

早稲田大学大学院 先進理工学研究科

博士論文審査報告書

論文題目

Acceleration of Divide-and-Conquer Based
Electronic Structure Calculations
for Large Molecule Systems

分割統治法を用いた
大規模電子状態計算の高速化

申請者

Takeshi	YOSHIKAWA
吉川	武司

化学・生命化学専攻 電子状態理論研究

2015年2月

本報告書は、申請者（吉川武司）がまとめた博士論文に対して審査員（中井浩巳（主査）、古川行夫（副査）、井村考平（副査））が行った審査について記す。

博士論文審査の申請は、2014年11月6日開催の化学・生命化学専攻教室会議（以下、教室会議）の議を経て、2014年12月18日開催の先進理工学研究科運営委員会で受理された。教室会議では、申請者が提出した博士論文概要書（以下、概要書）をもとに指導教授の中井から内容の説明がなされた。概要書では、博士論文は英文題目“Acceleration of Divide-and-Conquer Based Electronic Structure Calculations for Large Molecule Systems”のもと3部構成、全10章でまとめられる方針が示された。また、主要な研究業績は、査読付き学術論文9報（未発表論文4報を含む）として発表することが示された。

博士論文の草稿は、申請者から2015年1月7日に審査員に提出された。約20日の審査期間には、改訂のための指導が行われた。主な改訂の内容は以下の通りである。まず、論文投稿に至らなかったため、第6章と第10章に報告されている理論とアルゴリズムの開発について、本博士論文から削除するよう指示した。各章における議論等の不明瞭・不十分な点について、修正するよう指示した。これらの指導のもと修正がなされ、最終稿では3部構成、全8章でまとめられた。また、主要な研究業績は、既報の査読付き学術論文5報となった。博士論文の最終稿は、申請者から2015年1月30日に審査員に提出された。

博士論文公聴会（以下、公聴会）は、2015年1月26日14時より開催された。申請者による博士論文の内容に関する発表がおおよそ40分、その後、審査員及び一般聴講者からの質疑応答が20分程度行われた。主要な議論について、具体的な内容を以下にまとめる。

まず、非局所励起状態について議論された。非局所励起とは、系全体に非局在化した軌道間の励起や電子移動型の励起のことである。そのため、分割型の大規模理論では、部分系をまたがる励起状態に対応し、取り扱いが困難となる。本研究では、分割統治(DC)型分極率計算を利用することにより、この困難を克服している。実際、プッシュプル型ポリエンにおける非局所励起に対して、従来法の励起エネルギーを高精度に再現し、かつ、計算効率が向上している。

次に、並列演算機である Graphic Processing Unit (GPU)の適用・拡張について議論された。数千原子を超える大規模系の電子状態計算は、大規模計算理論を用いても非常に長くの計算時間が必要である。そこで、GPUなどの並列演算機を高効率に利用する必要がある。本研究では、完全性条件を用いた近似(RI近似)を適用することで演算量を減らし、更なる高速化が図られている。すなわち、DC法、RI近似とGPUの三つの技術を融合させることにより、計算時間を大幅に短縮している。また、今後のコンピュータシュミレーション

ンの分野において、GPU等の並列演算機の利用がますます拡大することが予想されて、本研究の重要性が高まる。

DC型自己無撞着場(SCF)計算における共通のFermi準位と電子状態の関係について議論された。本研究では、並列化効率を向上させるために共通のFermi準位をSCF計算の途中で固定して計算を行っている。これは、電子状態の収束よりも共通のFermi準位決定のほうが速いというDC-SCF計算の性質を利用している。

最後に、博士論文では高精度化がキーワードとなっているが、大規模電子状態計算法の今後の発展において高精度化がなぜ重要であるかを質問し、以下の返答を得た。本研究では、高精度化という言葉が二通りの意味で使用した。大規模電子状態計算は、従来法に近似を導入して高速化を達成している。一つ目の意味は、従来法を高精度に再現することが重要であるということである。二つ目は、そもそも電子状態計算は、モデル化や近似が導入されているので、現実の現象に対して予言能を有するためには、高精度化が必須であるということである。今後は、本研究で開発した種々の理論的手法を簡便に扱えるようブラックボックス化することで、量子化学者だけでなく、実験科学者も高精度・大規模電子状態計算を実行できるようになると考える。以上の通り、公聴会における議論を通して、申請者の学識に関しても確認できた。

博士論文の学術的な成果を以下に総括する。本論文では、大規模計算理論であるDC法の理論拡充とその並列化が試みられた。本論文の主題であるスピン間の相互作用や励起現象は、有機トランジスタ、太陽電池や有機エレクトロミネッセンス等の機能性材料の性能に深く関与している。よって、今回開発された大規模開殻系計算手法と大規模励起状態計算手法は、材料設計や性能評価に非常に有効であると思われる。また、本論文で示されたGPUを用いた並列化技術は量子化学計算の分野に留まらず、科学技術計算全体に対して大きな指針となると思われる。

よって、本論文を博士(理学)の学位論文に値すると認める。

2015年2月

審査員 主査 早稲田大学理工学術院教授 博士(工学)(京都大学) 中井浩巳
副査 早稲田大学理工学術院教授 理学博士 (東京大学) 古川行夫
副査 早稲田大学理工学術院教授 博士(工学)(大阪大学) 井村考平