
- ・WINE チップ（計算性能 20Gflops）を 2688 個搭載



#### MDGRAPE-2 ボード：

MDGRAPE 2 システム（静電力の実空間部分や分子間力を計算するシステム）に搭載するボード。  
チップの演算性能は 16Gflops