

今後の研究計画 (氏名) 蘆田 聡平

今後もシュレーディンガー方程式の多体問題を研究していきたいと考えています。この分野は長い歴史と多くの研究の積み重ねがありますが、なお本質的な困難は解決されていません。このような困難がどこから来ているのか考えながら問題に取り組んでいきたいと思ひます。

具体的に解決すべき課題として第一に電子のハミルトニアンと呼ばれる微分作用素の固有値問題の固有値及び固有関数を高精度な誤差評価付きで正確に評価する方法を開発(発見)することが挙げられます。このような問題では有限要素法のような伝統的な微分方程式の数値計算の方法では、主にクーロンポテンシャルの特異性のため意味のある精度で解を求めることができません。物理学においてよく使われる手法は摂動論ですが、摂動論では解の定量的誤差評価が原理的にできません。これらの方法と比較して真の解に関して部分的な情報を与えるのが変分法であり、変分法によって求めた固有値は真の固有値以上となるため、真の固有値の上界評価が得られます。しかし、変分法だけでは得られた上界評価がどれだけ真の固有値に近いのかを判定することはできません。このことから固有値の評価のためにすべきことは上界評価と対になる真の固有値がある値以上であることを示す高精度な下界評価を発見することであると考えられます。固有値の下界評価も長い歴史があり、いくつかの方法がありますが、多体問題に適用可能で精度が高い方法は現在のところ存在しません。以上の理由から私の今後の研究の中心的なテーマの一つとして多体問題における固有値の正確な下界評価法の開発が挙げられます。上界評価が変分法により原理的には容易に求められるのに対して、下界評価の既知の方法は複雑で、計算が困難あるいは実行不可能なものも多く評価の精度も非常に低いものしかないのが現状なので、第一に上界評価に比べてなぜ正確な下界評価が非常に困難なのかを明らかにしていく必要があると思ひます。

変分法による上界評価に関しても研究したいと思ひます。変分法において問題となるのは真の固有関数を近似する基底関数をどのように選択するかという点です。現在、原子核近傍での電子の挙動を近似するために主に使われている基底関数系はSTOとGTOと呼ばれているものです。また、結晶の内部の原子核から離れた領域では平面波が使われています。しかし分子に対してSTO、GTOが変分法でよい近似を与えるという理論的な保証はなく、特に原子核から離れた領域で真の固有関数との誤差が大きくなると考えられます。また結晶内では原子核近傍のSTOとそれ以外の領域での平面波を領域の境界でつなぎ合わせる必要があります。このような観点から異なる領域で異なる基底関数系を用いる変分法の開発が必要になると考えられます。一般に領域の境界で基底関数を完全に接続することは不可能であるため、境界上での不連続性を許容し、不連続性による誤差の評価を与える方法が必要になります。このような基底関数の領域の境界での接続法と不連続性による誤差の評価法を開発していきたいと思ひます。

もう一つの重要な研究の方向性として、異なる電子のハミルトニアン間の固有関数の構造の関係が挙げられます。具体例として二つの分子の一部を連結して新しい分子を作るときを考えると、新しい分子はそのもとになった分子の官能基などの局所的な構造をほぼそのまま保存していることが多いことは実験的にわかっています。このことは数学的にはもともとの分子を記述するハミルトニアンと連結後の分子を記述するハミルトニアンの固有関数の構造の間に関係があることを示しています。しかし、固有関数は分子全体に広がった複数の電子の座標の関数であり、ハミルトニアンの構造と固有関数の局所的な構造の関係は非常に複雑かつ曖昧でつかみどころがないものであると考えられます。そのため異なるハミルトニアンの固有関数の局所構造を数学的に関連付けることは容易ではありません。このような問題へのアプローチとして現在有望と考えられるのはハートリー・フォック近似の枠組みで波動関数をスレーター行列式で近似して、さらに各電子の軌道を有限個の基底関数の一次結合により近似することで問題をハートリー・フォック法での相互作用する有限次元のベクトルの問題に帰着させることです。このようなベクトルから作られる電子の密度行列の分子の連結前後での変化を考えることで分子の電子構造が保存されることを示そうと考えています。

これらの研究において重要になってくる数学の研究領域は主に関数解析、関数解析に基づく数値計算の理論及び行列の理論です。これらの分野の文献を読み、理解していくことは研究を進めるために必須の条件と思ひます。また、数学的に厳密に定式化されていない理論や実験結果なども数学的な研究をする上での予備知識として重要になると考えられます。そのためこれらの知識も文献などから吸収していきたいと思ひます。これらの知識をもとに未開拓の領域においてもあきらめずに試行錯誤を重ねて新しい原理、原則を見出して上記のような長年未解決の困難な問題を解決するための努力を積み重ねていきたいと思ひます。

I would like to continue to study many-body problems of the Schrödinger equation. This field has a long history and there is a lot of accumulation of research. Nevertheless, essential difficulties have still not been solved. Considering where the difficulty comes from, I would like to tackle the problem.

As a specific problem to be solved, it is first picked up to develop methods to estimate eigenvalues and eigenfunctions of the differential operator called electronic Hamiltonian accurately with error bounds of high accuracy. Such a problem cannot be solved with meaningful accuracy by the traditional numerical analysis methods such as the finite element method mainly due to the singularity of the Coulomb potentials. The method frequently used in physics is the perturbation theory, but quantitative error estimates cannot be obtained by the perturbation theory in principle. Compared to these methods, the variational method gives a part of information of the true solution, and since the eigenvalues obtained by the variational method are greater than the true eigenvalues, upper bounds of the true eigenvalues are obtained. However, it is impossible to judge how close the upper bound is to the true eigenvalue only by the variational method. From this fact we can see that in order to estimate the eigenvalues we need to find an accurate lower bound which compensates for the upper bound and shows that the true eigenvalue is greater than some value. The lower bound of eigenvalues also has a long history and there are several methods, but there is no method which is applicable to the many-body problem and has high accuracy at present. Because of these reasons, development of a method for accurate lower bounds to eigenvalues is raised as a central subject of my future research. Compared to the fact that upper bounds can be obtained by the variational method easily in principle, currently known methods for lower bounds are complicated, the execution of the calculation in the methods is difficult or impossible, and the methods have very low accuracy. Therefore, it seems to be needed to clarify the reason why the accurate lower bounds are extremely difficult.

I would like to study also upper bounds by the variational method. The problem in the variational method is how to choose the basis functions that approximate true eigenfunctions. Currently, the basis functions mainly used to approximate the behaviors of electrons near nuclei are STO and GTO. Besides, in a region in a crystal apart from nuclei plane waves are used. However, there is no theoretical guarantee that STO or GTO gives good approximation for molecules in the variational method. In particular, in a region apart from nuclei the error from the true eigenfunction is thought to be large. Moreover, in a crystal we need to connect STOs near nuclei and the plane waves in the other region on the boundaries of the regions. From such a perspective it seems that we need to develop a variational method that uses different basis functions in different regions. Since in general it is impossible to connect basis functions exactly, a method that allows discontinuity on the boundary and gives estimates for errors due to the discontinuity is needed. I would like to develop methods to connect solutions on the boundaries of regions and the estimates of errors due to the discontinuity.

As another important direction of the research, the relation between structures of eigenfunctions of different electronic Hamiltonians is raised. For example, when two molecules are connected to construct a new molecule, the new molecule often preserves the local structures such as functional groups of the original molecules almost as they are. This means mathematically that there exists a relation between the eigenfunctions of the Hamiltonians of the original molecules and that of the connected molecule. However, the eigenfunction is a function of the coordinates of the electrons spreading around the whole molecule, and the relation between the structure of the Hamiltonian and the local structure of the eigenfunction would be very complicated, ambiguous and elusive. Therefore, it is not easy to relate local structures of eigenfunctions of different Hamiltonians mathematically. An approach that seems to be promising at present is to approximate the wave function by the Slater determinant and approximate further each electronic orbital by a linear combination of a finite basis set to reduce the problem to that of finite-dimensional vectors interacting under the Hartree-Fock framework. I am planning to prove the preservation of electronic structures considering changes of density matrices of electrons constructed from the vectors before and after the connection of molecules.

The fields of mathematics which are important for these studies are mainly functional analysis, theory of numerical analysis based on functional analysis, and the theory of matrix. It seems to be necessary for the study to read and understand the literature in these fields. Moreover, theories and experimental

results that are not formulated in mathematically rigorous ways would also be important as preliminary knowledge for mathematical studies. Therefore, I would like to assimilate the knowledge from the literature. I would like to keep making efforts to solve the long-standing unsolved problems as above finding new principles through trial and error not giving up even in the frontiers.