



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Development of Automated Error Control Scheme Based on Divide-and-Conquer Method for Large-Scale Quantum Chemical Calculation [an abstract of dissertation and a summary of dissertation review]
Author(s)	藤森, 俊和
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(理学)
Dissertation Number	甲第14462号
Issue Date	2021-03-25
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/81407
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Type	doctoral thesis
File Information	FUJIMORI_Toshikazu_review.pdf, 審査の要旨



学 位 論 文 審 査 の 要 旨

博士の専攻分野の名称 博士（理学） 氏名 藤森 俊和

審査担当者	主査	教授	長谷川 淳也
	副査	教授	武次 徹也
	副査	教授	前田 理
	副査	准教授	佐藤 信一郎
	副査	准教授	小林 正人

学 位 論 文 題 名

Development of Automated Error Control Scheme Based on Divide-and-Conquer Method for Large-Scale Quantum Chemical Calculation
(大規模量子化学計算に対する分割統治法に基づいた誤差自動制御スキームの開発)

近年の計算機の性能向上にも拘らず、電子状態計算にかかる時間は系の大きさに対して急激に増加するため、タンパク質など大規模系の計算は制限される。分割統治法は、全体を部分系に分けて電子状態を解き、その結果を統括して全体系の電子状態を構築する手法である。しかし、分割統治法の精度と計算時間に重大な影響を与えるバッファ領域を適切に決定するためには、十分な事前評価が必要であった。本学位論文は、分割統治法によるエネルギー誤差を事前推定して適切なバッファ領域の大きさを決定する手法を開発し、エネルギー誤差を制御しつつ計算時間をできるだけ短縮する自動的手法の確立を目的とした研究を展開している。

第一章は general introduction で研究背景と意義を述べている。

第二章では、本学位論文に対する理論的背景を説明し、とくに分割統治法を含めたいくつかのフラグメント型電子状態計算手法について解説している。

第三章では、ハートリー＝フォック法や密度汎関数理論などの繰り返し型の自己無撞着場計算に対する分割統治法への自動誤差制御手法の開発が述べられている。最初に階層型バッファ領域を導入し、階層間の密度行列変化を用いて原子当たりの 1 次のエネルギー変化を見積もる式を導出している。見積もった原子のエネルギー変化を基準としてバッファ領域を繰り返し計算の過程で拡大していくことで、適切な大きさのバッファ領域を自動的に構築する手法の開発を行っている。水クラスターやタンパク質への適用を通して手法の有効性を確認している。また、このような自動化を行った上でも線形スケーリングの計算時間が達成されていることも示している。

第四章では、自動誤差制御手法を電子相関を含んで自己無撞着場計算よりも高い精度を持つ 2 次メラー＝プレセット摂動 (MP2) 法に対する分割統治法へと拡張している。ここでは、原子軌道基底のラプラス変換 MP2 法の考え方を適用し、バッファ領域に存在する各原子が部分系の電子相関エネルギーに与える寄与を見積もる式を導出している。MP2 法に対しても、適切な大きさのバッファ領域を決定する手法を開発することに成功し、また線形スケーリングの計算時間が達成されていることも示している。

第五章では、分割統治法に基づく自己無撞着場計算に対して、構造最適化計算などで必要になるエネルギー勾配の誤差を自動的に制御する手法の開発に向けた検討を行っている。エネルギー勾配で新たに生じるプライ項に対してエネルギー勾配誤差を見積もる式を導出して計算プログラムを開発し、 α ヘリックス型グリシンオリゴマーに適用することによって推定エネルギー勾配の誤差の挙動について知見を得ており、構造最適化や動力学計算に向け有用な手法となる展望を述べている。

第六章では、本研究によって得られた知見をまとめ、今後の展望・課題について述べている。

これを要するに、著者は分割統治法における誤差の自動制御手法を開発し、分割統治計算に必要なであった事前評価をなくして大規模系の電子状態計算や反応解析を手軽に行うことを可能としており、化学分野の発展に貢献するところ大なるものがある。

よって著者は、北海道大学博士（理学）の学位を授与される資格あるものと認める。