

氏名	福原照悟	学籍番号	2210553
題目	有限要素離散変数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		

要旨	指導教員氏名	森下亨
----	--------	-----

本論文では、原子・分子を含む量子系の数値計算において計算コストを減少させることができる、有限要素離散変数表示法（FE-DVR）を用いて、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った。標準的な有限差分法（FDM）では、原子核近傍における波動関数の急激な変化や遠方まで広がる波動関数を記述するために膨大な格子点が必要となり、これが高次元系への適用における大きな障壁となっている。本研究で採用した FE-DVR 法は、空間を要素ごとに分割してメッシュ密度を柔軟に調整できる有限要素法の特性と、ポテンシャル項を対角行列として近似できる離散変数表示法の利点を組み合わせており、計算コストを抑えつつ高い柔軟性を維持できるという特徴を持つ。本研究におけるプログラムは生成 AI（Google Gemini 3）によって生成し、周期境界条件下における自由粒子の固有値問題を対象に FDM と解析解との比較を行った。また、プログラム内に実装された数式および導出過程について検証を行った。

理論面においては、物理座標を複数の有限要素に分割し、局所座標への線形写像とヤコビアンを用いることで計算の定式化を行った。各要素内の節点にはルジャンドル多項式の微分から導かれる Gauss-Lobatto 点を用い、これらをラグランジュ補間多項式の基底関数として定義した。シュレーディンガー方程式の解法にあたっては、運動エネルギー項を部分積分により弱形式へと変形し、周期境界条件を課すことで境界項を消去した。また、Gauss-Lobatto 求積法の性質を利用することで、オーバーラップ行列およびポテンシャル行列は対角行列となり、計算コストの低減に寄与している。

数値計算の結果、領域分割数  $N=900$  における自由粒子の固有値計算において、FE-DVR 法は FDM を上回る精度を示した。具体的には、第一励起状態のエネルギーにおいて、FDM の精度が有効数字約 6 桁に留まったのに対し、FE-DVR 法は有効数字約 10~11 桁にわたり解析解と一致した。計算時間の計測においても、同一の条件下で FE-DVR 法が優れた計算効率を持つことが確認された。また、相対誤差の  $N$  依存性を調査したところ、分割数  $N=30, 60$  付近で誤差が最小値（約  $10^{-13}$ ）となり、それ以上の分割数では計算手法の近似誤差よりも計算機上の丸め誤差が支配的になるという計算限界の存在が明らかになった。