

PFLOPS の分子動力学専用計算機 MDGRAPE-3 の開発

～専用計算機開発の 20 年

GSC システム情報生物学研究グループ

高速分子シミュレーション研究チーム

泰地 真弘人

taiji@gsc.riken.jp

理研では 2006 年 6 月に 1PFLOPS の理論ピーク性能をもつ分子動力学計算専用計算機 MDGRAPE-3 の開発に成功した。本システムは分子動力学計算に必要となる力の計算専用 LSI を約 4,800 個集積し、これを PC クラスタに接続することで 1PFLOPS の性能を達成した。これを用いたアミロイド集積過程のシミュレーションで 185TFLOPS の換算実効性能(実際の計算量は 370TFLOPS 相当)を達成し、2006 年 11 月に Gordon Bell Prize Honorable Mention (Peak Performance)を受賞している。

講演では MDGRAPE-3 の詳細、生命科学への応用について述べるとともに、ここに至る専用計算機開発の 20 年を振り返ってみたい。その上で、今後の高性能計算機開発の方向性について議論する予定である。