

計算化学サービス

Solution for Computational Chemistry

コンフレックス株式会社
〒160-0004
東京都新宿区四谷4-30
第2テイケイビル2F
TEL: 03-5360-6202
FAX: 03-5360-6203
Email: info@conflex.co.jp
http://www.conflex.co.jp

Conflex USA
12526 High Bluff Drive, Suite 300
San Diego, CA 92130 USA
TEL: +1-760-930-9277
USA: 1-800-298-0054
FAX: +1-509-692-4541
Email: info@conflex.us
http://www.conflex.us

近年、量子化学と電子計算機の急激な発展と普及を背景に、コンピュータシミュレーションによる化学研究の方法、つまり計算化学が、安価で高速で安全な化学の研究方法として広く利用されるようになってきました。

しかし、計算化学のプログラムを使いこなすには、熟練した職人芸的要素が必要とされ、限られた研究時間内で習得し、有効な多くの結果を導き出すことは難しいのが現状です。また、これらのプログラムの使い方や計算結果等の見方は、材料分野や生命科学分野などにおいて異なる検討を必要とします。

計算化学に限らず、計算機上でソフトウェアを走らせれば、なんとなく“数値”は得られます。計算機を使う上で重要なのは、得られた数値の信頼性・妥当性を注意深く吟味しながら、計算結果から（計算化学の場合は化学的に）重要な知見を得ることです。問題の規模や質に対して近似法の向き・不向き、あるいはソフトの得手・不得手もあります。こうした計算の限界や制約を考慮すれば、計算機シミュレーションは（計算化学は化学の）研究開発の有用なツールとなります。反面こういった吟味無しに利用すると手痛いっぺ返しにあうことがあります。

落とし穴の簡単な例をご紹介します。RumpがRound off errorの例として S. M. Rump. Reliability in Computing. The Role of Interval Methods in Scientific Computing. Academic Press, 1988. に紹介したものです。

Round off errorは、日本語では情報落ちとして知られています。計算式は浮動小数点演算が40回程度のもとても簡単なものです。

$$f(x, y) = 333.75y^6 + x^2(11x^2y^2 - y^6 - 121y^4 - 2) + 5.5y^8 + x/(2y)$$

$x = 77617$, $y = 33096$ の時, SUN SPARCstation/SLC・Fortranプログラムで計算すると、

$$\text{(単精度)} \quad f = 6.33825 \times 10^{29}$$

$$\text{(倍精度)} \quad f = 1.1726039400532$$

$$\text{(4倍精度)} \quad f = 1.1726039400531786318588349045201838$$

正しい値は、可変長区間演算を用いて40桁表示すると

$$(-0:827396059946821368141165095479816292005, \\ -0:827396059946821368141165095479816291986) \text{ です。}$$

答えは負の値(-0.83)ですが、計算値は正の値(1.17)です。一般に単精度演算より倍精度演算のほうが精度が高く、倍精度より4倍精度の方が正確ですが、このような背筋が寒くなるような例もあります。確かに計算機で用いられている浮動小数点演算は誤差が大きいです。ただ、たかだか40回程度の浮動小数点演算でこのようなことが起こるとは驚かされます。現在ノートブックPCでも1秒間に1億回以上の演算が可能です。得られた答えの信頼性・妥当性を注意深く吟味するためには、計算対象に対する広い知識と洞察力が必要です。

弊社では、このような計算化学の利用を検討しているが、利用方法が良くわからない入門者の方、とりあえず使ってはいるが、計算中にトラブル等が発生した際に解決できる自信がない企業や大学の研究者の皆様のために、計算化学サービスを提供し、計算化学の習得に協力いたします。

サービス内容

- ・計算エラーに対する解決方法
- ・Input file の修正
- ・最適なパラメーターの設定
- ・構造最適化が振動した場合の解決方法
- ・その他（個別に対応）

