

機能材料工学専攻		学籍番号	045704	指導 教員	関野 秀男教授 後藤 仁志 准教授
申請者 氏名	濱田 信次				

## 論文要旨 (博士)

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
------	--------------------------------

(要旨 1,200字程度)

1920年代に量子力学が確立し、原子核と電子から構成される物質を扱う“化学”の問題は基本方程式レベルではすべて理論的に解明されたと言える。しかしながら、現実の系は膨大な数の原子核と電子から成り、何等かの近似なくしてはその基本方程式を解くことは不可能である。計算化学の歴史はこの近似理論の開発と効率的な計算アルゴリズムの開発の歴史であるといえる。

本研究では、この膨大な計算化学の分野のうち、「wavelet 表現」と「時間発展方程式」という2つの分野との共通部分に焦点を絞って、それらの計算化学への応用のための要素技術の検討を行った。特に、近年の計算機能力の向上はめざましく、特殊な技巧に走るより、シンプルでシステマティックな技術の方が将来性があると思われる。その意味でも「任意関数を任意精度で展開可能な wavelet 技術」や「時間発展方程式をロバストに解くシミュレーション技術」はこの流れに合致していると考えられる。

本研究ではウェーブレットとして、空間局所性に優れたマルチウェーブレットを用いて、まず電子系についての基本方程式である時間依存 Schrödinger 方程式(TDSE)、時間依存 Hartree-Fock 方程式(TDHF)、時間依存コーン・シャム方程式(TDKS)を安定に効率的に解く方法を考案した。解の安定性を保証する手法としてはユニタリー時間発展法である Cayley 形式と鈴木 Trotter 分解とを併用する方法を用いた。多次元で局所的な解像度変化に対応させつつ Cayley 形式を効率的に取り扱うために、直積基底またはその部分集合を用意し、軸ごとに Cayley 演算子を作用させる方法を考案した。さらに、この手法を核と電子の混合ダイナミクスである Ehrenfest ダイナミクスに拡張、衝突シミュレーション等に適用し、効率よく計算できることを検証した。また、このユニタリー時間発展法を流体系についての、移流方程式、Navier-Stokes 方程式等に対しても拡張、とくに速度ベクトル展開法を提案し、その有効性を確認した。TDSE は Navie-Stokes 方程式と等価変換でき、後者の形式に変換することにより、量子系に対しても数値計算的観点、物理的観点からもいくつかの新しい視点を与えてくれる。しかしながら、不連続 wavelet である Multiwavelet を用いると、流体力学形 TDSE に現れる量子ポテンシャル計算がその空間2階微分表現を含むため不安定になってしまう。無限回微分可能な Meyer wavelet を使うと、この問題を回避できる一方、他(積演算など)の演算の効率が低下する。本研究では Multiwavelet と Meyer wavelet の高速変換技法を開発し、状況に応じて最適な wavelet を動的に切り替える技術への道を開くことを可能とした。