

氏名(本籍)	くろ かわ よし ゆき 黒川義元(長野県)
学位の種類	博士(工学)
学位記番号	博甲第2329号
学位授与年月日	平成12年3月24日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
審査研究科	工学研究科
学位論文題目	並列計算機を用いた量子系の実時間大規模計算
主査	筑波大学教授 理学博士 中尾 憲 司
副査	筑波大学教授 理学博士 小川 泰
副査	筑波大学教授 理学博士 中塚 宏 樹
副査	筑波大学助教授 理学博士 竹 森 直
副査	筑波大学講師 理学博士 佐野 伸 行
副査	筑波大学助教授 理学博士 野 村 晋太郎

論文の内容の要旨

この論文は、近年の計算機、特にスーパーコンピュータの性能向上と計算物理学の進展をふまえて、複雑系の量子力学的シミュレーションのための具体的技法を論じたものである。実際には AP1000 と VPP500/700 という性格の異なった並列計算機を用いて、それぞれの計算機の特徴に合った2つの異なる計算を行ない、それぞれの場合に有効な計算技術やアルゴリズムを提案・開発・検証している。

前半では、多数の演算器が並列して互いに高速通信回路で結ばれた超並列計算機 AP1000 を用いて、半導体中に励起されたキャリアの過渡的キャリア・ダイナミックスの完全に量子力学的な計算を行なっている。計算機のアーキテクチャーを生かして、実時間非平衡グリーン関数法の定式化にのっとり計算アルゴリズムを採用し、それにより、電子間クーロン反発力を乱雑位相近似で彩り入れた計算を行なっている。この際に特別に新しい計算法を工夫することによって、乱雑位相近似以上の近似の入らない計算を実現している。その結果、キャリアの状態の時間変化によるキャリア状態の時間発展への反作用を完全に量子力学的に彩り入れた計算となっており、このような計算は世界でも未だ例がないものと思われる。またさらに、その計算技法を用いて具体的に物理量を計算して見せることにより、キャリアー励起の高速スイッチングやフォトン・エコーといった、実験と比較し得る結果を出せることを示している。

後半ではベクトル並列型スーパーコンピュータ VPP500/700 を用いて、大きな系の非線形応答関数を効果的に量子力学計算するアルゴリズムの提案を行なっている。ここで用いている基本的技法は、必要となる計算資源が対象とする系の規模に比較するオーダーN法の一つである実時間実空間高次差分法で、シュレーディンガー方程式による電子波動関数の時間発展を数値的に解くというものである。この手法は既に線形応答関数の計算に使われていたものであるが、ここで著者はこの手法を拡張することによって、非線形応答関数スペクトルを効果的に計算するアルゴリズムを提案している。具体的には、中間状態としてランダムベクトルを用いることによって、高次非線形応答関数の計算の際に必要な高次元の時間積分を事実上1次元の積分で置き換えることが出来るというものである。これによって、高次の非線形応答関数を指定されたエネルギー精度で計算するための計算量は、系の大きさおよびエネルギー精度の逆数に比例するだけとなり、計算時間が大幅に節約される。この効果は、エ

エネルギー精度が上がるほど、また、非線形次数が高いほど、顕著になることを、実際の計算時間を測定することによって実証している。また、具体例としてシリコン結晶の2光子吸収係数スペクトルを求めて、現存の計算設備でも現実的な系の計算に十分応用しうるアルゴリズムであることを実証している。

なお、付録において、大きな系の線形応答関数の計算例として、カーボン微結晶およびポリシランの光学吸収スペクトルの計算をも報告している。

審 査 の 結 果 の 要 旨

計算のためのモデルの選択や定式化、また計算結果の吟味の点で実際の物理現象との関連付けの部分に改善の余地を残すものの、再先端の計算設備を駆使した計算技術の開発という観点からは、計算機アーキテクチャー、計算アルゴリズムなどの様々な角度から独自の工夫を凝らしており、現在激しい勢いで進展を見せている計算物理の手法開発という意味では、その意義は十分評価に値する。

よって、著者は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。