

3p071

## 2 電子積分計算専用 LSI を搭載した専用計算機による 分子軌道法計算

(九大情基センター<sup>a</sup>, 産総研<sup>b</sup>, CREST JST<sup>c</sup>, 九大院シス情<sup>d</sup>)  
本田宏明<sup>a</sup>, 梅田宏明<sup>b,c</sup>, 稲富雄一<sup>b,c</sup>, 中村健太<sup>d</sup>, 村上和彰<sup>a,d</sup>, 長嶋雲兵<sup>c</sup>

### 【序】

近年、化学や薬学などの理論や実験の多方面の研究現場において分子軌道法プログラムが頻繁に使用されており、分子の電子状態計算のみならず、その成果の無機、有機、生化学や創薬などの広汎な分野への応用が進んでいる。しかしながら非経験的分子軌道法は、取り扱う分子系が大きくなるに従い計算に必要な分子積分データの規模が急激に膨大なものとなる状況がある。これに対し最近のスーパーコンピュータや高性能ワークステーション等による大規模並列計算機の使用については依然としてコストが高く、かつ設備の維持管理も大変であるため、現在のところ研究者が研究室レベルで大規模計算をパーソナル・ユースに利用することは大変なことである。そこで、EHPC (Embedded High Performace Computing) Project では「現実を反映した大規模分子系」の分子軌道計算を、「低コスト=パーソナル・ユース」で実現すべく、SCF レベルの非経験的分子軌道法を高速に実行する EHPC (Embedded High Performance Computing) 専用並列計算機システムの開発に取り組んできた。本プロジェクトでは、基本となる 2 電子積分計算アルゴリズムに対し小原による分子積分の一般漸化表式 (新小原積分法)<sup>1</sup> を採用した。この新小原積分法アルゴリズムにもとづき専用の低消費電力型 LSI (ERIC) の開発を行った。さらにはこの ERIC が小スペースにて多数並列実行可能となる EHPC プラットフォームアーキテクチャという専用計算機をあわせて開発した。

### 【2 電子積分専用 LSI (ERIC) の開発】

本研究にて開発した 2 電子積分計算専用 LSI (ERIC) は、小原による分子積分の一般漸化表式にもとづく計算に最適となるように構成されており、その内部主要構成としては以下の 2 つのエンジン部分からなる。図 1 参照。

**初期積分計算エンジン** 電子反発積分計算における初期積分部分、さらにはフォック行列計算部分、通常必要な種々の算術計算や関数呼び出し、ループ、条件分岐の演算を行なえる。このエンジンについては通常のプログラム制御にて動作する。

**漸化計算エンジン** 電子反発積分計算における漸化計算部分を担う。大量の浮動小数点積和演算を並列に高速で実行できるよう設計されている。

### 【EHPC プラットフォームアーキテクチャによるフォック行列の並列計算】

EHPC プラットフォームアーキテクチャでは、図 2 にあるようにツリー状の階層化構造を採用している。Top Layer や Second Layer である PC 部分では SCF レベルの量子化学計算を通常の MPI 並列により行なうが、そのうちフォック行列計算に対しては Bottom Layer を構成する ERIC により更なる並列化を行い計算する。House Keeping Layer の SH4 LSI は下位にあたる ERIC による部分フォック行列の計算の負荷分散を行ない、結果を集め、上位階層である PC へと返す役目を持つ。また、ERIC を使用する計算機構成のプロトタイプとして、Bottom Layer LSI を SH4 汎用 LSI とした場合について並列化の性能評価を終えている。

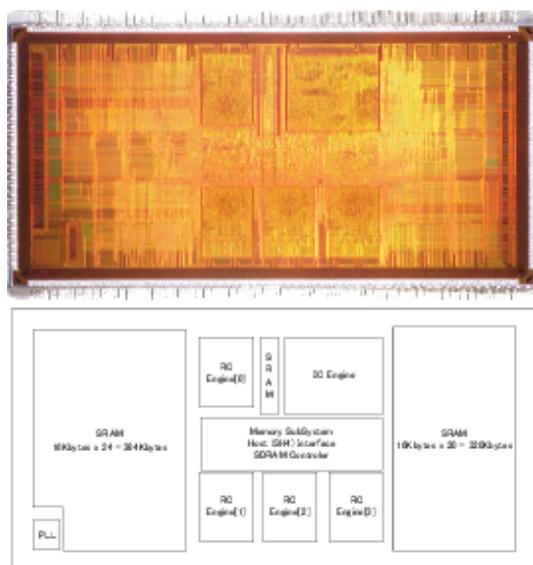


図 1: 2 電子積分専用 LSI (ERIC)

### 【性能見積り】

Bottom Layer の計算 LSI として SH-4 を使用した EHPC プラットフォームのプロトタイプ・システムを使った並列性能評価では、63 プロセッサを使用する 3 ユニット・システムに於いて 62.6 倍の高速化が報告されている。このリニアな速度向上は、階層化構造を持つ EHPC プラットフォームに依るところが大きい。<sup>2</sup>

ERIC LSI 1 チップあたりの消費電力は最大 4.2W であり、56 個の ERIC LSI を搭載したトータルシステムでの全消費電力は 1KW 以下になると予想され、極めて低消費電力なマシンとなっている。また、図 3 がプロトタイプ of 計算機システムの 4 ユニット・システム構成 EHPC 計算機システムの写真であり、この体積は  $1200 \times 650 \times 1010mm$  程度となっている。このことから本並列計算機システムは、電力ならびに体積の観点から小さな研究室でも設置し、維持管理できる規模という当初の要求も満している。ERIC 使用時の性能評価については当日発表する。



図 3: EHPC 専用計算機システム

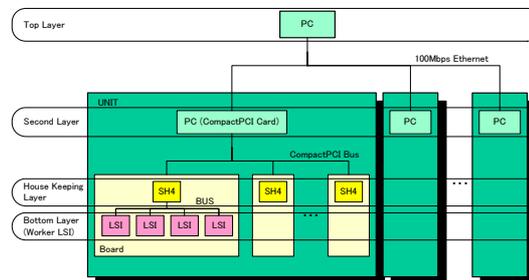


図 2: EHPC プラットフォームアーキテクチャ

<sup>1</sup> H.Honda, T.Yamaki, and S.Obara, *J.Chem.Phys.*, Vol.117, pp.1457-1469, 2002.

<sup>2</sup> H.Umeda, Y.Inadomi, H.Honda and U.Nagashima, 229th ACS National Meeting, Mar. 2005.