

逐次伝達法を拡張する弱形式離散化スキーム

Weak-Form Discretization Scheme for Extending Recursive Transfer Method

加藤 初弘* 加藤 初儀†
Hatsuhiro Kato and Hatsuyoshi Kato

Abstract

Numerov 法は原子中にある電子状態の動径成分を解析する際に 2 階の微分方程式を離散化する方法として利用されていた. この方法で得られる 2 階差分方程式をもとに逐次伝達法 (RTM) が開発され、散乱問題の解析に有効であることが明らかになっている. しかし, Numerov 法による離散化の精度を向上させると, 得られる差分方程式の階数が増加するために RTM の適用が難しくなる問題があった. そこで, 離散化精度を向上させても 2 階差分方程式を導出することができる新しい手段として弱形式離散化スキームを提案する. このスキームに従うと, RTM による散乱問題の解析精度を向上させることができるばかりか, RTM を従来の枠を超えてさまざまなシステムに適用できるようになる.

1 まえがき

原子における電子状態の動径依存を解析するための数値計算法として Numerov 法が開発された [1, 2]. この方法は, トンネル現象など 1 次元的なシステムの解析 [3, 4] や電極間の電子伝導を解析する方法 [5, 6] として発展し逐次伝達法 (RTM) [7] と呼ばれるようになった.

光ファイバやマイクロ波の分野では, RTM と類似した数値計算法としてビーム伝搬法 (BPM) [10, 11] やこれらを発展させた手法 [12, 13, 14] などが独自に発達した. これらの手法と比較した場合, RTM の特徴は 2 階差分方程式を基礎にしており解析精度に関する検討

[1, 4] が進んでいることをあげることができる. さらに, さまざまなシステムを散乱ポテンシャルにより考慮でき, 電磁波や弾性波の解析にも有効である [8, 9].

Numerov 法を用いると, 離散化誤差を分割幅の 4 次程度に抑えつつ 2 階微分方程式から 2 階差分法定式化を導出できる. このとき, 得られる差分方程式の階数を増加させると, 離散化による近似の精度を改善することも可能である. しかし, 2 階差分方程式でなければ RTM の適用が困難である. さらに, Numerov 法を適用できる微分方程式の階数が 2 に限られてもいる. 本研究では RTM への応用を前提とした場合に生じるこれらの制限を除くために, 弱形式理論を用いた新しい離散化スキーム, 即ち, 弱形式離散化スキームを提案する.

有限要素法などの定式化にも弱形式理論の枠組みが使用され, 解析領域の全体に渡る積分の形で汎関数が定義されている [15]. しかし, 本研究では離散化の目的が RTM を適用できる 2 階差分方程式の導出にあるので, 積分領域を空間軸上の離散点を中心とした狭い範囲に限った. このことにより, 連続する 3 つの離散点における場の変数の値を用いて汎関数を表現でき, 2 階差分方程式を導出することが可能となった. さらに, 場の変数を補間する代数多項式の次数を高くすることで, 連続システムを近似する精度を改善することができた. これらのことを解析解が知られている散乱問題を例に論証する.

2 弱形式離散化

Helmholtz 型の微分方程式を一般化した方程式を例に, 弱形式理論の枠組みの中で 2 階の差分方程式を導出す

*山梨大学大学院, 400-8511 甲府市武田 4-3-11.

†苫小牧工業高等専門学校, 059-1275 苫小牧市宇錦岡 443.

る手法を示す。

2.1 微分方程式の弱形式表現

弱形式理論に従って定式化できる典型でありさまざまな現象を記述できる支配方程式でもある

$$u'' + v(x)u = 0 \quad (1)$$

を考える。ここで、 x は空間変数、 $u(x)$ は場の変数、 $'$ は x による微分を表す。関数 $v(x)$ は一種のポテンシャル関数であり $v(x) = k^2$ (定数) の場合、この微分方程式は Helmholtz 型となる。

離散化スキームは、空間軸を分割幅 h を用いて

$$x = x_{\text{in}} + hn \quad (2)$$

と離散化し、これらの離散点における場の変数の値 $u(x_n)$ などを用いて微分方程式 (1) を近似できる差分方程式を導出することである。ここに、 n は離散化した空間の指標であり分割数を N とすると、 $n = 0, 1, 2, \dots, N$ と変化する。また、解析領域が区間 $[x_{\text{in}}, x_{\text{out}}]$ にあるとすると、分割幅 h は $h = (x_{\text{in}} - x_{\text{out}})/N$ と表現できる。

弱形式理論の処方箋に従って、(1) の左辺に任意関数 $w(x)$ を乗じ空間変数 x で積分を行うとともに部分積分を実施する。この結果、次の汎関数

$$F_n[w, u] = \int_{x_n - \theta h}^{x_n + \theta h} \{-w' u' + w v(x) u\} dx \quad (3)$$

が得られる。ただし、部分積分を行った際に現れる境界値 $u'(x_n \pm \theta h)$ を消去するために、任意関数 $w(x)$ に境界条件

$$w(x_n \pm \theta h) = 0 \quad (4)$$

を課した。積分領域を離散化点 x_n を中心とした前後 θh の範囲に限った理由は、パラメータ θ の選定の自由度を利用して離散化の精度を向上させるためである。なお、パラメータ $\theta (\approx 1)$ の値を選定する方法は、後続の 3.2.1 節に示されている。

汎関数 $F_n[w, u]$ が任意の関数 $w(x)$ に対して零になるという条件 (零値条件)

$$F_n[w, u] = 0, \quad (\forall w) \quad (5)$$

により、微分方程式 (1) を導出することができる。このことから、場の変数 $u(x)$ に課す条件として微分方程式 (1) に替わり零値条件 (5) を用いることが弱形式理論の出発点である [15]。

2.2 2階差分方程式の導出

場の変数などの関数を連続する 3 つの離散点 x_{n-1}, x_n, x_{n+1} における関数値を用いて補間し、汎関数 $F_n[w, u]$ をこれらの離散値で表現する。このようにして得られる離散的な汎関数に対して零値条件を適用することで、3 つの関数値 $u(x_{n-1}), u(x_n), u(x_{n+1})$ などに関する方程式、即ち、2 階の差分方程式を得ることができる。

2.2.1 2次多項式補間を用いた離散化

離散化点 $x = x_n$ の近傍で場の変数 $u(x)$ を関数値 $u(x_n), u(x_{n\pm 1})$ を用いて次のように 2 次の代数多項式で補間する、

$$u(x) = \{\xi_n\}_2^T C_2 \{u(x_{n+p})\}. \quad (6)$$

ここで、 $\{\xi_n\}_2$ は 3 次元の縦ベクトルで、 ξ_n を $\xi_n = x - x_n$ 、 T を転置として、 $\{\xi_n\}_2 = [1, \xi_n, \xi_n^2]^T$ と定義した。また、 $\{u(x_{n+p})\}$ は、指数 p を変化させ生成した縦ベクトル $[u(x_{n-1}), u(x_n), u(x_{n+1})]^T$ を表す省略記号である。行列 C_2 は、 $\xi_n = 0, \pm h$ における補間式の値がそれぞれ関数値 $u(x_n), u(x_{n\pm 1})$ と一致する条件から決定でき

$$C_2 = \begin{bmatrix} 1 & -h & h^2 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & h & h^2 \end{bmatrix}^{-1} \quad (7)$$

となる [15]。

同様に、任意関数 $w(x)$ とポテンシャル関数 $v(x)$ を次の様に補間することができる。

$$w(x) = \{\xi_n\}_2^T C_2 \{w(x_{n+p})\}, \quad (8)$$

$$v(x) = \{\xi_n\}_2^T C_2 \{v(x_{n+p})\} \\ = \sum_{p=-1}^1 N_p(\xi_n) v(x_{n+p}). \quad (9)$$

(9) の右辺に現れる関数 $N_p(\xi_n) (p = 0, \pm 1)$ は、関数値 $v(x_{n+p})$ がどのように $x (\in [x_{n-1}, x_{n+1}])$ での補間値に反映されるかを示す関数であり $N_{-1}(\xi_n) = \{\xi_n\}_2^T C_2 [1, 0, 0]^T$ 、 $N_0(\xi_n) = \{\xi_n\}_2^T C_2 [0, 1, 0]^T$ 、 $N_{+1}(\xi_n) = \{\xi_n\}_2^T C_2 [0, 0, 1]^T$ と定義されている。

補間式 (6), (8), (9) を汎関数 $F_n[w, u]$ の定義式 (3) に代入すると、汎関数を離散化した変数で表現するこ

とができる。その表現式は、 3×3 行列 $A_2, B_2^{(p)}, f_2$ を

$$A_2 = C_2^T \int_{-\theta h}^{\theta h} \frac{d\{\xi_n\}_2}{dx} \frac{d\{\xi_n\}_2^T}{dx} d\xi_n C_2, \quad (10)$$

$$B_2^{(p)} = C_2^T \int_{-\theta h}^{\theta h} \{\xi_n\}_2 N_p(\xi_n) \{\xi_n\}_2^T d\xi_n C_2, \quad (11)$$

$$f_2 = -A_2 + \sum_{p=-1}^1 v(x_{n+p}) B_2^{(p)}, \quad (12)$$

で定義すると、

$$F_n[w, u] = \{w(x_{n+p})\}^T f_2 \{u(x_{n+p})\} \quad (13)$$

となる。

境界条件 (4) より、 $w(x_n \pm h) = r_\theta w(x_n)$ ($r_\theta = \theta^2 - 1/\theta^2$) を得る。従って、 $\{w(x_{n+p})\} = R_\theta w(x_n)$ ($R_\theta = [r_\theta, 1, r_\theta]^T$) と表現できることから、区間 $[x_n - \theta h, x_n + \theta h]$ において任意関数 $w(x)$ を決定する量は $w(x_n)$ である。零値条件 (5) を用いると汎関数の離散表現から 2 階差分方程式

$$c_n u(x_{n-1}) + b_n u(x_n) + a_n u(x_{n+1}) = 0 \quad (14)$$

を導出できる。ここに、係数 c_n, b_n, a_n は

$$c_n = R_\theta^T f_2 [1, 0, 0]^T, \quad (15)$$

$$b_n = R_\theta^T f_2 [0, 1, 0]^T, \quad (16)$$

$$a_n = R_\theta^T f_2 [0, 0, 1]^T \quad (17)$$

と定義されている。この係数は Numerov 法で得られるものと完全には一致していない。しかし、後続する 3.2.1 節に示したようなポテンシャル関数の下では、弱形式離散化スキームと Numerov 法の離散化精度が一致する。

2.2.2 5 次多項式補間を用いた離散化

一般的に補間に用いる代数多項式の次数を高くすると関数を近似する精度を改善することができる。そこで、2 よりも高い次数の多項式による補間を試みる。2 階の差分方程式を導出するという目的から、代数補間を行う量として連続する 3 つの離散点における関数値からなる 2 次元ベクトル $\mathbf{u}(x_{n+p}) = [u(x_{n+p}), u'(x_{n+p})]^T$ ($p = -1, 0, 1$) を考える。このベクトルの代数補間式を

$$\mathbf{u}(x) = \{\xi_n\}_5^T C_5 \{\mathbf{u}(x_{n+p})\} \quad (18)$$

と表現する。ここで、 $\{\mathbf{u}(x_{n+p})\}$ は $p = -1, 0, 1$ と変化させて作る 6 次元縦ベクトル、 $\{\xi_n\}_5$ は $\xi_n (= x - x_n)$ の 5 次以下の単項式からなる 6 次元の縦ベクトル $\{\xi_n\}_5 = [1, \xi_n, \xi_n^2, \xi_n^3, \xi_n^4, \xi_n^5]^T$ であり、

$$C_5 = \begin{bmatrix} 1 & -h & h^2 & -h^3 & h^4 & -h^5 \\ 0 & 1 & -2h & 3h^2 & -4h^3 & 5h^4 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & h & h^2 & h^3 & h^4 & h^5 \\ 0 & 1 & 2h & 3h^2 & 4h^3 & 5h^4 \end{bmatrix}^{-1} \quad (19)$$

と定義されている。同様に任意関数についても 2 次元ベクトル $\mathbf{w}(x) = [w(x), w'(x)]^T$ を導入して

$$\mathbf{w}(x) = \{\xi_n\}_5^T C_5 \{\mathbf{w}(x_{n+p})\} \quad (20)$$

と代数補間する。

任意関数 $w(x)$ には、汎関数 (3) の導出に際して境界条件 (4) が課されていた。これに加えて新たに条件 $w'(x_n \pm \theta h) = 0$ を課す。これらの条件により区間 $[x_{n-1}, x_{n+1}]$ で任意関数の様子を決定する独立な量としてベクトル $\mathbf{w}(x_n)$ の 2 成分を選ぶことができ、 2×2 の行列 $r_{\theta\pm}$ を用いて $\mathbf{w}(x_{n\pm 1}) = r_{\theta\pm} \mathbf{w}(x_n)$ と表現できる。ここで、行列 $r_{\theta\pm}$ の値は

$$r_{\theta+} = \begin{bmatrix} -2\theta^{-2} + 1 & h(\theta^{-4} - 2\theta^{-2} + 1) \\ -4(-\theta^{-4} + \theta^{-2})/h & 1 - 6\theta^{-2} + 5\theta^{-4} \end{bmatrix},$$

$$r_{\theta-} = \begin{bmatrix} -2\theta^{-2} + 1 & -h(\theta^{-4} - 2\theta^{-2} + 1) \\ 4(-\theta^{-4} + \theta^{-2})/h & 1 - 6\theta^{-2} + 5\theta^{-4} \end{bmatrix},$$

である。さらに、 6×2 の行列 $R_\theta = [r_{\theta-}, E_2, r_{\theta+}]^T$ (E_2 は 2×2 単位行列) を導入することで

$$\{\mathbf{u}(x_{n+p})\} = R_\theta \mathbf{u}(x_n) \quad (21)$$

と表現できる。

以上のような表現の変更を伴うが 2.2.1 節と同じ議論により、汎関数 $F_n[w, u]$ に関する零値条件 (5) から

$$c_n \mathbf{u}(x_{n-1}) + b_n \mathbf{u}(x_n) + a_n \mathbf{u}(x_{n+1}) = \mathbf{0}, \quad (22)$$

を得る。ここに、 $\mathbf{0} = [0, 0]^T$ であり、係数 c_n, b_n, a_n は 2×2 行列で 2×2 の零行列 $\mathbf{0}_2$ を用いて

$$c_n = R_\theta^T f_5 [E_2, \mathbf{0}_2, \mathbf{0}_2]^T, \quad (23)$$

$$b_n = R_\theta^T f_5 [\mathbf{0}_2, E_2, \mathbf{0}_2]^T, \quad (24)$$

$$a_n = R_\theta^T f_5 [\mathbf{0}_2, \mathbf{0}_2, E_2]^T, \quad (25)$$

と定義されている。また、 f_5 は (10), (11), (12) において、 $C_2, \{\xi_n\}_2, f_2$ をそれぞれ $C_5, \{\xi_n\}_5, f_5$ と置き換えて得られる 6×6 行列である。

3 散乱問題と離散化精度

2階差分方程式の解が解析的に表現できる場合を利用して、離散化精度が向上するように汎関数の積分領域を決定する。さらに、透過率の厳密な表現が知られているポテンシャル関数を利用して、差分方程式の離散化精度を数値的に評価する。

3.1 逐次伝達法

3.1.1 伝達行列とその逐次関係式

方程式 (14), (22) において場の変数はスカラー $u(x_n)$ あるいは2次元ベクトル $\mathbf{u}(x_n)$ である。以後、これらを代表して Φ_n と表現する。このとき、(14) と (22) をまとめて

$$c_n \Phi_{n-1} + b_n \Phi_n + a_n \Phi_{n+1} = 0 \quad (26)$$

と表すと、係数 c_n, b_n, a_n は場合に応じてスカラーあるいは 2×2 行列である。また、右辺の0は零元あるいは2次元の零ベクトルである。以下の表現は、これらのいずれでも矛盾のない記述を行う。

逐次伝達法は連続する場の変数 Φ_n, Φ_{n+1} の間に

$$\Phi_{n+1} = S_n \Phi_n \quad (27)$$

なる関係があるとする。この S_n は伝達行列 (stepping matrix) と呼ばれる [2]。このとき、(26) を用いることで、 S_n を決定する逐次関係式 (recursion relation)

$$S_{n-1} = -(b_n + a_n S_n)^{-1} c_n \quad (28)$$

が得られる [5, 6, 7]。RTM は S_N の値を与え (28) を用いて全ての n における伝達行列 S_n を求める方法である。 S_N の決定方法は後続の 3.1.2 節において示す。

3.1.2 非散乱領域での伝達行列

領域 $x < x_{\text{in}} (n < 0)$ および $x > x_{\text{out}} (n > N)$ において散乱体が存在しないとすると、進行波がこれら非散乱領域を伝播する。この進行波の波数を k 、 Φ_0 を n に依存しない定数とすると、この進行波を $\Phi_n = e^{ikh_n} \Phi_0$

と表現できる。このとき $\Psi = [\Phi_0, e^{ikh} \Phi_0]^T$ を導入すると (26) から

$$A\Psi + e^{ikh} B\Psi = 0, \quad (29)$$

$$A = \begin{bmatrix} c_n & O \\ O & E \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} b_n & a_n \\ -E & O \end{bmatrix} \quad (30)$$

を導出できる。ここで、 $E(O)$ は Φ_n がスカラーか2次元ベクトルかによって、それぞれ単位元あるいは 2×2 単位行列 E_2 (零元あるいは 2×2 零行列 O_2) である。(29) は一般化固有値問題 [16] の一種であり、 e^{ikh} は固有値、 Ψ あるいは Φ_0 は固有ベクトルである。方程式 (1) が空間を反転する対称操作に関して不変であることから、固有値 e^{ikh} に対して必ず e^{-ikh} も固有値となる。場の変数がスカラー場である場合、固有値 $e^{\pm ikh}$ に対応する進行波の伝達行列 $K_{\pm}$ は位相を増減する因子であり

$$K_{\pm} = e^{\pm ikh} \quad (31)$$

と表現できる。一方、場の変数が2次元ベクトル場である場合、進行波に対応する2つの固有値 $e^{\pm ikh}$ と振幅変調を伴う波に対応する別の2つの固有値 $e^{\pm \eta h}$ がある。これらの固有値に対応する固有ベクトルをそれぞれ Φ_{0t}, Φ_{0m} とすると伝達行列 $K_{\pm}$ を

$$K_{\pm} = [\Phi_{0t}, \Phi_{0m}] \begin{bmatrix} e^{\pm ikh} & 0 \\ 0 & e^{\pm \eta h} \end{bmatrix} [\Phi_{0t}, \Phi_{0m}]^{-1} \quad (32)$$

と表現できる [9]。

3.1.3 散乱問題

領域 $n < 0 (x < x_{\text{in}})$ は非散乱領域であり、ここから x 軸の正の方向に入射波 Φ_{in} が散乱領域に入射されるとする。差分方程式を解く際の都合から、 $n = 0, 1, N (x = x_0, x_1, x_N)$ にも散乱体は無いと仮定し、散乱領域は $1 < n < N$ にあると仮定する。このとき、散乱現象により非散乱領域 $n \leq 1$ と $n \geq N$ にそれぞれ反射波 Φ_{rf} と透過波 Φ_{tr} が現れる。従って、非散乱領域におけるこれらの波動 Φ_n を

$$\Phi_n = \begin{cases} K_+^n \Phi_{\text{in}} + K_-^n \Phi_{\text{rf}}, & (n \leq 1) \\ K_+^{(n-N)} \Phi_{\text{tr}}, & (n \geq N) \end{cases}, \quad (33)$$

と表現できる。散乱波が透過している領域 ($n \geq N$) における波の表現より、

$$S_N = K_+ \quad (34)$$

を導くことができる。この条件式は、入射波が散乱領域を抜けると正の方向に進む波のみが存在していることを表す一種の境界条件である。この境界条件から、逐次関係式 (28) を用いることで、任意の $n(< N)$ に対する伝達行列 S_n を決定することができる。

Φ_1 に関する2つの表現 $\Phi_1 = S_0(\Phi_{\text{in}} + \Phi_{\text{rf}})$ と $\Phi_1 = K_+\Phi_{\text{in}} + K_-\Phi_{\text{rf}}$ が等しいことから、反射波 Φ_{rf} を求めることができ

$$\Phi_{\text{rf}} = -(S_0 - K_-)^{-1}(S_0 - K_+)\Phi_{\text{in}}, \quad (35)$$

を得る。一方、透過波 Φ_{tr} は (27) を繰り返し適用することで

$$\Phi_{\text{tr}} = S_{N-1} \cdots S_2 S_1 S_0 (\Phi_{\text{in}} + \Phi_{\text{rf}}), \quad (36)$$

と表現できる。

スカラー場の場合、散乱波の反射振幅 r および透過振幅 t は $r = \Phi_{\text{rf}}/\Phi_{\text{in}}$, $t = \Phi_{\text{tr}}/\Phi_{\text{in}}$ と表現できる。また、ベクトル場の場合

$$r = \tilde{\Phi}_{0t}^\dagger \Phi_{\text{rf}}, \quad t = \tilde{\Phi}_{0t}^\dagger \Phi_{\text{tr}} \quad (37)$$

で与えられる。ここに、 $\tilde{\Phi}_{0t}$ は $[\Phi_{0t} \Phi_{0m}]^{-1}$ の第1列ベクトル、 $\dagger$ はエルミート共役を表している。なお、反射係数 R および透過係数 T は、それぞれ $R = |r|^2$ および $T = |t|^2$ で定義される。

3.2 補間法の違いによる離散化精度

3.2.1 一様なポテンシャル中での精度

ポテンシャル関数が $v(x) = v_0$ (定数) の場合、連続的なシステムである微分方程式 (1) の解析解を導くことができる。その解は進行波解であり $u(x) = e^{\pm i\sqrt{v_0}x}$ と表現できる。一方、離散的なシステムである2階差分方程式 (26) が有する解析解を求めることも可能である。これらの連続および離散システムでの解を比較することで、差分方程式の解がどれほど正確に連続システムの解を近似しているかということ、即ち、離散化精度を評価することができる。

2次多項式を補間に用いた場合、固有値問題 (29) の固有多項式が2次方程式であることから、固有値 $e^{\pm ikh}$ は $e^{\pm ikh} = (-b_n \pm \sqrt{b_n^2 - 4a_n c_n})/2a_n$ で与えられる。この表現から、波数 k を分割幅 h の冪級数で表現すると

$$k = \sqrt{v_0} + \frac{6\theta^2 - 5}{120}(\sqrt{v_0})^3 h^2 + \frac{-20\theta^2 + 12\theta^4 + 15}{3200}(\sqrt{v_0})^5 h^4 + \cdots \quad (38)$$

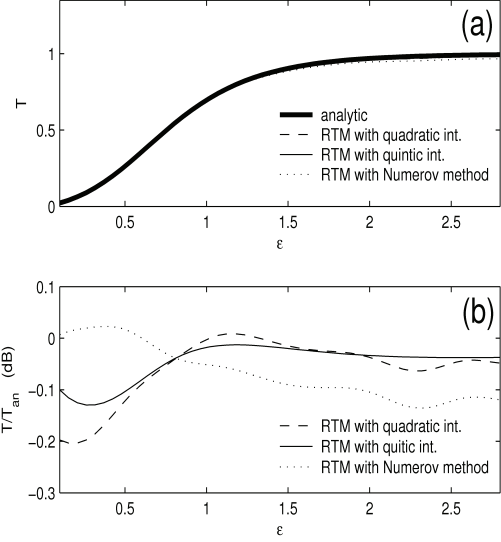


Figure 1: 透過率の解析解 T_{an} と数値解 T の比較. (a) 透過率の ϵ 依存, (b) 数値解 T の解析解 T_{an} との相対比.

となる。右辺第1項は連続システムでの波数であるので、これに続く h の高次項が離散化により生じる誤差を表している。これまで、 θ の値を決定していなかったが、 $\theta = \sqrt{5/6}$ と選ぶと、 h^2 に依存する項が消失する。このとき、誤差即ち $k - \sqrt{v_0}$ の大きさを h^4 の程度に抑えることが可能である。この離散化精度は、Numerov法を用いた場合 [1] と一致している。

5次多項式を用いた場合、固有多項式は4次の代数多項式となり、この場合も代数的に解を求めることが可能である。また、 $\theta = 1$ と選ぶと、

$$k = \sqrt{v_0} + \frac{37}{831600}(\sqrt{v_0})^7 h^6 + \cdots \quad (39)$$

と展開できる。このことは、誤差の大きさを h^6 の程度に抑えることができ、前節の2次多項式を用いた場合よりもさらに離散化の誤差を小さく抑え得ることを示している。

$\theta = 1$ であることは、汎関数の積分領域が離散化した区間 $[x_{n-1}, x_{n+1}]$ の全範囲に渡っていることを示している。この場合、全ての n に関して2階差分方程式を連立させた方程式は、有限要素法で5次の Hermite

要素 [15] を用いて得た連立方程式と類似している。しかし、 $n = 0$ および N の場合に現れる解析領域外での場の値 Φ_{-1} および Φ_{N+1} を処理する手続き、即ち、境界条件の決定が連立 1 次式の導出とは別途に必要である。RTM を用いるとこれらの値を $\Phi_{-1} = S_{-1}^{-1}\Phi_0$ および $\Phi_{N+1} = S_N\Phi_N$ と決定できる。これらの条件は、伝達行列を用いて数値的に実現した完全吸収境界条件 [17] である。

有限要素法に代表されるように、汎関数の積分領域は解析領域の全体に選ばれることが多かった。弱形式離散化では積分領域をパラメータ θ を用いて自由に変更できるようにした。汎関数の積分領域をパラメータで設定しその値を離散化の精度が向上するように決定する手法はこれまでにない新しい提案である。

3.2.2 sech^2 ポテンシャル下での精度

ポテンシャル関数 $v(x)$ が $v(x) = \text{sech}^2(x) - \epsilon$ で与えられた場合、微分方程式 (1) はポテンシャル $\text{sech}^2(x)$ の中で運動するエネルギー ϵ の量子力学的な波動関数が従う方程式である。さらに、このポテンシャルの下で解析的に散乱問題を解くことが可能であり、透過率 T_{an} が

$$T_{\text{an}} = \frac{\sinh^2(\pi\sqrt{\epsilon})}{\sinh^2(\pi\sqrt{\epsilon}) + \cosh^2(\pi\sqrt{3}/2)} \quad (40)$$

で得られることが知られている [4, 18]。この解析式の値と RTM で得られる透過振幅 (37) による値 $T(= |t|^2)$ を比較して Figure 1 に示した。用いたシステムパラメータは次の通りである： $x_{\text{in}} = -7$, $x_{\text{out}} = 7$, $N = 12$, $h = 1.1674$ 。空間軸の分割数 N を大きくすると数値的に得られた値が解析式による値により近づくが、両者の差が比較的大きくなるように N の値をなるべく小さく設定した場合に限って結果を示す。

Figure 1(a) は透過率の ϵ 依存性であり、太い実線が解析式で得られた値である。他の曲線は、差分方程式を導出する際に使用した手法の違いを表している。5 次および 2 次の補間多項式を用いた弱形式離散化スキームによる場合をそれぞれ細線と破線で、Numerov 法を用いた場合を点線で示した。どの離散化法で得られた値も太い実線に近い値を示している。よりよく解析解 T_{an} と数値解 $T(= |t|^2)$ の違いを表示するために比 T/T_{an} を Figure 1(b) に示した。 ϵ が小さな領域では Numerov 法を用いた場合が比較的良好に T_{an} を再現しているが、 ϵ が大きな領域では弱形式離散化スキーム

による 2 つの透過率がよい近似になっている。また、2 次および 5 次の多項式補間による数値解では、次数が高い方が解析解との一致がよい。これは離散化の高精度化を補間多項式の高次化で実現できることを示している。

4 むすび

散乱問題の解析方法である RTM の適用範囲を広げることを目的に、弱形式離散化スキームによる 2 階の差分方程式の導出方法を提案した。さらに、得られた 2 階差分方程式の有効性を RTM による解析精度に注目して検討した。弱形式理論で使用される汎関数の離散化は、これに現れる場の変数などの関数を空間の離散点における関数値で表現することである。このとき、補間多項式の次数を変化させること、および、汎関数の積分領域を調整することで離散化の精度を向上させ得ることを示した。

弱形式スキームによる離散化は、場の変数の補間方法あるいは基底関数としてさまざまなものを用いることができる。これにより離散化精度の一層の向上も期待できるが、こればかりではなく、多様なシステムへ適用できる汎用性も有している。例えば、Euler-Bernoulli 梁は 4 階の微分方程式に従う弾性システムでありこれまで RTM を適用した例はなかった。しかし、弱形式離散化スキームを適用することで初めて RTM による解析を有効に実施できるようになる。このシステムに関する研究も計画中である。

References

- [1] F. Y. Hajj, H. Kobeisse and N. R. Nassif, "On the numerical solution of shroedinger's radial equation", Journal of Computational Physics, vol. 16, pp.150-159, 1974.
- [2] J. A. Appelbaum and D. R. J. Hamann, "Self-consistent electronic structure of sold surfaces", Physical Review B, vol.6, no.6, pp.2166-2177, Sept. 1972.
- [3] Ph Lambin and J. P Vigneron, "Improved continued fraction treatment of the one-dimensional

- scattering problem", Journal of Physics A (Math. and Gen.), vol.14, pp.1815-1819, 1981.
- [4] J. P. Vigneron and Ph. Lambin, "Transmission coefficient for one-dimensional potential barriers using continued fractions", Journal of Physics A (Math. and Gen.), vol.13, pp.1135-1144, 1980.
 - [5] H. G. Nguyen, P. H. Cultler, T. E. Feuchtwang and N. Minkovsky, "Investigation of a new numerical method for the exact calculation of one-dimensional transmission coefficients : Application to the study of limitations of the WKB approximation", Surface Science, vol.160, pp.331-352, 1985.
 - [6] J. Ferrante and J. R. Smith, "Theory of the bimetallic interface", Physical Review B, vol.31, no.6, pp.3427-3434, February 1995.
 - [7] K. Hirose and M. Tukada, "First-principles calculation of the electronic structure for a bielectrode junction system under strong field and current", Physical Review B, vol.51, no.8, pp.5278-5290, March 1985.
 - [8] H. Kato and Y. Kanno, "Microwave absorption of catalyst in a thermal decomposition reaction by recursive transfer method", Japanese Journal of Applied Physics, vol.47, no. 6, pp.4846-4850, June, 2008.
 - [9] H. Kato and H. Kato, "Application of the recursive transfer method to flexural waves I: Novel discretization scheme using weak form theory framework and waveguide modes on inhomogeneous elastic plates", IEIEC Transaction A: Fundamentals, vol. E97-A, no.5, pp.1075-1085, 2014.
 - [10] M. D. Feit and J. A. Fock, "Light propagation in graded-index optical fibers", Applied optics, vol.17, iss.11, pp.3990-3998, Dec. 1978.
 - [11] G. R. Hadley, "Wide-angle beam propagation using Pade approximant operators", Optics Letters, vol. 17, no. 20, pp.1426-1428, 1992.
 - [12] M. Kobayashi and Y. Tsuji, "A wide-angle finite-element beam propagation method", IEEE Photonics Technology Letters, vol. 8, no. 9, pp.1208-1210, Sep. 1996.
 - [13] H. P. Nolting and G. Sztefka, "Eigenmode Matching and Propagation theory for square meander-type couplers", Photonics Technology Letters, vol.4, no.12, pp.1386-1389, 1992.
 - [14] 宮本, 百田, 安元, "フーリエ級数展開法による周期構造3次元光導波路の解析", 電子情報通信学会論文誌 C, vol.J86-C, no. 6, pp.591-600, June 2003.
 - [15] P. Solin, *Partial differential equations and the finite element method*, John Wiley & Sons, Hoboken 2006.
 - [16] L. Ramdas Ram-Mohan, *Finite Element and Boundary Element Applications in Quantum Mechanics*, p. 373, Oxford Univ. Press, Oxford 2002.
 - [17] R. L. Higdon, "Absorb boundary condition for difference approximation to the multi-dimensional wave equation", Mathematics of Computation vol. 47, no. 176, pp. 437-459, 1986.
 - [18] G. L. Lamb, *Elements of soliton theory*, John Wiley & Sons, New York, 1985.