

氏名	岸本 篤也
授与した学位	博士
専攻分野の名称	工学
学位授与番号	博甲第2239号
学位授与の日付	平成13年 3月25日
学位授与の要件	自然科学研究科知能開発科学専攻 (学位規則第4条第1項該当)
学位論文の題目	Large-Scale Molecular Dynamics Simulation of Coulomb and Coulomb-Like Systems (クーロンおよびクーロン類似系の大規模分子動力学シミュレーション)
論文審査委員	教授 東辻浩夫 教授 加川幸雄 教授 奈良重俊

学位論文内容の要旨

半導体技術の急速な進展は計算機の性能を著しく向上させ、さらに並列計算機の出現により、これまで不可能であった規模の計算機シミュレーションが可能になってきている。本論文は大規模な分子動力学シミュレーションを行うことにより、クーロンおよびクーロン類似系(湯川系)である3つの系について研究したものである。

湯川系は粒子間の相互作用が湯川ポテンシャルによって記述される多数の粒子からなる系である。湯川ポテンシャルは2つのパラメータ(電荷、遮蔽長)を持ち、遮蔽長を変化させて長距離力(クーロン力)から短距離力まで力の範囲を広く連続的に変化できる。したがって、湯川系は相の安定性や拡散のような熱力学的、動力学的な特性へのポテンシャルの形の影響を調べるのに有用であり、長い間研究されてきた。

分子動力学法は多数の粒子からなる系の性質を調べる統計力学的なシミュレーションの方法の一つである。粒子の運動は運動方程式によって記述され、運動方程式を数値的に積分することによって粒子の位置・運動量空間における軌道を求めることができ、粒子系の静的な性質だけでなく動的な性質も調べることができる。湯川系の分子動力学シミュレーションの実行時間のほとんどは力の計算によるものであり、遮蔽長が大きい場合には単純な方法では粒子数の2乗に比例して増加するため大きな系のシミュレーションは不可能である。そのため、計算量を減少させる様々な方法が開発されている。

本論文では、無限系に対してはエバルト法を用い、有限系に対しては計算量が粒子数に比例する方法である高速多重極展開法を用い、さらに、並列計算機用のコードを開発することによって、湯川系の大規模なシミュレーションを可能にした。

対象として半導体プラズマプロセスにおけるダストプラズマ、ペニングトラップ中のイオン系、ペニングトラップ中の電子・反陽子系の分子動力学シミュレーションを行い多くの有用な結果を得た。

論文審査結果の要旨

半導体技術の進歩による計算機の性能の向上および並列計算技術の発展により、従来は不可能であった規模の原子・分子レベルの計算機シミュレーションが可能になってきており、計算機シミュレーションは理論、実験とならぶ研究手段となりつつある。しかし、電荷をもつ粒子が主要な役割を担う系の場合には、電荷の間のクーロン相互作用が長距離におよぶことが大規模なシミュレーションを未だ困難なものにしている。本論文は相互作用の到達距離をパラメータとして含み、クーロン相互作用を一つの極限としても湯川型の相互作用をもつ粒子の系を具体的な対象として、この困難の解決法とそれらを応用して得られる結果を論じたものである。

計算機シミュレーションの方法の中で、静的な特性とともに動的な特性も求め得る、非熱平衡状態も扱えるなどの点で、分子動力学法は有用である。分子動力学法では運動方程式によって記述される粒子の運動を数値的に積分して粒子の位置・運動量空間における軌跡を求めるが、シミュレーションの実行時間のほとんどは力の計算に費やされる。クーロン相互作用の場合、力の計算の計算量は単純な方法では系に含まれる粒子数の2乗に比例して増加するため、このままでは大規模な系のシミュレーションは事実上不可能である。

本論文では、まず、周期境界条件を満たし、無限系を模擬する系に対して、実空間とフーリエ空間の相補性を利用したエバルト法を適用した。つぎに、有限な系に対して、高速多重極展開法を適用した。高速多重極展開法は遠方の粒子の寄与を多重極で表し、座標についてのテイラー展開と組み合わせて、計算量を粒子数に比例させる方法である。さらに、並列計算機用のコードを開発して、使用するCPUの数にほぼ比例する高速化を実現した。具体的な対象として、半導体プロセスにおいて現れる微粒子集団の構造形成、イオントラップ中の低温のイオン群の構造の緩和、および、反物質生成実験に用いるために反陽子ビームを電子冷却するときの反陽子群の振る舞いの解析を行った。これらの結果はそれぞれ、実験と対応させてパラメータを推定する、構造転移パラメータの理解に役立つ、国際チームによる実験の計画に利用できるなど、意義の大きなものである。

上記のように、本論文は電荷をもつ系および類似系の分子動力学シミュレーションについて、大規模化を可能にする方法に基づく計算コードを開発し、興味ある対象に具体的に適用して有用な結果を得ている。これらは数値シミュレーションの応用の観点から工学的に重要な寄与であり、学術上の貢献も大である。したがって、本論文は博士(工学)の学位に値するものと判定する。