

1P066

シュレディンガー方程式における動径基底関数選点法による数値解法

電通大 佐野 達司

Galerkin法はシュレディンガー方程式の解法において選点法より正確な固有解を与えることが分かっている。しかしながら，有限要素Galerkin法を用いて3次元あるいはより高次元固有値問題を解く場合には要素分割(メッシュ生成)は極めて面倒なものとなる。一方，選点法は補間に基づくので真にメッシュレスな方法と見なされる。選点法を用いた偏微分方程式の解法においてRBFは大域的台を持つので，節点数が大きい場合には系行列がしばしばpoorな条件を示す。本研究においては固有値問題を補間動径基底関数(RBF)近似を用いて有限次元補間固有値問題として解く。Gaussian関数のような大域的台とWendland関数やWu関数のようなコンパクト台を持つRBFによる選点法を用いて得られる数値結果を比較する。RBF選点法を2次元Henon-Heilesハミルトニアンと3次元3結合非調和sextic振動子のポテンシャルモデルに適用してそれらの固有解を得る。

固有値問題 $H\psi(\mathbf{x})=\lambda\psi(\mathbf{x})$ と境界条件を伴う有界領域 D が与えられた場合の固有解を得ることを考える。 N_I 個の内部節点と $N-N_I$ 個の境界節点を与えられていると仮定し，固有関数 $\psi(\mathbf{x})$ を同じ形状パラメータ c を持つRBFの線形結合で

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N w_j \varphi(\|\mathbf{x} - \xi_j\|), \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^d$$

と近似する。このRBF近似を固有値問題とDirichlet境界条件に代入すれば，RBF選点行列形式:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{H} \\ \mathbf{B} \end{bmatrix} \mathbf{w} = \lambda \begin{bmatrix} \mathbf{C} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \mathbf{w}, \quad H_{ij} = H\varphi(\|\mathbf{x}_i - \xi_j\|), \quad C_{ij} = \varphi(\|\mathbf{x}_i - \xi_j\|) \quad (i = 1, \dots, N_I), \quad B_{ij} = \varphi(\|\mathbf{x}_i - \xi_j\|) \quad (i = N_I + 1, \dots, N)$$

が得られる。この方程式の解法として境界条件を固有値方程式に代入するアルゴリズムとRBF近似固有関数が境界において漸近的挙動を自動的に満たすものとして境界条件を陽に考慮しないアルゴリズムを用いる。これら固有値方程式に対して非対称行列の一般化固有値 λ_n と重み固有ベクトル \mathbf{w}_n を求める必要がある。ただし，RBF中心 $\{\xi_j\}$ と選点 $\{\mathbf{x}_i\}$ に対して同じセットを用いた。選点を除く M 個の全補間点に関する残差の L_2 ノルムを

$$E(\mathbf{w}_n, c) = \left[\sum_{k=1}^{M_I} \{H\psi(\mathbf{x}_k, \mathbf{w}_n, c) - \lambda_n \psi(\mathbf{x}_k, \mathbf{w}_n, c)\}^2 + \eta \sum_{k=M_I+1}^M |\psi(\mathbf{x}_k, \mathbf{w}_n, c)|^2 \right] / \int |\psi(\mathbf{x}, \mathbf{w}_n, c)|^2 d\mathbf{x}$$

のように定義する。最適な形状パラメータ c を最低固有状態に対する2乗誤差量を最小にするように調整する。ここでは大域的台を持つRBFとして用いたGaussian関数は

$$\varphi_c(r) = \exp(-(r/c)^2)$$

で表現される。一方，ここでコンパクト台を持つRBFとして用いたWendland関数は

$$\varphi_c(r) = (1-r/c)_+^8 (32(r/c)^3 + 25(r/c)^2 + 8r/c + 1)$$

で表現され、 C^6 級関数であり、かつ \mathbf{R}^3 において狭義正定値である(C^6 SPD₃で示す)。また、 C^4 SPD₃であるWu関数も用いた。ただし、 $r = \mathbf{x} \cdot \mathbf{x}$,

$$(1-r)_+ = \begin{cases} 1-r & (0 \leq r \leq 1) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

とする。これらコンパクト台を持つRBFは

$$\varphi_1(1) = 0, \quad \left. \frac{d\varphi_1(r)}{dr} \right|_{r=0} = \left. \frac{d\varphi_1(r)}{dr} \right|_{r=1} = 0$$

を満たす。

大次元非対称一般固有値問題を対角化するためにDavidson法を拡張した計算アルゴリズムを適用した。2次元 Henon-Heilesハミルトニアン系に対しては円領域内の正方格子に置かれた1373節点を用いた。量子数(9 1)状態の固有値についてGaussianとWendland RBFから得られた計算結果を表1に示す。Wendland RBFはGaussian RBFよりもFFSの計算結果に類似した傾向を示し、良い精度が得られる。図1と図2はそれぞれGaussianとWendland RBF選点法における量子数(0 0)状態の形状パラメータ c に対するRMS誤差を示す。

表1

量子数(n l)	Gaussian RBFC	Wendland RBFC	FFS ³⁾	DH ⁴⁾
9 1	9.4448	9.4444	9.4442	9.4441
3	9.4679	9.4672	9.4670	9.4668
-3	9.5524	9.5527	9.5526	9.5524
5	9.6295	9.6297	9.6296	9.6294
7	9.7942	9.7944	9.7944	9.7941
-9	10.0355	10.0357	10.0356	10.0354
9	10.0356	10.0358	10.0359	10.0356

図1

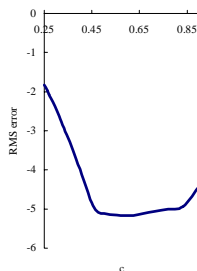
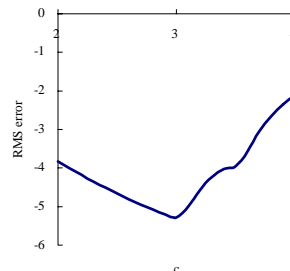


図2



[1] T Sano: XII ICQC2006 Abstract A149 [2] H Wendland: Adv Comput Math 4 (1995) 389 [3] Spectral method (MD Feit et al: J Comp Phys 47 (1982) 412) [4] Semiclassical Gaussian basis set method (MJ Davis et al: J Chem Phys 71 (1979) 3383)