

○杉本宗一郎¹, 善甫康成²¹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法政大学情報科学部(〒184-8584 東京都小金井市梶野町 3-7-2)

1. 序論

最近の電子状態計算では、実空間メッシュを用いた計算が行われることが多い。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。しかし、計算量がメッシュサイズによるという問題がある。粒子法はメッシュと異なり計算点の配置に制限がないため、高精度な計算が必要な領域へ集中的に粒子を配置するなどして計算量を小さくできるのではないかと期待される。代表的な粒子法の一つに Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) [1] がある。複雑形状、大変形、自由表面などを扱う場合に有用であることから、主に流体解析の分野で利用されている手法である。近年、流体以外の偏微分方程式に SPH を適用する研究が行われている [2,3,4] が、電子状態計算のように高精度な計算が必要な分野ではその検証が十分に行われていない。本研究では、電子状態計算への粒子法の応用の第一段階として、解析解が分かっている調和振動子と水素原子（動径方向）のシュレーディンガー方程式に対して Modified Smoothed Particle Hydrodynamics (MSPH) [5] を適用し、計算精度の評価を行った。MSPH の他に SPH と有限差分法(FD)を用いて方程式を解き、エネルギー固有値および波動関数を比較することで検証を行った。

2. 計算手法

粒子法は計算対象領域にカーネル関数の積分形表現にて空間を粒子で記述する手法である。SPH を改良した MSPH は

$$\psi(x) = \psi(x_i) + \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{x_i} (x - x_i) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right|_{x_i} (x - x_i)^2$$

として局所的に粒子の存在する点でシュレーディンガー方程式がコンシステントとなるように離散化を行うところが改良された点である。この離散化により一般化固有値問題に帰着するので、そのまま各粒子の位置における波動関数 $\psi(x)$ の値、エネルギー固有値が求められる。なお我々はカーネル関数としてガウス関数を用いた。

3. 数値計算結果

水素原子の 1s 軌道の固有値の相対誤差を図 1 に示す。 $0 < r \leq 20$ の範囲内に刻み幅 Δr 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 $h = \Delta r$ とした。粒子数は $(20/\Delta r)$ であり、 Δr を小さくすると粒子数が増加する。標準的な SPH の結果では粒子数の増加に伴い誤差が大きくなっていることが分かる。 $\Delta r = 0.5$ のときに最も誤差が小さくなっているが、十分な計算精度は得られていない。一方、MSPH では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。粒子間隔と同じ差分を用いた FD の結果と単純に比較すると、粒子間隔が 3 分の 1 から 4 分の 1 となるよう十分な粒子数を確保すれば MSPH による計算でも正しい固有値が求められていることがわかる。

図 2 に MSPH 法における 1s 軌道の動径波動関数の粒子間隔による比較を示す。粒子数が少ない場合 ($\Delta r = 0.5$, 粒子数 40) は解析解から大きくずれていることが分かる。そのため固有値の精度も低い。しかし、十分な粒子数がある場合 ($\Delta r = 0.05$, 粒子数 400) には解析解と良く一致していることが分かる。

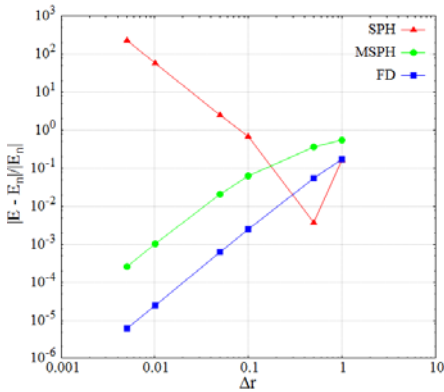


図 1. 固有値の相対誤差(水素原子 1s 軌道).
手法による比較.SPH(▲), MSPH(●), FD(■)

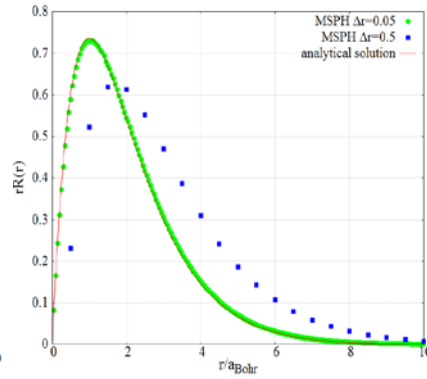


図 2.水素原子の動径波動関数(1s 軌道).
粒子間隔による比較. $\Delta r = 0.05(\bullet)$,
 $0.5(\blacksquare)$, 実線は解析解.

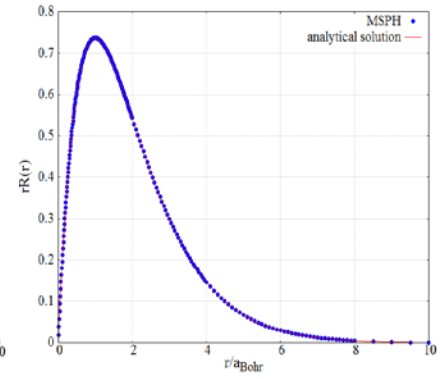


図 3. 水素原子の動径波動関数(1s 軌道).
粒子間隔は $0 < r \leq 2$, $2 < r \leq 4$,
 $4 < r \leq 8$, $8 < r \leq 20$ で異なる.

4. 考察

粒子法の特徴は粒子の位置を精度が許す範囲内で自由に変えることができる点である。図 3 は粒子間隔を区間ごとに換え、非一様な粒子分布で水素原子の動径波動関数を計算した結果を示したものである。 $0 < r \leq 2$ では $\Delta r = 0.01$, $2 < r \leq 4$ では $\Delta r = 0.05$, $4 < r \leq 8$ では $\Delta r = 0.1$, $8 < r \leq 20$ では $\Delta r = 0.5$ で各領域内は等間隔であるが、波動関数が大きく変わる場所では多く粒子を配置した。その結果、MSPH の結果は上述の結果よりも更に解析解と良く一致していることが分かる。固有値の相対誤差は 9.60×10^{-4} であり、 $\Delta r = 0.01$ で等間隔に分布させた場合と同様の精度であった。粒子数は 304 であり、 $\Delta r = 0.01$ の一様分布と比べて 6 分の 1 程度に減らすことができた。

有限差分法の格子点と同様に粒子を配置した場合、同程度の計算精度を得るためには格子点よりも多くの粒子が必要となる。特に、波動関数の値が大きく変化する領域には多くの粒子が必要であると考えられる。一方、変化が小さい領域では少ない粒子数でも十分であると考えられる。

5. まとめ

MSPH を用いて調和振動子と水素原子（動径方向）のシュレーディンガー方程式を解いた。MSPH が電子状態計算に対しても適用可能であることが分かった。SPH を用いた場合は粒子数が増加すると計算精度が低下する問題があるが、MSPH の場合はそのような問題は発生しなかった。高精度な計算が必要な領域へ集中的に粒子を配置することで、精度を維持しながら粒子数を減らせることが分かった。

参考文献

- [1] G. R. Liu, M. B. Liu, Smoothed Particle Hydrodynamics: a meshfree particle method, World Scientific, 2003
- [2] P. Laguna, Astrophys. J. 439, pp.814-821 (1995)
- [3] G. Ala, E. Francomano, A. Tortorici, E. Toscano, F. Viola, J. Comput. Appl. Math. 191, pp.194-205 (2006)
- [4] E. Toscano, G. Di Blasi, A. Tortorici, Appl. Math. Comput. 218, pp.8906-8916 (2012)
- [5] G. M. Zhang, R. C. Batra, Comput. Mech. 34, pp.137-146 (2004)