

# 論文内容の要旨

## 論文題目：再帰直交多項式展開を用いた大規模行列計算アルゴリズム

氏名：國島 和

### [背景]

興味ある関数を直交多項式で展開して評価する一般的な方法を開発した。これは3項間漸化式を持つ Jacobi 多項式や Gegenbauer 多項式, Hermite 多項式を用いて系統的に与えることができ、漸化式を利用した高速演算が可能である。この方法を再帰直交多項式展開法と呼ぶことにする。

多くの物理量がグリーン関数を用いて表せることから、これを評価することが物性物理の理論的な研究で重要な出発点の1つになっている。グリーン関数をこの方法により求めることを考える。再帰直交多項式展開は無限和で表現されるが運用時には有限和でこれを近似する。そのため誤差が発生する。さらに計算機では有限自由度のみ扱えるためこのことがギブス現象という特徴あるものを引き起こす。

### [本論文の目的]

1. グリーン関数を求めたときの打ち切り誤差のオーダーを解析的に評価する
2. 誤差の解析的評価を数値計算によって確認する
3. 有限自由度での結果を無限自由度のものとして近似することを考察する
4. 既に知られている収束因子を導入して1の評価を再度行なう
5. 実際の第1原理計算に応用する

## 【結果】

グリーン関数の展開式から積分固有値密度を求めて目的 1 を行なった結果、誤差が展開の打ち切り次数にほぼ反比例することを明らかにした。ただし固有値近傍ではギブス現象により収束が非常に鈍くなる。このことは数値的にも確認された。ルジャンドル多項式を採用した場合にこの現象の役割をする項も明らかにした。

目的 3 の状態密度の計算を行った。展開の打ち切り次数が固有値の数よりも十分に小さければ、有限自由度での結果を無限自由度のものとしてよいこと示した。また解析的な評価により誤差のオーダー評価式を明らかにした。

ギブス現象を抑制する収束因子が既に知られており、これを用いて再度誤差を評価したところ、比較的固有値から離れた場所では展開の収束が著しく向上した。

実際の第 1 原理計算に再帰直交多項式展開法を応用した。アモルファスおよび液体の鉄について直流電気伝導度やホール係数などを計算した。どれも今までに他の手法にて求められた結果とほぼ一致した。特にホール係数  $R_H$  はその外挿値が実験結果と一致した(図)。そしてこれらのデータを得るのに必要な計算時間は、現在の標準的なスカラ計算機でもたかだか 10 秒程度である。従来 of 時間依存の方法はこの 10~100 倍程度を必要とするため、再帰直交多項式展開法は運用面での利便性も高く、展開した関数を安定して精度よく再現する。

