

## 平成14年度 情報工学コース卒業研究報告要旨

高木 研究室	氏 名	西部 満
卒業研究題目	多項式近似に基づく誤差関数計算回路	
<p>近年、計算機の発達により機能性材料や医薬の計算機シミュレーションによる設計が進展している。分子シミュレーション手法の中でも非経験的分子軌道計算は、分子個々の物理的科学的性質と分子間相互作用という物質科学の基礎を解析する基盤となるものである。その非経験的分子軌道計算において処理時間の大部分を占めるのが二電子積分内の誤差関数計算である。そのため専用回路による高速化が求められている。</p> <p>誤差関数は離散値である軌道量子数 <math>m</math> と実数 <math>T</math> を入力とする関数であり、これを定義通りに計算する場合計算量が膨大になるため、高速に計算する場合は一般的に積和演算のみで行える多項式近似を用いる。ただし、その場合 <math>m</math> と <math>T</math> の区間ごとに多項式係数が必要となり、従来の区間の取り方と相対誤差の見積もりを用いるとテーブルサイズが非常に大きくなり、ハードウェア化に不向きである。</p> <p>そこで、本研究では Taylor 展開と MiniMax 近似において多項式の次数と <math>T</math> の区間幅の取り方を変化させ、正確に計算した相対誤差を基にテーブルサイズを求め、実用的な速度とサイズの相関関係を明らかにした。さらに、Taylor 展開における係数を共有した場合や誤差関数の漸化式を利用したときのサイズと速度の比較を行なった。それらを基に倍精度で誤差関数の計算を高速に行う専用回路を作成した。具体的には、<math>m</math> を変更する度にテーブル用 1Mbits SRAM を書き換えられるという制約条件のもとに回路の設計を行った。この回路は 200MHz で 30 から 40 クロックのレイテンシで動作する。</p>		