

目次

1	序論	2
2	理論	2
2.1	空間離散化と基底関数の定義	2
2.2	シュレーディンガー方程式の行列表示と弱形式	3
2.3	微分行列 D_{ij} の導出と数値計算	5
2.4	V_{ij} の対角性	7
2.5	S_{ij} の対角性	7
3	結果	8
4	結論	12
5	謝辞	13

1 序論

原子・分子を含む量子系の数値計算において、標準的な有限差分法 (Finite Difference Method) を用いる場合、原子核近傍におけるクーロン相互作用に起因する波動関数の急激な変化と、遠方まで広がる波動関数を記述するためには、膨大な数の格子点が必要となる。これは計算量の増大を招き、より複雑な系や高次元系への適用において大きな障壁となっている。

本研究では、このような課題を解決するための手法として、有限要素法 (Finite Element Method) と離散変数表示法 (Discrete Variable Representation) を組み合わせた有限要素離散変数表示法 (FE-DVR: Finite Element Discrete Variable Representation) を採用する。本手法は、空間を複数の要素に分割して定義する有限要素法の特性により、波動関数の変化が激しい原子核近傍には密なメッシュを、変化の緩やかな遠方には粗いメッシュを配置することが可能になる。これに加え、各要素内における基底関数として Gauss-Lobatto 形状関数を用いる離散変数表示法の利点を活かすことで、ハミルトニアンにおけるポテンシャル項をガウス数値積分に基づき対角行列として近似できる。その結果、本手法はグリッドの配置の柔軟性を維持しつつ、行列演算に伴う計算コストを低減することが可能となっている。

本論文では、有限要素離散変数表示法を用いた周期境界条件での自由粒子の固有値問題の数値計算を行い、有限差分法との比較および精度の変化について調べる。

なお本研究における計算プログラムは、生成 AI (Google Gemini 3) を用いて「FEDVR 法に基づく周期境界条件下の自由粒子固有値問題を解くコード」というプロンプトから生成したものである。得られた固有値および波動関数については、解析解と一致することを確認した。また、プログラム内に実装された数式およびその導出過程についても検証を行った。

2 理論

2.1 空間離散化と基底関数の定義

本研究では、物理座標 $x \in [-L, L]$ を N_E 個の有限要素に分割する。各要素 $[x_e, x_{e+1}]$ は、局所座標 $\xi \in [-1, 1]$ へ以下の線形写像によって変換される。

$$x(\xi) = \frac{x_{e+1} + x_e}{2} + \xi \frac{x_{e+1} - x_e}{2}, \quad J_e = \frac{dx}{d\xi} = \frac{x_{e+1} - x_e}{2} \quad (1)$$

ここで、 J_e は座標変換に伴うヤコビアンである。各要素内のグリッド点 (節点) として、両端点 $\xi = \pm 1$ およびルジャンドル多項式の微分 $dP_{N_G}(\xi)/d\xi = 0$ の解である内部点を含む、計 $N_G + 1$ 個の Gauss-Lobatto 点を採用する。これらの節点 ξ_i を用いて、基底関数 $\phi_i(\xi)$, $\phi_i^*(\xi)$ を以下のラグランジュ補間多項式として定義する。

$$\phi_i^*(\xi) = \prod_{i \neq k}^{N_G} \frac{\xi - \xi_k}{\xi_i - \xi_k} \quad (2)$$

$$\phi_j(\xi) = \prod_{j \neq k}^{N_G} \frac{\xi - \xi_k}{\xi_j - \xi_k} \quad (3)$$

2.2 シュレーディンガー方程式の行列表示と弱形式

波動関数 ψ_j を基底関数 $\phi_j(x)$ の重ね合わせで近似する

$$\psi_j \approx \sum_j c_j \phi_j(x) \quad (4)$$

これをシュレーディンガー方程式に代入すると

$$H\psi_j = E\psi_j \quad (5)$$

$$H\left(\sum_j c_j \phi_j(x)\right) = E\left(\sum_j c_j \phi_j(x)\right) \quad (6)$$

$$\sum_j c_j H\phi_j(x) = E \sum_j c_j \phi_j(x) \quad (7)$$

左から $\phi_i^*(x)$ をかけて $-L$ から L まで積分すると

$$\int_{-L}^L \phi_i^*(x) \left[\sum_j c_j H\phi_j(x) \right] dx = \int_{-L}^L \phi_i^*(x) \left[E \sum_j c_j \phi_j(x) \right] dx \quad (8)$$

$$\sum_j c_j \left[\int_{-L}^L \phi_i^*(x) H\phi_j(x) dx \right] = E \sum_j c_j \left[\int_{-L}^L \phi_i^*(x) \phi_j(x) dx \right] \quad (9)$$

$$\sum_j H_{ij} c_j = E \sum_j S_{ij} c_j \quad (10)$$

$$\sum_j (T_{ij} + V_{ij}) c_j = E \sum_j S_{ij} c_j \quad (11)$$

左辺の $\int_{-L}^L \phi_i^*(x) H\phi_j(x) dx$ を行列要素 H_{ij} , 右辺の $\int_{-L}^L \phi_i^*(x) \phi_j(x) dx$ を行列要素 S_{ij} とする.

$$H_{ij} = T_{ij} + V_{ij} \quad (12)$$

$$T_{ij} = \int_{-L}^L \phi_i^*(x) T\phi_j(x) dx \quad (13)$$

$$= \int_{-L}^L \phi_i^*(x) \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \right) \phi_j(x) dx \quad (14)$$

$$= \sum_{e=1}^{N_E} \left(-\frac{1}{2} \int_{x_e}^{x_{e+1}} \phi_i^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \phi_j(x) dx \right) \quad (15)$$

$$= -\frac{1}{2} \left(\int_{x_1}^{x_2} \phi_i^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \phi_j(x) dx + \int_{x_2}^{x_3} \phi_i^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \phi_j(x) dx + \dots \right. \\ \left. + \int_{x_{N_E-1}}^{x_{N_E}} \phi_i^*(x) \frac{d^2}{dx^2} \phi_j(x) dx \right) \quad (16)$$

$$(17)$$

運動エネルギー項の計算において、2階微分の演算を含む行列要素に部分積分を適用して弱形式へと変形する。

$$T_{ij} = -\frac{1}{2} \left(\left[\phi_i^* \frac{d\phi_j}{dx} \right]_{x_1}^{x_2} - \int_{x_1}^{x_2} \frac{d\phi_i^*}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx + \left[\phi_i^* \frac{d\phi_j}{dx} \right]_{x_2}^{x_3} - \int_{x_2}^{x_3} \frac{d\phi_i^*}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx + \dots \right. \\ \left. + \left[\phi_i^* \frac{d\phi_j}{dx} \right]_{x_{NE-1}}^{x_{NE}} - \int_{x_{NE-1}}^{x_{NE}} \frac{d\phi_i^*}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx \right) \quad (18)$$

$$= -\frac{1}{2} \left(\phi_i^*(x_2) \frac{d\phi_j(x_2)}{dx} - \phi_i^*(x_1) \frac{d\phi_j(x_1)}{dx} - \int_{x_1}^{x_2} \frac{d\phi_i^*}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx \right. \\ \left. + \phi_i^*(x_3) \frac{d\phi_j(x_3)}{dx} - \phi_i^*(x_2) \frac{d\phi_j(x_2)}{dx} - \int_{x_2}^{x_3} \frac{d\phi_i^*}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx + \dots \right. \\ \left. + \phi_i^*(x_{NE}) \frac{d\phi_j(x_{NE})}{dx} - \phi_i^*(x_{NE-1}) \frac{d\phi_j(x_{NE-1})}{dx} - \int_{x_{NE-1}}^{x_{NE}} \frac{d\phi_i^*}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx \right) \quad (19)$$

研究では周期的境界条件 $\phi(x_1) = \phi(x_{NE+1})$ を課すことで境界項を消去し、最終的に以下の形式を得る。

$$T_{ij} = -\frac{1}{2} \left(- \int_{x_1}^{x_2} \frac{d\phi_i^*}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx \right. \\ \left. - \int_{x_2}^{x_3} \frac{d\phi_i^*}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx - \dots \right. \\ \left. - \int_{x_{NE-1}}^{x_{NE}} \frac{d\phi_i^*}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx \right) \quad (20)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{e=1}^{N_E} \int_{x_e}^{x_{e+1}} \frac{d\phi_i^*}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx \quad (21)$$

$x \in [x_e, x_{e+1}]$ から $\xi \in [-1, 1]$ に写像させると

$$x(\xi) = \frac{x_{e+1} + x_e}{2} + \xi \frac{x_{e+1} - x_e}{2} \quad (22)$$

$$J_e = \frac{dx}{d\xi} = \frac{x_{e+1} - x_e}{2} \quad (23)$$

$$\frac{d\phi_i^*}{dx} = \frac{d\phi_i^*}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \frac{1}{J_e} \frac{d\phi_i^*}{d\xi} \quad (24)$$

$$\frac{d\phi_j}{dx} = \frac{d\phi_j}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} = \frac{1}{J_e} \frac{d\phi_j}{d\xi} \quad (25)$$

$$T_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{e=1}^{N_E} \int_{x_e}^{x_{e+1}} \frac{d\phi_i^*}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx \quad (26)$$

$$T_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{e=1}^{N_E} \int_{-1}^1 \frac{1}{J_e} \frac{d\phi_i^*}{d\xi} \frac{1}{J_e} \frac{d\phi_j}{d\xi} J_e d\xi \quad (27)$$

Gauss-Lobatto 求積法 (Gauss-Lobatto Quadrature)[1] より、

$$\int_{-1}^1 f(\xi) d\xi = \sum_{k=0}^{N_G} \omega_k f(\xi_k) \quad (28)$$

が成り立つので,

$$T_{ij} = \frac{1}{2J_e} \sum_{e=1}^{N_E} \int_{-1}^1 \frac{d\phi_i^*}{d\xi} \frac{d\phi_j}{d\xi} d\xi \quad (29)$$

$$\approx \frac{1}{2J_e} \sum_{e=1}^{N_E} \sum_{k=0}^{N_G} \omega_k \left[\frac{d\phi_i^*}{d\xi} \right]_{\xi=\xi_k} \left[\frac{d\phi_j}{d\xi} \right]_{\xi=\xi_k} \quad \left(\omega_k = \frac{2}{N_G(N_G+1)P_{N_G}^2(\xi_k)} \right) \quad (30)$$

$$= \frac{1}{2J_e} \sum_{e=1}^{N_E} \sum_{k=0}^{N_G} \omega_k D_{ki} D_{kj} \quad \left(\omega_k = \frac{2}{N_G(N_G+1)P_{N_G}^2(\xi_k)} \right) \quad (31)$$

2.3 微分行列 D_{ij} の導出と数値計算

次に、微分行列 $D_{ki} D_{kj}$ を P_{N_G} を用いた形に変形する。まず、基底関数を $Q(\xi)$ を用いて表す。

$$Q(\xi) = (1 - \xi^2) P'_{N_G}(x) \quad (32)$$

$$Q(\xi) = C(\xi - \xi_0)(\xi - \xi_1) \cdots (\xi - \xi_{N_G}) = C \prod_{k=0}^{N_G} (\xi - \xi_k) \quad (33)$$

$$\prod_{k=0}^{N_G} (\xi - \xi_k) = \frac{Q(\xi)}{C} \quad (34)$$

$$\text{分子} = \prod_{k=0, k \neq i}^{N_G} (\xi - \xi_k) = \frac{Q(\xi)}{C(\xi - \xi_i)} \quad (35)$$

$Q(\xi_i) = 0$, 微分の定義より,

$$Q'(\xi_i) = \lim_{\xi \rightarrow \xi_i} \frac{Q(\xi) - Q(\xi_i)}{\xi - \xi_i} = \lim_{\xi \rightarrow \xi_i} \frac{Q(\xi)}{\xi - \xi_i} \quad (36)$$

分母は、分子に $\xi = \xi_i$ を代入した式であるが、不定形になってしまうので、ロピタルの定理を用いる。

$$\text{分母} = \lim_{\xi \rightarrow \xi_i} \frac{Q(\xi)}{C(\xi - \xi_i)} = \frac{Q'(\xi_i)}{C} \quad (37)$$

$$\phi_i(\xi) = \prod_{i \neq k}^{N_G} \frac{\xi - \xi_k}{\xi_i - \xi_k} = \frac{\frac{Q(\xi)}{C(\xi - \xi_i)}}{\frac{Q'(\xi_i)}{C}} = \frac{Q(\xi)}{Q'(\xi_i)(\xi - \xi_i)} \quad (38)$$

$$\phi_j(\xi) = \prod_{j \neq k}^{N_G} \frac{\xi - \xi_k}{\xi_j - \xi_k} = \frac{\frac{Q(\xi)}{C(\xi - \xi_j)}}{\frac{Q'(\xi_j)}{C}} = \frac{Q(\xi)}{Q'(\xi_j)(\xi - \xi_j)} \quad (39)$$

$$\frac{d\phi_i(\xi)}{d\xi} = \frac{Q'(\xi)Q'(\xi_i)(\xi - \xi_i) - Q(\xi)Q'(\xi_i)}{\{Q'(\xi_i)(\xi - \xi_i)\}^2} \quad (40)$$

$$= \frac{1}{Q'(\xi_i)} \frac{Q'(\xi)(\xi - \xi_i) - Q(\xi)}{(\xi - \xi_i)^2} \quad (41)$$

$$D_{ki} = \frac{d\phi_i(\xi_k)}{d\xi} = \frac{1}{Q'(\xi_i)} \frac{Q'(\xi_k)(\xi_k - \xi_i) - Q(\xi_k)}{(\xi_k - \xi_i)^2} \quad (42)$$

$Q(\xi_k) = 0$ より,

$$D_{ki} = \frac{Q'(\xi_k)}{Q'(\xi_i)} \frac{1}{\xi_k - \xi_i} \quad (43)$$

$$\begin{aligned} Q'(\xi) &= \frac{d}{d\xi} [(1 - \xi^2)P'_{N_G}(\xi)] \\ &= (1 - \xi^2)P''_{N_G}(\xi) - 2\xi P'_{N_G}(\xi) \end{aligned} \quad (44)$$

$$(45)$$

ルジャンドルの微分方程式 [2] を利用すると

$$(1 - \xi^2)P''_{N_G}(\xi) - 2\xi P'_{N_G}(\xi) + N_G(N_G + 1)P_{N_G}(\xi) = 0 \quad (46)$$

$$Q'(\xi) = -N_G(N_G + 1)P_{N_G}(\xi) \quad (47)$$

D_{ki} に $Q'(\xi) = -N_G(N_G + 1)P_{N_G}(\xi)$ を代入する

$$D_{ki} = \frac{P_{N_G}(\xi_k)}{P_{N_G}(\xi_i)} \frac{1}{\xi_k - \xi_i}, (k \neq i) \quad (48)$$

同様にして

$$D_{kj} = \frac{P_{N_G}(\xi_k)}{P_{N_G}(\xi_j)} \frac{1}{\xi_k - \xi_j}, (k \neq j) \quad (49)$$

$k = i$ のとき, ロピタルの定理を用いる.

$$\frac{d\phi_k(\xi)}{d\xi} = \frac{1}{Q'(\xi_k)} \frac{Q'(\xi)(\xi - \xi_k) - Q(\xi)}{(\xi - \xi_k)^2} \quad (50)$$

$$D_{kk} = \lim_{\xi \rightarrow \xi_k} \frac{1}{Q'(\xi_k)} \frac{Q'(\xi)(\xi - \xi_k) - Q(\xi)}{(\xi - \xi_k)^2} \quad (51)$$

$$= \lim_{\xi \rightarrow \xi_k} \frac{1}{Q'(\xi_k)} \frac{\frac{d}{d\xi}[Q'(\xi)(\xi - \xi_k) - Q(\xi)]}{\frac{d}{d\xi}(\xi - \xi_k)^2} \quad (52)$$

$$= \lim_{\xi \rightarrow \xi_k} \frac{1}{Q'(\xi_k)} \frac{Q''(\xi)(\xi - \xi_k)}{2(\xi - \xi_k)} \quad (53)$$

$$= \frac{Q''(\xi_k)}{2Q'(\xi_k)} \quad (54)$$

$$= \frac{1}{2} \times \frac{-N_G(N_G + 1)P'_{N_G}(\xi_k)}{-N_G(N_G + 1)P_{N_G}(\xi_k)} \quad (55)$$

$$= \frac{P'_{N_G}(\xi_k)}{2P_{N_G}(\xi_k)}, (k = i) \quad (56)$$

ルジャンドル多項式 $P_k(\xi)$ とその微分 $P'_k(\xi)$ は漸化式 [2] により求める.

$$(k + 1)P_{k+1}(\xi) = (2k + 1)\xi P_k(\xi) - kP_{k-1}(\xi) \quad (57)$$

$$(\xi^2 - 1)P'_k(\xi) = k(\xi P_k(\xi) - P_{k-1}(\xi)) \quad (58)$$

$$\text{右端 } (k = i = N_G, \xi = 1) : P_{N_G}(1) = 1 \quad (59)$$

$$P'_{N_G}(1) = \frac{N_G(N_G + 1)}{2} \quad (60)$$

$$D_{N_G N_G} = \frac{P'_{N_G}(\xi_k)}{2P_{N_G}(\xi_k)} = \frac{\frac{N_G(N_G+1)}{2}}{2 \times 1} = \frac{N_G(N_G + 1)}{4} \quad (61)$$

$$\text{左端 } (k = i = 0, \xi = -1) : P_{N_G}(-1) = (-1)^{N_G} \quad (62)$$

$$P'_{N_G}(-1) = (-1)^{N_G-1} \frac{N_G(N_G+1)}{2} \quad (63)$$

$$D_{00} = \frac{P'_{N_G}(\xi_k)}{2P_{N_G}(\xi_k)} = \frac{(-1)^{N_G-1} \frac{N_G(N_G+1)}{2}}{2 \times (-1)^{N_G}} = -\frac{N_G(N_G+1)}{4} \quad (64)$$

このようにして微分行列をルジャンドル多項式であらわすことができる。次に要素内の内部点 $dP_{N_G}(\xi)/d\xi = 0$ を求めるために、作成したプログラムではニュートン法 [3] により、

$$x_{new} = x - \frac{P'_{N_G}}{P''_{N_G}} \quad (65)$$

を計算して求めることができる。

2.4 V_{ij} の対角性

V_{ij} は Gauss-Robatto 点を用いたラグランジュ補完多項式を基底関数とすることにより次のように変形することができる。

$$V_{ij} = \int_{-L}^L \phi_i^*(x) V \phi_j(x) dx \quad (66)$$

$$= \sum_{e=1}^{N_E} \int_{-1}^1 \phi_i^* V \phi_j \cdot J_e d\xi \quad (67)$$

$$\approx J_e \sum_{e=1}^{N_E} \sum_{k=0}^{N_G} \omega_k \phi_i^*(\xi_k) V \phi_j(\xi_k) \quad (68)$$

V_{ij} は対角行列に重みとヤコビアンをかけた行列となる。

2.5 S_{ij} の対角性

行列 S_{ij} についても同様に局所座標へ写像し、求積法を適用する。

$$S_{ij} = \int_{-L}^L \phi_i^*(x) \phi_j(x) dx \quad (69)$$

$$= \sum_{e=1}^{N_E} \int_{-1}^1 \phi_i^* \phi_j \cdot J_e d\xi \quad (70)$$

$$\approx J_e \sum_{e=1}^{N_E} \sum_{k=0}^{N_G} \omega_k \phi_i^*(\xi_k) \phi_j(\xi_k) \quad (71)$$

基底関数 $\phi_i^*(\xi_k) \phi_j(\xi_k)$ はラグランジュ補間多項式であり、以下の性質を持っている。

$$\phi_i^*(\xi_k) = \delta_{ik} \begin{cases} 1 & (i = k \text{ のとき}) \\ 0 & (i \neq k \text{ のとき}) \end{cases} \quad (72)$$

よって、 $i = j$ の場合 $k = i$ のとき

$$S_{ij} \approx J_e \cdot \omega_i \cdot 1 \cdot 1 = \omega_i \cdot J_e \quad (73)$$

したがって、 S_{ij} は対角行列となる。このようにして GL 点を用いた FE-DVR 法では、ポテンシャル行列と S_{ij} が対角行列となるため、行列演算の計算量を減らすことができる。

3 結果

一次元周期境界条件下におけるポテンシャルのない自由粒子系について、有限差分法および FEDVR により固有値を計算した。計算には $\hbar = m = 1$ とする原子単位系を用いた。固有値の解析解は

$$E_n = \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi n}{2L} \right)^2 \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots) \quad (74)$$

で与えられる。以下では領域分割数 $N = 900$ 、物理座標の範囲 $[-50, 50]$ における解析解と数値計算結果との比較を示す。基底数は 10、要素数を 90 で計算した。

表 1: 計算されたエネルギーと理論値の比較

n	Theoretical E	E_{FDM}	E_{FEDVR}
0	0	-9.668052852833E-15	-2.876431731716E-13
1	0.001973920880	0.00197391286	0.001973920879
1	0.001973920880	0.00197391286	0.001973920880
2	0.007895683520	0.00789555525	0.007895683520
2	0.007895683520	0.00789555525	0.007895683520
3	0.017765287921	0.01776463854	0.017765287921
3	0.017765287921	0.01776463854	0.017765287921
4	0.031582734083	0.03158068173	0.031582734083
4	0.031582734083	0.03158068173	0.031582734083
5	0.049348022005	0.04934301145	0.049348022004
5	0.049348022005	0.04934301145	0.049348022005
6	0.071061151687	0.07105076199	0.071061151687
6	0.071061151687	0.07105076199	0.071061151687

表 2: 計算されたエネルギーと理論値の比較

n	Theoretical E	E_{FDM}	E_{FEDVR}
0	0	-9.668052852833E-15	-2.876431731716E-13
1	0.001973920880	0.00197391286	0.001973920879
1	0.001973920880	0.00197391286	0.001973920880
2	0.007895683520	0.00789555525	0.007895683520
2	0.007895683520	0.00789555525	0.007895683520
3	0.017765287921	0.01776463854	0.017765287921
3	0.017765287921	0.01776463854	0.017765287921
4	0.031582734083	0.03158068173	0.031582734083
4	0.031582734083	0.03158068173	0.031582734083
5	0.049348022005	0.04934301145	0.049348022004
5	0.049348022005	0.04934301145	0.049348022005
6	0.071061151687	0.07105076199	0.071061151687
6	0.071061151687	0.07105076199	0.071061151687

領域分割数 $N = 900$ において固有値を比較したところ、基底状態 ($n=0$) では理論値 0 に対し、FDM および FEDVR の両手法においてそれぞれ 10^{-15} および 10^{-13} オーダーの値となった。第一励起状態 ($n = 1$) 以上に注目すると、FDM の計算値が有効数字約 6 桁の一致に留まるのに対し、FEDVR は有効数字約 10~11 桁にわたり理論値と一致している。

次に、分割数 $N = 900$ から $N = 4500$ までの計算時間を計測した。

表 3: グリッド数 N に対する FDM 法と FEDVR 法の計算時間

N	FDM (s)	FEDVR (s)
900	1.063	1.402
1800	9.341	13.828
2700	25.364	45.953
3600	74.683	110.354
4500	141.690	221.598

最後に、FEDVR 法におけるグリッド数 N に対するエネルギー ($n=1$) の相対誤差を計算する。相対誤差は

以下の式より計算した.

$$\text{相対誤差} = \frac{|\text{数値解} - \text{解析解}|}{\text{解析解}} \quad (75)$$

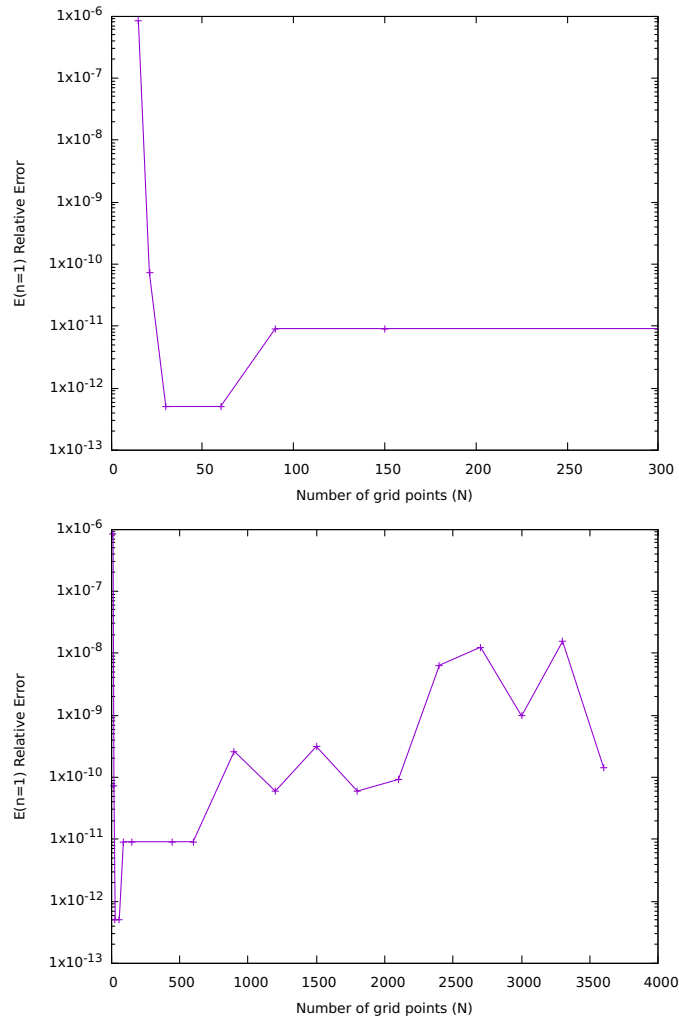


図 1: FEDVR 法におけるグリッド数 N に対するエネルギー ($n=1$) の相対誤差

分割数 $N = 30, 60$ において相対誤差が最小値 (約 10^{-13}) をとることが確認された. $N < 600$ の領域では基底関数の増大に伴い精度が向上するが、 $N \geq 900$ 以降では逆に誤差が増大する傾向が見られた. これは手法の近似誤差よりも、計算過程での丸め誤差の影響が支配的になったためであると考えられる.

次に、要素の間隔を不等間隔にして、等間隔の場合と理論値との比較をする. 基底の数は 10, 要素数を 3 で計算した

表 4: グリッド数が不等間隔の場合のエネルギーと理論値の比較

主量子数 n	理論値 E	等間隔 $(-50,-16.666\dots,16.666\dots,50)E$	一致桁数	不等間隔 $(-50,-10,10,50)E$	一致桁数	不等間隔 $(-50,-1,1,50)E$	一致桁数
0	0	-1.019512870352E-16		-1.157301151646E-17		5.805816323162E-15	
1	0.0019739208802179	0.001973920880218	12	0.001973920880218	12	0.001973920880217	13
1	0.0019739208802179	0.001973920880218	12	0.001973920880218	12	0.001973920880230	11
2	0.0078956835208715	0.007895683520871	13	0.007895683520832	11	0.007895683513845	8
2	0.0078956835208715	0.007895683520871	13	0.007895683520832	10	0.007895683527173	9
3	0.0177652879219608	0.017765287898060	8	0.017765287715080	8	0.017765258469050	6
3	0.0177652879219608	0.017765287898060	9	0.017765287715080	7	0.017765313654760	5
4	0.0315827340834859	0.031582733541680	7	0.031582573617640	5	0.031575548884070	3
4	0.0315827340834859	0.031582733541680	7	0.031582573617640	5	0.031588684288220	4
5	0.0493480220054468	0.049347968432460	4	0.049334951542370	3	0.049032995159210	2
5	0.0493480220054468	0.049347968432460	4	0.049334951542370	3	0.049588354704840	2

自由粒子での波動関数は sin 波なので、等間隔に要素を配置した場合が最も理論値と桁数が一致した。

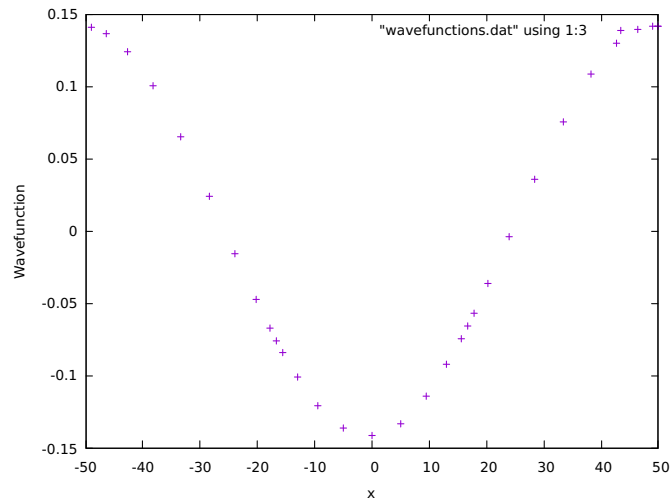


図 2: 等間隔 $(-50,-16.666\dots,16.666\dots,50)$ での波動関数

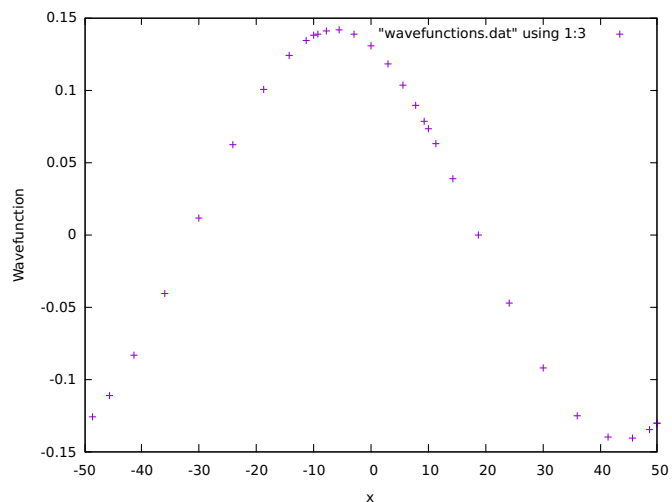


図 3: 不等間隔 $(-50, -10, 10, 50)$ での波動関数

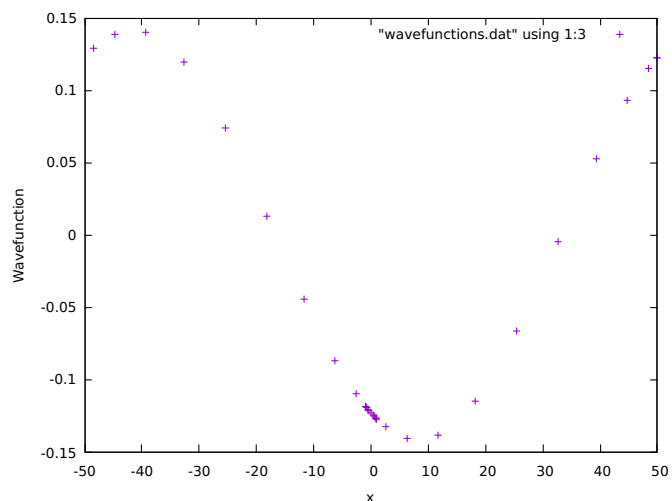


図 4: 不等間隔 $(-50, -1, 1, 50)$ での波動関数

4 結論

本研究では、有限要素離散変数表示法 (FE-DVR) に基づく一次元数値計算プログラムを生成 AI(Google Gemini) で生成し、標準的な有限差分法 (FDM) との比較を通じて、その数値的な有効性と計算効率の優位性を確かめた。自由粒子系を対象とした数値実験の結果、分割数 $N = 900$ において有限差分法が有効数字約 6 桁程度の精度に留まるのに対し、FE-DVR は有効数字約 10~11 桁までの高い精度で解析解に近づき、同一の計算時間条件下において高い計算効率を有することを確認した。また、相対誤差の N 依存性の評価から、 $N = 30, 60$ 付近で相対誤差が最小値 (約 10^{-13}) をとる計算限界の存在を確認した。最後に、要素を不等間隔

に配置して固有値を求めた結果, 等間隔に近いほど理論値と一致した. これはポテンシャルのない自由粒子の場合, 波動関数が sin 波となるので, 点を密集させても効果がないからである. 今後の展望として, 本手法を 3 次元計算への拡張し, 水素原子・分子における強レーザー場などの物理現象について高精度に計算できるかどうか確かめることが挙げられる.

5 謝辞

本研究を進めるに当たり, 指導教官として終始適切な助言と丁寧な指導をして下さった森下先生に深謝致します. また同研究室の長谷川先生には, 本研究の遂行にあたり多大なご助言, ご協力頂きました. ここに感謝の意を表します.

参考文献

- [1] Rescigno, T. N., McCurdy, C. W. (2000). "Numerical grid methods for quantum-mechanical scattering problems." *Physical Review A*, 62(3), 032706.
- [2] 小野寺嘉孝 (1991) 「物理のための応用数学」 第 5 版 裳華房 (pp.77-84).
- [3] Quarteroni, Alfio; Saleri, Fausto (2003), *Scientific Computing with MATLAB*, Texts in computational science and engineering, 2, Springer, p. 66, ISBN 9783540443636.