

村瀬 匠、小畠 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

医薬、高分子化学、素材産業等における、分子設計、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計算化学領域において、分子軌道計算は種々の解析手法の内、もっとも精度の高い理論的方法の一つである。分子軌道計算に占める CPU 時間の大半が、係数マトリックス「F 行列」と呼ばれる量の生成に費やされる。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。前回の報告(第 57 回全国大会 6D01)で我々はこの二電子積分演算を FPGA を用いて論理回路化したプロトタイプ機の性能について報告した。

我々の考える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。近年汎用 CPU の性能は急速に向上しており、ASIC 技術に関わる分野も例外ではない。専用回路化の利点を生かすには、データが再帰的に演算回路を用いることをできるかぎり回避すべきである。そのためには独立な演算単位の抽出と、そのパイプライン化ならびに並列化がポイントである。さらに演算部を入力データの性質により最適化することも考慮すべきであろう。このような視点から、今回我々は二電子積分演算装置を d 軌道まで拡張することを試みた。

二電子積分処理の計算アルゴリズムは補助関数を用いる方法と Rys 多項式を用いる方法の 2 種類に分類できる(表 1)。

表 1. 二電子積分計算手法の詳細(d 軌道以下を対象)

方式	基本式(*)	積和項数	最小式数
補助積分	VRR	5	70
	LRL, HS	4/4	36/32
Rys 多項式	RDK	3/3	25/1
全方式	HRR	1	5

(*)VRR, HRR : M. Head-Gordon, J. A. Pople, J. Chem. Phys., 89, 5777(1988), LRL:R. Lindh, U. Ryu, and B. Liu,

J. Chem. Phys., 95, 5889(1991), HS:T. P. Hamilton, H. F. Shaefer III, Chem. Phys., 150, 163(1991),

RDK:J. Rys, M. Dupuis and H. F. King, J. Chem. Phys., 4, 154(1983)

表 1 で、LRL, HS の方式は 2 種類の漸化式をもちいるため「/」で分けて記述した。RDK 方式も同様だが、この方式ではカルテシアン座標の 3 方向について分離して漸化式を適用した後に結果を掛け合わせるという手順を踏む。一方の式は漸化式、もう一方は多項式の重みおよびカルテシアン座標の 3 方向の結果を掛け合わせる処理である。「最小式数」とは、再帰的な演算を用いないでデータフローを形成できる、基本式の最小適用回数である。Rys 多項式の場合に適用回数が少ないのは、3 つのカルテシアン座標方向について独立に計算できるからである。回路レベルの並列化でもよいが、パイプライン化の方が最終的な回路規模は小さくなる。この方式は積分生成効率が非常に高く、RDK の漸化式の各段階の積分はすべて HRR 式へ渡されていくことになるため配線領域確保とレイテンシー調整が設計の要である。当日は試作機の設計状況と性能について報告する予定である。