

二電子積分演算装置の開発

6 D-1

村瀬 匡、小畑 勉、石井 元、高田 俊和(*)

日本電気ソフトウェア、*日本電気 基礎研究所

計算化学分野は、原子分子あるいは固体表面などの多体系の物理化学的性質を、数値計算シミュレーションの手法により、理論的に解析・予測することを目的とする分野である。医薬、高分子化学、素材産業などにおける、分子設計(ドラッグ・デザイン)、蛋白質工学、材料設計などの広範な物理化学分野での理論化学的解析が主な応用分野である。分子軌道計算はこうした解析手法の内、もっとも精度の高い理論的方法の一つとして位置づけられている。

分子軌道法においては、CPU 時間の大半が「F 行列」の計算に消費される。分子軌道法はその基礎方程式として量子力学における Schrodinger 方程式から出発し、最終的には非線形の固有値方程式の問題へ帰着させた方法である。この係数マトリックスを「F 行列」と呼ぶ。F 行列は4つの添え字を持つ「二電子積分(TEI と略す)」を計算し、2つの添え字の行列へ変換して生成される。現在行われている大規模計算での基底関数の数は数千のオーダーである。このとき必要な演算は基底関数の数の4乗に比例することになる。TEI 計算は分子軌道計算全体の演算負荷のほぼ95%を占めるため、TEI 計算をいかに高速に処理するかが大規模分子軌道計算実現への鍵である。以下に代表的な分子の計算例を示す。最小基底を用いた計算においても莫大な演算が必要なことは明らかである。

表 F 行列計算演算量

分子	積分数	F 行列演算数
液晶分子	22M 個	156Gflop
クロロフィル二量体	556M 個	4516Gflop

最も簡単な形の S 軌道のみを含む二電子積分は以下の式で表すことができる

$$[ab,cd] = K_{ab} \cdot K_{cd} \cdot L_{abcd} \cdot F_m(T_{abcd}), \quad F_m(T) = \int_0^1 t^{2m} e^{-Tt^2} dt. \quad \dots\dots(1)$$

ここで、係数「K」は2つの軌道のみであらわされる係数、「L」は4つの軌道指数に依存した量、「Fm(T)」はTを媒介して4つの軌道に依存した、誤差関数に似た初等的に積分不可能な関数である。

係数K等は2添え字の量として表現でき、重複して用いることができるが、LとFm(T)は必ず4添え字が必要である。また、関数Fm(T)何らかの方法で近似が必要である。現在もっともよく用いられる方式は、テイラー展開と分点値テーブルによる内挿方式である。ここで、重複不可能な、4軌道の情報が必要な部分の演算数は30flop程度である。

我々はこの二電子積分演算の高速処理のために、上記(1)式を論理回路化することを試みた。基本アーキテクチャはパイプライン型データフローマシンである。試作には ALTERA 社の CPLD と開発ツールを用いた。浮動小数点形式は IEEE の単精度浮動小数点形式を用いる。このフィールドプログラマブルチップによる装置単体性能の目標を600Mflopsとした。演算器の性能はホストへのバス転送能力により決定される。逆にバスの能力に見合う演算器を作ることが Power/Cost の観点からも必要である。今回はホストマシンであるパーソナルコンピュータのPCIバスを通して、試作装置とデータI/Oを行う。ユーザインターフェイスとしては最終的にはC/C++/FORTRANなどの関数呼び出しで起動できるようにすることを目指している。

本講演では、試作機の設計方針、試作方法、性能および今後の開発について報告する予定である。