1P09 粒子法による電子状態計算の高精度化

○杉本宗一郎 [1]，善甫康成 [2]
[1] 法政大学情報科学研究科（〒184-8584 東京都小金井市梶野町 3-7-2）
[2] 法政大学情報科学学部（〒184-8584 東京都小金井市梶野町 3-7-2）

1. 序論

実空間の電子状態計算では一般にメッシュを用いて計算が行われる．実空間メッシュは直感的に分かりやすく大規模並列計算に適しているためである．実空間メッシュを用いる場合，運動エネルギーやポアソン方程式などのラプラシアン演算子は高次の差分法を用いて離散化される[1].

粒子法はメッシュを用いない計算手法であるため計算点の配置の自由度が高い．粒子法を電子状態に適用した場合，高精度な計算が必要な領域へ集中的に計算点を配置することで効率的な計算が行えるのではないかと期待される．しかし，差分法に比べて粒子法の計算精度は低いことが一般的に知られている．実用的な電子状態計算への適用を考慮すると，粒子法を用いて高次の差分法と同等の計算精度を得ることが課題の一つである．前回は単純な SPH を用いた計算を紹介した．本研究では，計算精度を改善した粒子法の一つである Symmetric Smoothed Particle Hydrodynamics (SSPH) [2, 3] を調和振動子に適用し，計算精度の評価を行った．

2. 計算手法

計算対象領域に粒子を配置して空間を粒子で表現する．SSPH を用いてシュレーディンガー方程式を離散化すると一般化固有値問題に帰着する．これを解くことによって，各粒子の位置における波動関数の値，エネルギー固有値が求められる．SSPH はテイラー展開を用いて定式化されているため，高次の項までテイラー展開を考慮することで高精度な計算結果が得られる．SSPH のカーネル関数には Wendland 関数[4]を用いた．

3. 結果

調和振動子の最小固有値の相対誤差を右図に示す．$-20 < x \leq 20$の範囲内に刻み幅dxで等間隔に粒子を分布させて計算を行った．カーネル関数の平滑化距離(smoothing length)は$h = 5.0dx$とした．テイラー展開は 14 次の項まで考慮した．粒子数は$(40/dx + 1)$であり，dxを小さくすると粒子数が増加する．粒子数の増加に伴い誤差が小さくなっていることが分かる．$dx = 0.3$以下では 9 点差分法よりも高精度な結果が得られていることが分かる．

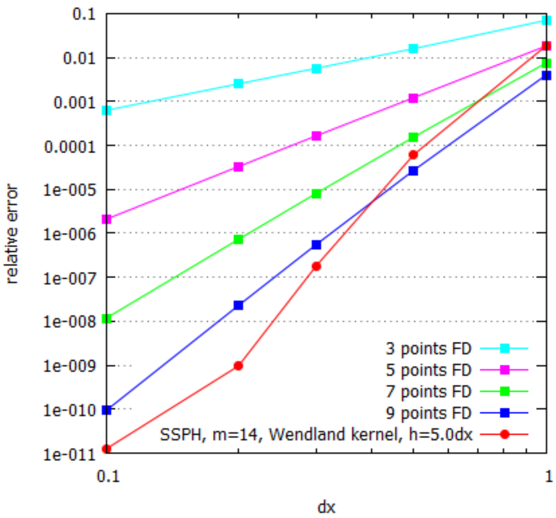

図 1 調和振動子の最小固有値の相対誤差

参考文献

[1] J. Chelikowski, N. Troullier, K. Wu, and Y. Saad, Phys. Rev, B50, 11355(1994)

[2] R. C. Batra, G. M. Zhang, Comput. Mech. 41, pp527-545 (2008)

[3] G. M. Zhang, R. C. Batra, Comput. Mech. 43, pp321-340 (2009)

[4] H. Wendland, Adv. Comput. Math. 4, pp389-396 (1995)