

審査の結果の要旨

氏名 椎原良典

本研究は 1000 原子規模の金属ナノ界面・欠陥近傍の電子論的評価を可能とする第一原理計算法の確立を目的として、そのアルゴリズムに関する検討を行ったものである。既往の手法としては平面波法や実空間法があるが、並列適性、ロバスト性の面で長短があり、大規模金属系への適用は至難であった。本研究では、その解決としてバンド・バイ・バンド有限要素法を提案し、平面波法で発展した高度な前処理法を実空間上で再構築することによって、高並列・ロバストな第一原理計算手法を実現した。

第 1 章序論では本研究の目的と意義および本論文の構成を示している。機能性界面の物性評価を具体例として挙げ、既往の原子シミュレーション手法との比較を通して、高精度原子シミュレーションを可能とする大規模電子構造計算の重要性について述べている。大規模電子構造計算を目的とした先行研究を列挙し、そのいずれもが金属系への適用性を欠いていることを指摘し、大規模金属系の電子構造計算手法を確立することの意義を明らかにしている。その手段として、筆者はバンド・バイ・バンド計算法の実空間化を提示し、バンド・バイ・バンド計算法の実空間化において必要な線形固有値問題の並列化および非線形問題の実空間化を本研究の目的として定めた。

第 2 章密度汎関数法の理論では金属系大規模第一原理計算を実現する手段としてのバンド・バイ・バンド有限要素法の妥当性について述べている。前半においては密度汎関数法の定式および解法に関する知見、および既往の手法の問題点についてまとめ、金属系の安定解法としてのバンド・バイ・バンド計算法の優位性について述べている。また、有限要素法の大規模系への高適性を示すために、平面波法の並列化手法であるバンド並列化と実空間法の並列化手法である領域分割法を対比している。後半においては、本研究が求解プロセスであるバンド・バイ・バンド計算法に着目した研究であることを強調し、計算高速化を目的としてきた既往の実空間法との差異から本研究の位置付けを明らかにしている。

第 3 章有限要素離散化密度汎関数法では密度汎関数法の有限要素定式化を行った。ノルム保存型擬ポテンシャル法の有限要素法による離散化の過程を示し、その結果である有限要素離散化 Kohn-Sham 方程式を示した。また、周期境界条件下における局所擬ポテンシャルの有限要素メッシュ上における評価法について検討した。 Si_2 の自由エネルギー評価を行い、汎用第一原理計算ソフトによる結果との比較を通してその精度を検証した。

第 4 章並列化バンド・バイ・バンド計算では実空間バンド・バイ・バンド計算法における線形固有値解法の領域分割並列化前処理法について検討した。線形固有値問題としては BKL 法および RMM-DIIS 法を採用し、前処理法は Gan らの手法を用いている。本研究で

は Gan らの前処理法の高高速化法について検討を行い、誤差モードの関係から前処理方程式が反復法によって高速に解かれると推論した。その結果、ここで用いられる収束条件パラメータ δ が、計算速度および並列効率を左右することを示した。シリコン 64 個からなるダイヤモンド結晶および酸素分子の計算において適当な収束条件パラメータ δ を設定することにより、RMM-DIIS1 ステップにおいて 16CPU の並列計算で 80% 程度の高並列効率を実現されることを示した。

第 5 章実空間収束安定アルゴリズムでは非線形安定計算法の構築を行った。本研究では、実空間 Kerker 法に基づく収束安定前処理法を新たに提案した。Pulay-Kerker 法の核となる実空間 Kerker 前処理行列と逆空間 Kerker 前処理行列を比較し、両者が一致することを計算によって確認した。構築した実空間非線形解法をシリコン 64 個からなるダイヤモンドの系、およびアルミニウム 108 個からなる fcc 結晶の系のそれぞれに適用し、半導体および金属において収束安定に解が得られることを確認した。また、108 個から 324 個までのアルミニウム fcc 結晶の計算をとおして、原子数百個程度の大規模金属系においてもロバストな実空間計算が可能であることを確認した。

第 6 章結論では本論文の総括と提案した計算法の発展可能性を論じている。本論文の要点は第 3 章で構築した領域分割前処理法による並列高速解法と第 4 章で構築した実空間 Kerker 前処理法の 2 点である。最後に計算量の概算を行い、1400 原子規模の金属系大規模計算が本手法を拡張することによって現実的な時間内で実行できると推測した。

以上を要約するに、本研究の成果である有限要素バンド・バイ・バンド計算法によって、大規模金属系第一原理計算の実現に大きく前進し、この点において本論文の工学的意義が認められ、よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。