

## 論文審査の結果報告

氏名 國島 和

國島氏の博士論文は、物理学において様々な物理量を計算する際にしばしば現れる重要な演算子を直交多項式により展開することで効率的に計算するものである。時間発展演算子や密度演算子などをチェビシェフ多項式により展開する試みは従来からあったが、主に化学物理学の分野で発展してきたこともあり体系的な方法論は無かった。國島氏は、より一般的なゲーゲンバウアー多項式により時間発展演算子、密度演算子、フェルミ演算子、グリーン関数を展開する方法を体系的に示し具体的な表式を与えた点で評価できる。

この方法は、(1) 直交多項式で展開することで、巨大な行列で表現されるハミルトニアンを直接対角化することなく様々な演算子を計算できる。(2) 高次の項は直交多項式の満たす3項間漸化式を利用することで逐次的に行列を作用させるだけで計算できる、(3) そのためハミルトニアンが疎行列であれば、システムの大きさに比例した時間で計算ができる(所謂オーダー  $N$  法)、などの特徴を持っている。

同じ目的のためには従来ランチョス法が多く用いられてきた。しかし、ランチョス法は展開が高次になると数値的不安定性を示すことが知られている。この方法はそうした不安定性が無いことも大きな利点である。さらに、展開結果が解析的に与えられるため様々な発展が考えられ、計算物理学の立場からは巨大な系や強相関係での物性研究に非常に有用であると思われる。

氏は、直交多項式展開法の一般的な手法を構成したのち、まず、グリーン関数を直交多項式で展開した場合の打ち切り誤差を、ルジャンドル多項式およびチェビシェフ多項式の場合に、離散スペクトル、連続スペクトルの両者に対して厳密な評価式を与えた。さらに、不連続点におけるいわゆるギブス現象についての考察を行い、展開のどの項が寄与するかを明らかにした。これによって、この項のカウンター項を導入して振動を抑えることも可能になった。また、本来は連続スペクトルを持つ系に対して有限なハミルトン行列により近似する場合の定性的な誤差評価も行っている。物理的演算子を直交多項式で展開する方法の収束性や計算結果の誤差評価はこれまできちんと調べられずに使用されていたが、本博士論文では展開の収束性とその誤差評価について解析的に示されたことも意義が大きい。

さらに、氏は、実際の応用上ギブス振動を抑えるために、化学物理学の分野で開発された収束因子(positive kernel)の手法を直交多項式展開法に導入した新しいアルゴリズムを開発した。これは、デルタ関数(デルタ測度)を有限次の多項式で近似する場合、打ち切り誤差のために近似デルタ関数が正值にならないため、特に、フェルミ面近傍の状態を反映する物理量に対して致命的な影響を与える効果を抑えるものである。この新しいアルゴリズムを、液体金属に適用し、その電気伝導度とホール伝導度を計算することでこの方法の有用性を示した。その結果従来法よりも計算時間が一桁、場合によっては三桁も改善することが示された。

このように、本論文では、氏の開発した直交多項式展開法を数理科学的な手法によって厳密な適用限界を定め、さらに現実の問題に応用するために収束因子を導入し改良を施し、実際の物理系に応用しその有用性を証明したもので、数理科学的な意義は大きい。よって、論文提出者 國島 和 は、博士（数理科学）の学位を受けるにふさわしい十分な資格があると認める。