コンピュータ実験科学研究部門

Computer Assisted Science Division

1 部門スタッフ

教授　小田中紳二

略歴:1978年3月京都大学工学部数理工学科卒業、1980年3月京都大学大学院工学研究科博士前期課程数理工学専攻修了。同年4月松下電器産業株式会社入社、同半導体研究センターを経て、1997年4月松下電子工業株式会社プロセス開発センター室長、2000年4月より、大阪大学サイバーメディアセンターコンピュータ実験科学研究部門教授。大阪大学大学院情報科学研究科、理学研究科兼任。IEEE(Fellow)、電子情報通信学会、応用物理学会各会員。工学博士（京都大学）

助教授　降旗大介

略歴：1990 年 3 月東京大学工学部物理工学科卒業、1992 年 3 月東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻修士課程修了。同年 4 月東京大学工学部物理工学科助手を経て、1997 年 4 月より京都大学数理解析研究所助手、2001 年 4 月より大阪大学サイバーメディアセンターコンピュータ実験科学部門講師。2002 年 4 月より同部門助教授。大阪大学大学院情報科学研究科、理学研究科兼任。日本数学会、日本応用数理学会各会員。

2 教育および教育支援業績

本年度は、以下の学内講義を担当した。この中で、WebCT や計算機を利用した科学技術計算教育を進めている。本年度は理学部共通科目において、サイバーメディアセンターと理学部とが協力して、数値計算法基礎を開講している。

１．共通教育・情報教育科目
サイバーサイエンスの世界　(降旗)
数学 B（降旗）
解析学 B（降旗）

２．理学部専門科目
数値計算法基礎　（理学部共通、小田中）
応用数理学 7　（数学科、降旗）
数学研究 B　（数学科、小田中、降旗）
数学概観（降旗）

３．大学院理学研究科科目
実験数学特論 I（数学専攻、小田中）
応用数理学特論 I　（数学専攻、　降旗）

４．大学院情報科学研究科科目
コンピュータ実験数学（情報基礎数学専攻、小田中）
計算数学基礎 I　（情報基礎数学専攻、降旗）

3 研究概要

地球環境、情報、生命、ナノテクノロジーなどの科学技術分野において､様々な数理モデルが展開し、コンピュータシミュレーションを通して、その理解を深め、新たな知見を得る試みが大きく進展している。このため、数学的に基礎付けられた計算モデルの構築や数学的手法によるモデル階層を明らかにすることが益々重要になっている。また、このような過程は、新たな数学モデルを構成し、数学・数値解析と共に数値計算手法やアルゴリズムを構築する機会でもあり、いわゆる“応用数学”を発展させる機会でもある。

コンピュータ実験科学研究部門は、非線形偏微分方程式に基づく数理モデルや計算モデルの構成を中心にして、コンピュータシミュレーションの理論的基礎を築く計算数学・数値解析の研究、その応用として大規模コンピュータシミュレーション技術に関する研究を体系的に進めている研究部門である。

現在の主な研究テーマは、半導体輸送の数理モデ

ルに関する研究、量子流体方程式の数値解析・数値スキームに関する研究、半導体シミュレーション手法とその応用に関する研究、偏微分方程式の保存・散逸則を再現する数値計算法に関する研究、変分原理に基づく蛇行流問題の数理モデルに関する研究、数値計算法の安定性を生かした数理アルゴリズムの開発である。

4 2006 年度研究業績

4.1 量子流体方程式の数値解析に関する研究

半導体における量子流体方程式は、非線形 Schrodinger 方程式の流体表現として導出される。非線形 Schrodinger 方程式を Wigner-Wyle 変換によって求められた Wigner-Boltzmann 方程式を Chapman-Enskog 展開し、流体方程式へのモーメントをとることによって、階層的モデル構造を有する量子流体方程式が導出される。

量子ドリフト-拡散モデルは、量子流体方程式の階層において、もっとも基本的であり、量子閉じ込め電子輸送やトンネル電流の挙動を記述するのに適した重要なモデルである。このモデルは、数学的には、静電場を記述する非線形 Poisson 方程式と 4 階偏微分方程式からなる保存則とからなる方程式系として捉えることができる。MOSFET 構造の定常状態を解析する場合、電極においては熱平衡であり、電荷中性条件を満たす境界条件を設定し、非線形楕円型方程式系からなる混合境界値問題として定常な輸送現象を数学的にモデル化できる。

有界領域における量子ドリフト-拡散方程式の多次元境界値問題において、解写像を構成して、解の一様有界性をアプリオリ評価し、その弱解の存在と微小バイアス下における解写像の縮小性を証明した。構成した解写像を基に、キャリア密度の正値性を保証した量子ドリフト-拡散方程式系の新たな数値反復解法アルゴリズムを構成した。

4.2 量子ドリフト-拡散方程式の計算スキームに関する研究

4.2.1 時間離散化: Lyapunov 性

非定常状態における量子ドリフト-拡散方程式系はエントロピー散逸系である。時間離散化に対して Implicit スキームを適用し、境界が熱平衡状態にある場合、この半離散化フォームはエントロピー散逸性（自由エネルギーの Lyapunov 性）を示す。また、系全体の自由エネルギーを用いることによって適応型時間ステップアルゴリズムの開発も進めている。

4.2.2 空間離散化：高精度スキームの構成

4 階量子ドリフト-拡散方程式の混合境界値問題に対し、非線形 2 階 Sturm-Liouville 型方程式と化学ポテンシャルに対する 2 階連続方程式に分離し、離散化する手法を新たに開発した。

非線形 2 階 Sturm-Liouville 型方程式の離散化に対しては、 Tikhonov-Samarskii タイプの保存スキームに、Exponential-fitting 法を適用して電子密度計算の高精度化をはかった非線形スキームを開発した。この数値スキームは、古典的ドリフト-拡散方程式に対して開発された Scharfette- Gummel スキームの一般化自己共役型境界値問題に対する拡張になっている。このため、多次元差分スキームの構成には、有限体積法の適用も可能である。

4.2.3 空間離散化：高解像度スキームの構成

ナノ領域ＦＥＴなどにおける量子閉じ込め輸送をシミュレーションするためには、量子境界層の電子分布を精度よく計算する必要がある。この場合、界面において電子密度がゼロになる境界条件は Boltzmann 統計と整合しない。このため、量子境界層では Exponential-fitting 法を適用して電子密度計算の高精度化を図ったスキームよりも低精度スキームが有効であることを明らかにした。一方、界面から離れたチャネル内においては、電子密度は滑らかな分布を有し、高精度スキームが有効である。この性質を基に、一般の流体モデルにおけるショック波を高解像度に再現する数値スキームの概念、すなわち

Slope-limiter 法を Exponential-fitting 法において展開し、低精度と高精度な非線形差分スキームから高解像度スキームを新たに構成することに成功した。この手法は、流体モデルの場合と同様に、Flux-limiter 法であることも示せる。この数値スキームは MOSFET における量子閉じ込め輸送シミュレーションに効果的であり、高解像度シミュレーションを実現することを数値実験で検証した。

4.3 偏微分方程式の保存･散逸則を再現する数値計算法に関する研究

応用数理学、社会学、生命学等の様々な研究分野におけるこれまでの研究の結果、非線型性の本質的な重要性が認識されつつある。こうした中、コンピュータ実験科学部門では複雑な現象を記述する非線形高階偏微分方程式の非線型性を本質的にとらえたまま計算する数値計算法の研究を行っている。

非線型偏微分方程式を数値的に計算しようとする場合は通常は（非）線形安定性解析に基づいて離散パラメータを制御する。しかし、パラメータ制御による手法が本質的に無効である場合も少なくない。

そこでわれわれは非線型偏微分方程式の多くはエネルギー保存性や組成保存性などの保存則や散逸則を要請されるものが多いことに着目し、それらを厳密に満たすように計算手法を構成する方法論をとる。同様の方法論に Energy method や TotalVolume、Symplectic スキームなどが知られているが、適用範囲は限られており、新しい方法論が常に必要とされている。そこで、偏微分方程式解に対する Lyapunov 関数を離散的に構成するアイディアに基づいて離散変分法というスキーム構成法を提案した。

この研究は徐々に深まりつつあり、適用範囲は Hamilton 系を含むエネルギー保存系や Fujita-type 爆発問題系、粘菌の挙動を記述する Keller-Segel 系などの連立偏微分方程式系、非線形 Schroedinger 問題などの複素問題等をはじめ、非線型長波長近似方程式として近年提唱された Bao-Feng Feng 方程式、regularized long wave 方程式や Camassa-Holm 方程式、パターン形成問題のモデル方程式として知られる Swift-Hohenberg 方程式や非線型 Klein-Gordon 方程式、 extended Fisher-Kolmorov 方程式、エルゴード性を調べるために用いられた Fermi-Pasta-Ulam 方程式など、多岐に渡っている。

さらに、スペクトル法などのより一般化された離散化概念を用いることも可能であることも判明し、より抽象的な概念に結び付く可能性を示唆している。

また、 Cahn--Hilliard 方程式や Eguchi--Oki--Matsumura 方程式、Allen-Cahn 方程式、さらに Bao-Feng Feng 方程式、 regularized long wave 方程式、 extended Fisher-Kolmogorov 方程式、Camassa-Holm 方程式などのいくつかの方程式に対しては導出された差分スキームの安定性、解の一意存在性、収束性等の数学的な証明を与えた。

さらに、非線形性が多項式で表現されるような場合は time-multistage 化と呼ばれる手法により非線形性のオーダを下げられることに注目し、離散変分法と組み合わせることにより、安定かつ線型な差分スキームを構成できる可能性があることを見いだした。 Time-multistage 化は非常に強い数値不安定性を伴うため通常は利用できないが、離散変分法のもたらす安定化効果の方が支配的な差分スキームを構成できれば、安定性と線形性の両方が同時に実現できるのである。 このアイディアに基づき、先にあげた Cahn-Hilliad 方程式や Eguchi-Oki-Matsumura 方程式、Bao-Feng Feng 方程式、 regularized long wave 方程式、Swift-Hohenberg 方程式に対して実際に線型かつ無条件安定な差分スキームを構成し、その性質を数学的に証明することにも成功した。

以上の結果はこの手法の有効性を具体的に示すものであり、これからの研究が待たれる。

4.4 変分原理に基づく蛇行流問題の数理モデルに関する研究

河川工学、流体輸送などの分野において、流体の蛇行の理解、制御は非常に重要な問題であるため、これまで多くの研究がある。 これらは、実測/実験によるデータ収集をはじめとして、侵食/堆積を中心とした素過程を数式化することによる数理モデリン

グや、これらの素過程を積分した結果をCellular-Automata に基づいて構成した数理モデリングなどがあり、これらのモデリングに基づいた数値計算結果との比較なども良好な結果を示している。しかし、これまでの実験で、堆積過程の存在しない氷河上や、侵食過程と堆積過程との両方が存在しないガラス表面上でも流体が蛇行することが確かめられている。 これは、これまでの数理モデルが根本的に適用できない状況においても流体の蛇行現象が起きることを意味する。 つまり、蛇行現象はこれまでの「侵食/堆積といった素過程を積み重ねる」ことのみによって理解出来る現象ではなく、より大きな共通構造を数理的にモデリングする必要があることをこの事実は示唆している。人工的な流体輸送においても侵食/堆積といった素過程は存在しない場合があるため、この共通構造の理解は実用面からも要求される大きな課題である。

この現状に対し、素過程を積み重ねるという粒度の細かい議論ではなく、系の自由エネルギーの変化に伴う現象であるという粒度の大きな議論を行うことで数理モデリングを構成し、解析する研究を行っている。 これは、局所自由エネルギーが流体の速度と加速度に依存するとし、速度に依存する項が極小点をもち、かつ、加速度に対しては単調に増加する項をもつという系を考え、この系の全自由エネルギーが単調に減少するような自然な偏微分方程式系を想定することで数学的に非常に自然に行える。これにより、系の時間発展に伴うエネルギー変化が自然に導出できるとともに、その局所的変動により応力の発生などが計算できるという利点がある。そして、このモデリングによる計算モデルの構築を行い、その計算結果の解析に取り組んだ結果、妥当な計算結果を得ることに成功し、当モデリングの妥当性を示すことができた。

4.5 数値計算法の安定性を生かした数理アルゴリズムの開発

上記で示した数値計算法が離散変分概念を主としていることを手がかりに、グラフ上で定義される最適化問題の一種、例えば地図の四色彩色問題などに対して、離散変分法を適用できることを示した。この結果に至る経緯において、グラフ上の部分和分が行える条件（擬ゼロ次正規グラフであることや、グラフ上のラプラシアンの妥当な定義等）を明らかにするとともに、最適化問題を適切にペナルティ法で緩和し、適切な時間発展問題で求解アルゴリズムを実装することによって問題を偏差分方程式とすることで可能となった。構築されたアルゴリズムは非常に素直なものであるが、不安定性が強く、通常の解法では実用的でない。しかし、本数値解法を用いることで安定な実装が可能となり、実用性を獲得するに至った。またこの成果は、問題を偏差分方程式に書き換えることで、数値解析分野における豊富な成果を利用することを可能とし、離散問題に対し、高速/省メモリな解法を提案する可能性を強く示唆する。この成果は、離散問題と連続問題の融合を図る一端ともなっており、その意味でも意義が高いと考える。

5 社会貢献に関する業績

5.1. 教育面における社会貢献

5.1.1 学外活動

- 非常勤講師「電子情報工学特別講義 I」 （富山県立大学, 2006.10.13）

（以上、小田中）

- 非常勤講師「特別講義 II」 （岡山理科大学, 2005.06.29-30）
- 講師「サイエンスカフェ（ライフゲーム）」（豊中市教育センター, 2007.02.17）

（以上、降旗）

5.2. 研究面における社会貢献

5.2.1 学会活動

- IEEE SISPAD, Member, International Steering Committee
- IEEE SISPAD2007, Member, Technical Program Committee
- IEEE EDS Kansai Chapter, Committee member

- 応用物理学会シリコンテクノロジー分科会モデリング研究委員会　委員長

（以上　小田中）

- 日本応用数理学会 理事，ネットワーク委員長

（以上、降旗）

5.3 産学連携

無

5.4 研究プロジェクト活動

現在、以下の研究プロジェクトに参画している。

(1)文部科学省　科学研究費補助金　基礎研究(B)“保存則系の粘性及び緩和モデルの時間大域解とその漸近挙動に関する研究”（2003～2007 年度）分担

(2)文部科学省　21 世紀 COE プログラム　“究極と統合の新しい基礎科学”（2003～2007 年度）（第 3 班原理の追求）分担

（以上、小田中、降旗）

(1) 文部科学省　科学研究費補助金　基礎研究(B)“樹木と土壌の相互作用による動的森林システムの数学的構造”（2004～2007 年度）　分担

（以上、小田中）

(4)文部科学省　科学研究費補助金 萌芽“整数制約問題等の偏差分方程式化による数値解析に基づく求解アルゴリズム” （2007～2008 年度） 研究代表者

（以上　降旗）

5.5 受賞

IEEE Fellow 賞

For contributions to numerical modeling and simulation of scaled complementary metal oxide semiconductor integrated circuit processes and devices

（以上、小田中）

2006 年度研究発表論文一覧

学会論文誌

(1)S.Odanaka, “A numerical scheme for quantum hydrodynamics in a semiconductor,” RIMS Kokyuroku, Kyoto University, 1495, pp.51-59, 2006.

(2)S.Odanaka, “A high-resolution method for quantum confinement transport simulations in MOSFETs,” IEEE Trans., Computer-Aided Design of ICAS, vol.26, pp.90-95, Jan 2007.

口頭発表（国内研究会など）

(1) 小田中紳二, “半導体における量子流体の数理と数値モデリング,”応用物理学会シリコンテクノロジー分科会第 96 回研究集会, 2006 年 11 月

(2) 島田知子, 小田中紳二, “半導体における非定常な量子ドリフト-拡散モデルの数値計算法,” 応用物理学会 2006 年度年会,　2007 年 3 月

(3) 降旗 大介, “離散と問題 –離散問題と数値解析の融合にむけて-”, 若手数学研究会，岐阜大学, 2006 年 7 月.

(4) 降旗 大介, “グラフ上離散変分とその整数制約問題への応用”, 応用数理学会年会，筑波大学, 2006 年 9 月.

(5) 降旗 大介, “整数制約問題の差分法化 –離散問題と数値解析の融合にむけて-”, オペレーションズリサーチ学会二研究部会合同研究集会，大阪大学, 2006 年 9 月

(6) 降旗 大介, “整数制約問題の差分法化 –離散問題と数値解析の融合にむけて-”, オペレーションズリサーチ学会「計算と最適化」研究部会合同研究集会,　上智大学, 2006 年 9 月

(7) 降旗 大介, “グラフ上離散問題アルゴリズムの偏微分方程式的解釈”, 「常微分方程式の数値解法とその周辺」研究集会，はこだて公立みらい大学, 2006 年 11 月.

(8) 降旗 大介, “離散変分法概説”, 「常微分方程式の数値解法とその周辺」研究集会，はこだて公立みらい大学, 2006 年 11 月.

招待講演

(1)S.Odanaka, “Numerical simulation in semiconductor industry,” Nonlinear Analysis, Institute of Mathematics, Academic Sinica, Taiwan, September, 2006.

(2)S.Odanaka, “Physics of semiconductor transport: Quantum hydrodynamics in a semiconductor,” Nonlinear Analysis, Institute of Mathematics, Academic Sinica, Taiwan, September, 2006.

(3)S.Odanaka, “Mathematical analysis of quantum hydrodynamics in a semiconductor,” Nonlinear Analysis, Institute of Mathematics, Academic Sinica, Taiwan, September, 2006.

(4)S.Odanaka, “Numerical scheme for quantum hydrodynamics in a semiconductor,” Nonlinear Analysis, Institute of Mathematics, Academic Sinica, Taiwan, September, 2006.

解説・その他

無

2005 年度特別研究報告・修士論文・博士論文

修士論文

(1) 岩田　和人, “加速法による行列の指数関数の数値計算について”

(2) 竹谷　賢, “Camassa--Holm 方程式に対する保存スキームの構成と解析”