

大規模分子を対象とした非経験的分子軌道計算システムの
開発

3V-5

村瀬 匡^{*}、石井 元^{*}、高田俊和^{**}、花村光泰^{**}、
原田紀夫^{**}

*日本電気ソフトウェア(株)、**日本電気(株)

1. 計算化学の背景

スーパーコンピュータの出現により、数値シミュレーションは科学者や技術者のより強力な道具となりつつある。先端企業の研究活動は、半導体からタンパク質工学に至るまで原子・分子レベルのコントロールが必要なマイクロな領域に立ち入り、実験の困難さが増すと共に、数値シミュレーションに対する期待が高まっている。さらに、実験の代替による研究期間の短縮、経費の削減といった点からもシミュレーションの利用は見逃せないものである。

スーパーコンピュータに代表されるハードウェアの進歩はこうした傾向に拍車をかけており、それに伴い、アプリケーション・ソフトの充実が急務になってきている。

化学関連の分野においても、数値シミュレーションに対する期待は大きく、その中でも分子軌道法、分子動力学が果たす役割は大きい。分子設計あるいはドラッグ・デザインと呼ばれる領域では、すでにいくつかのアプリケーション・ソフトが発表されているが、それらは実験結果の解析をおこなうなど、基本的に実験支援システムが多い。分子軌道法や分子動力学などを用いることができるものもあるが、それらはもっぱらプリ/ポスト・プロセッサであり、数値計算部には既存のプログラムを利用している。数値計算プログラムはQ C P E (Quantum Chemistry Program Exchange) が頒布しているものが最も多く利用されている。

2. 分子軌道法プログラムの開発現状

現在、スーパーコンピュータのベクトル処理能力は数GFLOPSに達している。もっとも、計算化学者達はこのような状況には満足していない。次期スーパーコンピュータはバイラインの並列化などにより数10、あるいはそれ以上のGFLOPSに到達するといわれる。プログラムはこのような状況に追随できるものでなくてはならない。Q C P E に登録されているものも含めて、現存するプログラムのほとんどはスカラー計算機用であり、ベクトル計算機の能力を十分に引き出しているとは言い難い。

さらに、ワークステーションやグラフィックス端末などの高性能化は、ホストコンピュータからその周辺機器への一層の処理分散を可能にし、入出力処理の充実を促している。入出力処理に関して、特にグラフィックス端末は近年著しい発展をしており、その活用が大いに期待されている。また、これら分子構造の表示法については、モレキュラグラフィックスといった言葉も生まれている。問題はいかにしてホストコンピュータとこれら端末をうまく結び付けるかにある。このような将来的な環境の変化に対応できる分子軌道計算システムを構築しようとするのが我々の基本的考え方である。

Developing an ab initio Molecular Orbital System for large molecules
Tadashi MULASE^{*}, Hajime ISHII^{*}, Tosikazu TAKADA^{**}, Mitsuyasu HANAMURA^{**},
Norio HARADA^{**}; *NEC Software, Ltd., **NEC Corporation, Ltd.

このような考え方に立って、NECでは、非経験的分子軌道計算システムをスーパーコンピュータSX-2上で構築することを試みている（プログラム名：AMOSS（ab initio Molecular Orbital System for Supercomputers））。基本構成の概略を図1に示す。AMOSSの開発において、

- 1) 次期スーパーコンピュータにも対応できるようなベクトル化アルゴリズムと、Direct SCF法の採用、
- 2) グラフィック入出力の積極的利用によるユーザーインターフェイスの改善、
- 3) 数値計算と入出力、データベースなどを切り放し、それぞれを独立に管理するプログラムの開発により、ハードウェア分散体制に対応できるシステムの整備、

などを目指している。

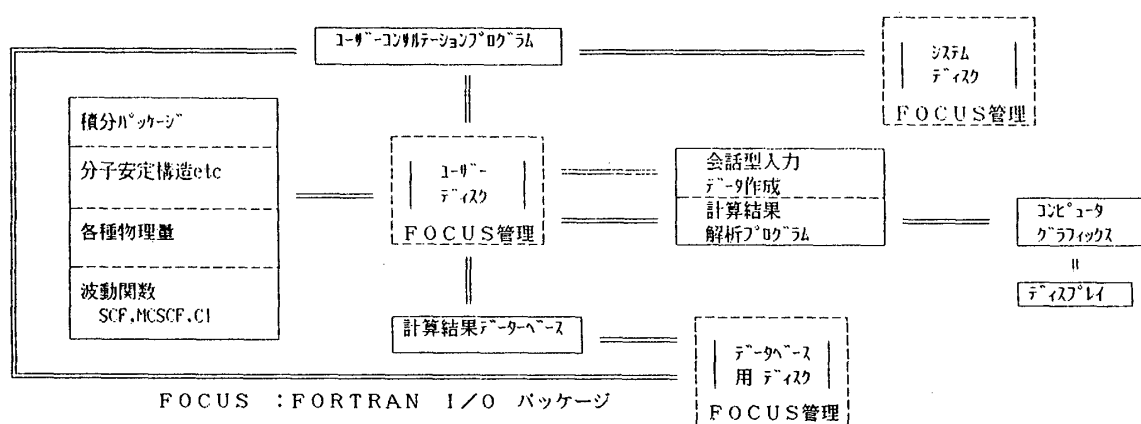


図 1

我々の狙いはいまのところ、中程度の精度の大規模計算にある。その過程で現れる膨大な量の積分は一次記憶媒体に納まらないため、基本的に毎回積分を計算し直す方式（Direct SCF方式）をとっているが、そのためには二電子積分の高速化が要求される。現在のところ、積分パッケージはかなりのベクトル化を達成している。また、Direct SCFの利点として、十分大きな分子であれば、ファイル使用時に比べてElaps timeが少なくすむ事が挙げられる。図2にそのTiming Dataを挙げる。このような計算時間の短縮は研究開発の質的变化をももたらすであろうし、より大きな、数百原子からなる分子の計算といった大規模数値シミュレーションを可能にするであろう。

分子	二電子積分*		S C F loop回数	total cpu(elaps)time (sec.)	
	積分数	cpu time		HXMU 使用時	Direct SCF
ニコチン	610	5.11	18	22.5 (175.4)	111.8 (3331.)
シリコンクラスター	5785	94.7	50	465.4 (1755.)	5040. (12033.)
DOBAMBC	19174	137.1	20	1106. (6238.)	3654. (4775.)

* 積分数単位：メガ個、cpu time単位：second

図 2

参考文献

Supercomputer Workshop report 6 (1988), 分子科学研究所電子計算機センター
村瀬、八尋、高田、分子構造総合討論会 3p14 (1988, 10, 電気通信大学)