





豊橋技術科学大学長 殿

平成 22年 5月 31日

審査委員長 角田 範義 

論文審査及び最終試験の結果報告書

このことについて、下記の結果を得ましたので報告いたします。

学位申請者	濱田信次	学籍番号	第 045704 号
申請学位	博士(工学)	専攻名	機能材料工学
論文題目	ウェーブレットを用いた時間発展方程式の解法とその化学への応用		
公開審査会の日	平成 22年 5月 13日		
論文審査の期間	平成22年4月15日~平成 22年 5月 13日	論文審査の結果	合格
最終試験の日	平成 22年 5月 13日	最終試験の結果	合格
論文内容の要旨	<p>マルチウェーブレット (MW) を用いて電子系の基本方程式時間依存シュレーディンガー方程式 (TDSE), 時間依存ハートリーフォック方程式 (TDHF)、時間依存密度汎関数法 (TDDFT) を解く方法を考案した。ユニタリーな時間発展を行える Cayley 形式を導入し、安定に効率よく解法が得られた。一般にウェーブレットは音声 (1次元) や画像 (2次元) など低次元信号処理にしか応用されていないが、本研究では物理空間を表現するために3次元へ拡張した。そこで計算資源 (メモリー、計算速度) などの問題を解決するため、高速言語対応のプログラム開発を行った。また本手法を核と電子を同時に時間発展させる Ehrenfest dynamics に拡張し簡単な電子-核の衝突、解離運動などのシミュレーションを行った。更に多電子系への拡張のため流体力学の基本方程式である Navier Stokes (NS) 方程式に同方法を適用し、安定な解が得られた。TDSEの流体力学表現では流体力学方程式に量子項が現れるが、それを含めた流体力学表現でのTDSEに上記の方法を応用したが安定な解が得られなかったため、無限回微分可能な Meyer ウェーブレット (MM) を導入し、安定な解を得ることができた。最後に空間局在性がよいMWと時間発展に安定な解を与えるMMの高速変換法を考案、適所に応用することにより全体として効率的な計算を行う方法を開発した。</p>		
審査結果の要旨	<p>ウェーブレット基底関数による量子方程式の解法の例は少なく時間依存量子方程式への応用はなかったが、本研究でははじめて量子時間発展方程式に Cayley 形式とマルチウェーブレット基底を導入し、安定に効率よく時間依存方程式を解くことができた。本手法はかなりの計算資源 (メモリー・計算時間) を要求するが、本研究では高速言語対応の Cython を使い、高速性と開発発展性の両面を備えたプログラム実装を行っている。化学的直感にもとづいたガウシアン基底関数法は長い歴史があり、商業プログラムも多く存在するが、超並列、大規模メモリーを想定した次世代量子シミュレーションではウェーブレットを用いたロバストな本方法が優位に立つ可能性が高く、その意味で本研究の先駆的意義は大きい。また、多電子系への拡張をねらい量子方程式と等価な流体力学表現の時間発展方程式の解法を開拓した。こうした試みは稀であるが、凝縮系や巨大分子計算への応用の道を開ききっかけとなるため重要である。したがって本研究は理論、計算機実装の両面から優れたものと考えられる。本論文の成果は2報の国際学会誌と3報の国際学会プロシーディングスに発表された。以上により本論文は博士 (工学) の学位論文に相当するものと判断した。</p>		
審査委員	<p>関野 秀男  角田 範義  後藤 仁志  章 忠  印 印</p>		

(注) 論文審査の結果及び最終試験の結果は「合格」又は「不合格」の評語で記入すること。