

逐次伝達法のための 弱形式離散化スキームとその離散化誤差

加藤 初弘* 加藤 初儀†

* 山梨大学大学院総合研究部 † 苫小牧工業高等専門学校

概要. 逐次伝達法 (RTM) は, Numerov 法を用いて開発された数値計算法で, 局在波が関与する散乱問題の解析に適している. しかし, Numerov 法の離散化に関する制限から RTM の適用範囲が限られていた. そこで, 新たな離散化スキームが提案されるとともに RTM の適用範囲も拡張されている. このスキームの下で 1 次元散乱問題を議論し, RTM の誤差を評価するとともに高い精度が実現できることを示した.

Weak-Form Discretization Scheme for Recursive Transfer Method and the Discretization Errors

Hatsuhiko Kato* and Hatsuyoshi Kato†

*University of Yamanashi †NIT Tomakomai Colledge

Abstract. Using Numerov method, the recursive transfer method (RTM) was developed as a numerical method for solving scattering problems caused by localized waves. However, the application scope of RTM was limited because of the restriction on Numerov method. Therefore, the new discretization scheme was proposed to extend the scope of RTM. Analyzing one-dimensional scattering problem under the proposed discretization scheme, the RTM error was evaluated and the possibility to achieve high accuracy was shown.

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, 7]. 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 [14, 22] や電極間の電子伝導を解析する方法 [3, 17] として発展し逐次伝達法 (RTM) [9] 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) [2, 6] やこれらを発展させた手法 [16, 18] 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いることである. さらに, 電磁波や弾性波の解析にも有効であることが知られている [10, 11]. また, 散乱領域の周辺に生成される局在波を抽出できるので, Fano 共鳴のように局在波が関与した現象の解析に適している [12].

1 階微分を含まない 2 階微分方程式から Numerov 法を用いて 2 階差分方程式を導出で

きる [7]. 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が特殊な場合に限られてもいる. 本研究ではこれらの制限を除くために弱形式理論 [5] 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. このスキームに従うと, RTM の適用対象を従来の枠を超えて弱形式理論による定式化が可能なシステムに拡大することができる.

Numerov 法による離散化精度の議論は既にあるが [7, 22], 弱形式離散化スキームで得られる差分方程式の離散化精度の評価は行われたことがない. 従って, 解析的な手法で散乱問題の厳密解が得られる連続システムを対象に, 弱形式スキームで離散化した際の誤差を評価した.

本論文の構成は次の通りである. 2 章では 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る手法を示す. 3 章では 2 階差分方程式の基本解を利用して, 離散化誤差が減少するように汎関数の積分領域を決定する. さらに, 散乱問題の解を解析的に求め得る連続システムを利用して, 微分方程式を差分方程式に変換する際の離散化誤差を評価する. 最終章はまとめである.

2. 弱形式離散化

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次の方程式を考える.

$$(2.1) \quad u'' + v(x)u = 0$$

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. 数値計算に際して, 解析区間 $[x_{\text{in}}, x_{\text{out}}]$ を N 等分し

$$(2.2) \quad x_n = x_{\text{in}} + hn$$

と表現する. ここに, h は分割幅であり $h = (x_{\text{in}} - x_{\text{out}})/N$ で与えられる. また, n は離散化した空間の指標であり $n = 0, 1, 2, \dots, N$ と変化する. 本研究で論じる離散化とは, これらの離散点 x_n における場の変数の値 $u(x_n)$ などを用いて微分方程式 (2.1) を近似できる差分方程式を導出することである.

弱形式理論の処方箋に従って, (2.1) 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

$$(2.3) \quad F_n[w, u] = \int_{x_n - \theta h}^{x_n + \theta h} \{-w'u' + wv(x)u\} dx$$

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

$$(2.4) \quad w(x_n \pm \theta h) = 0$$

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 節に示す．

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)

$$(2.5) \quad F_n[w, u] = 0, \quad (\forall w)$$

から，場の変数 $u(x)$ に関する微分方程式 (2.1) を導出することができる．従って，微分方程式 (2.1) に替わり零値条件 (2.5) を用いて場の変数 $u(x)$ を求めることが可能であり，これが弱形式理論の出発点である [21].

2.2 2 階差分方程式の導出

2.2.1 2 次多項式補間を用いた離散化

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．この補間は，有限要素法で利用される節点要素の Lagrange 補間と同じである [21]. しかし，汎関数の積分範囲を指定するパラメータ θ に対応した境界条件の処理が必要であることが有限要素法にはない特徴である．

離散化点 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，

$$(2.6) \quad u(x) = \{\xi_n\}_2^T C_2 \{u(x_{n+p})\}.$$

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 を転置記号として， $\{\xi_n\}_2 = [1, \xi_n, \xi_n^2]^T$ と定義した．変数 x の代わりに変数 ξ_n を用いると，変数 x が分割区間 $[x_n, x_{n+1}]$ に含まれる条件を $0 \leq \xi_n \leq h$ と表現できる．これを利用すると補間式が有効な区間を簡潔に表現できるので折に触れこの変数を使用する．また， $\{u(x_{n+p})\}$ は，指標 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

$$(2.7) \quad C_2 = \begin{bmatrix} 1 & -h & h^2 \\ 1 & 0 & 0 \\ 1 & h & h^2 \end{bmatrix}^{-1}$$

となる [21].

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．

$$(2.8) \quad w(x) = \{\xi_n\}_2^T C_2 \{w(x_{n+p})\},$$

$$(2.9) \quad v(x) = \{\xi_n\}_2^T C_2 \{v(x_{n+p})\} \\ = \sum_{p=-1}^1 N_p(\xi_n) v(x_{n+p}).$$

(2.9) の右辺最終行に現れる関数 $N_p(\xi_n)$ ($p = 0, \pm 1$) は，2 次の Lagrange 多項式 [21] であり $N_{-1}(\xi_n) = \{\xi_n\}^T C_2 [1, 0, 0]^T$, $N_0(\xi_n) = \{\xi_n\}^T C_2 [0, 1, 0]^T$, $N_{+1}(\xi_n) = \{\xi_n\}^T C_2 [0, 0, 1]^T$ と定義されている．

補間式 (2.6), (2.8), (2.9) を汎関数 $F_n[w, u]$ の定義式 (2.3) 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

$$(2.10) \quad A_2 = C_2^T \int_{-\theta h}^{\theta h} \{\xi_n\}'_2 \{\xi_n\}'_2^T d\xi_n C_2,$$

$$(2.11) \quad B_2^{(p)} = C_2^T \int_{-\theta h}^{\theta h} \{\xi_n\}_2 N_p(\xi_n) \{\xi_n\}_2^T d\xi_n C_2,$$

$$(2.12) \quad f_2 = -A_2 + \sum_{p=-1}^1 v(x_{n+p}) B_2^{(p)},$$

で定義すると，

$$(2.13) \quad F_n[w, u] = \{w(x_{n+p})\}^T f_2 \{u(x_{n+p})\}$$

となる．

境界条件 (2.4) は，補間式 (2.8) を用いることを前提とすると，定数 $r_\theta = (\theta^2 - 1)/\theta^2$ を用いて $w(x_n \pm h) = r_\theta w(x_n)$ と制限することで満たされる．従って， $R_\theta = [r_\theta, 1, r_\theta]^T$ とすると， $\{w(x_{n+p})\} = R_\theta w(x_n)$ となる．即ち，積分区間 $[x_n - \theta h, x_n + \theta h]$ において任意関数 $w(x)$ を決定する量として $w(x_n)$ を選ぶことができた．これらの表現を用い汎関数を離散化すると，零値条件 (2.5) より 2 階差分方程式

$$(2.14) \quad c_n u(x_{n-1}) + b_n u(x_n) + a_n u(x_{n+1}) = 0$$

を導出できる．ここに，係数 c_n, b_n, a_n は，

$$(2.15) \quad c_n = R_\theta^T f_2 [1, 0, 0]^T,$$

$$(2.16) \quad b_n = R_\theta^T f_2 [0, 1, 0]^T,$$

$$(2.17) \quad a_n = R_\theta^T f_2 [0, 0, 1]^T$$

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 節および 3.3 節に示すように非散乱領域においては，弱形式離散化および Numerov 法による離散化の双方で発生する離散化誤差の大きさが同程度である．

2.2.2 3次多項式補間を用いた離散化

一般的に、関数の補間に用いる代数多項式の次数を変更すると、可微分性を変化させたり関数の多様な変化を表現できるようになる。そこで、前節よりも次数が高い3次の補間多項式を用いた場合を検討する。

2階の差分方程式を導出するという目的から、連続する3つの離散点における関数値を用いて代数補間を行う。このために指標 $p(= -1, 0, 1)$ を用いて2次元ベクトル $\mathbf{u}(x_{n+p}) = [u(x_{n+p}), u'(x_{n+p})]^T$ を定義して、場の変数 $u(x)$ を

$$(2.18) \quad u(x) = \begin{cases} \{\xi_n\}_3^T C_{3+} \mathbf{U}_{n-} & , -h < \xi_n < 0 \\ \{\xi_n\}_3^T C_{3-} \mathbf{U}_{n+} & , 0 < \xi_n < h \end{cases}$$

と表現する。ここで、 $\{\xi_n\}_3$ および $\mathbf{U}_{n\pm}$ は4次元ベクトルで、それぞれ $\{\xi_n\}_3 = [1, \xi_n, \xi_n^2, \xi_n^3]^T$ および $\mathbf{U}_{n\pm} = [\mathbf{u}(x_n)^T, \mathbf{u}(x_{n\pm 1})^T]^T$ である、また、

$$(2.19) \quad C_{3\pm} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & \pm h & h^2 & \pm h^3 \\ 0 & 1 & \pm 2h & 3h^2 \end{bmatrix}^{-1}$$

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 $\mathbf{w}(x_n) = [w(x_n), w'(x_n)]^T$ および4次元ベクトル $\mathbf{W}_{n\pm} = [\mathbf{w}(x_n)^T, \mathbf{w}(x_{n\pm 1})^T]^T$ を導入して

$$(2.20) \quad w(x) = \begin{cases} \{\xi_n\}_3^T C_{3+} \mathbf{W}_{n-} & , -h < \xi_n < 0 \\ \{\xi_n\}_3^T C_{3-} \mathbf{W}_{n+} & , 0 < \xi_n < h \end{cases}$$

と代数補間できる。

補間式 (2.18) および (2.20) は有限要素法で利用されている Hermite 要素 [21] を用いた補間表現と同じである。しかし、差分法手式を導出するという目的から、任意関数の補間式に新たに条件を設定する必要がある。任意関数 $w(x)$ には、汎関数 (2.3) の導出に際して境界条件 (2.4) 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 $[x_n - \theta h, x_n + \theta h]$ 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、 $\mathbf{W}_{n\pm 1} = R_{\theta\pm} \mathbf{w}(x_n)$ と表現できる。ここで、行列 $R_{\theta\pm}$ は 4×2 行列で

$$(2.21) \quad R_{\pm} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ (\theta^3 - 3\theta + 2)/\theta^3 & \pm(1 - 2\theta + \theta^2)h/\theta^2 \\ \pm(6\theta - 6)/\theta^3/h & (\theta^2 + 3 - 4\theta)/\theta^2 \end{bmatrix}$$

である。

ポテンシャル関数 $v(x)$ の補間法として2次の Lagrange 多項式を用いた (2.9) を利用することもできる。しかし、後続の 3.2.1 節で論じる離散化誤差の大きさと整合性を保つた

めに, 5 次の Lagrange 多項式 $M_q(\xi_n)$ ($q = 0, \pm 1, \pm 2$) を用いて

$$(2.22) \quad v(x) = \sum_{q=-2}^2 v(x_n + q\frac{h}{2})M_q(\xi_n),$$

と表現する. ただし, $x \in [x_{n-1}, x_{n+1}]$ であり, $M_q(rh/2) = \delta_{qr}$ ($q, r = 0, \pm 1, \pm 2$) を満たすとする.

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を $F_n[w, u] = \mathbf{w}(x_n)^T \sum_{\varsigma=\pm} R_{\theta\varsigma}^T f_{3\varsigma} \mathbf{U}_{n\varsigma}$ と表現できる. ここで, $f_{3\varsigma}$ ($\varsigma = \pm$) は 4×4 行列で

$$(2.23) \quad f_{3\varsigma} = -A_3^{(\varsigma)} + \sum_{q=-2}^2 v(x_n + q\frac{h}{2})B_{3q}^{(\varsigma)},$$

と定義される. ただし, $A_3^{(\varsigma)}$ および $B_{3q}^{(\varsigma)}$ は, それぞれ

$$(2.24) \quad A_3^{(\varsigma)} = C_{3\varsigma}^T \int_{-\theta h(1-\varsigma)/2}^{\theta h(1+\varsigma)/2} \{\xi_n\}_3 \{\xi_n\}_3^T d\xi_n C_{3\varsigma},$$

$$(2.25) \quad B_{3q}^{(\varsigma)} = C_{3\varsigma}^T \int_{-\theta h(1-\varsigma)/2}^{\theta h(1+\varsigma)/2} \{\xi_n\}_3 M_q(\xi_n) \{\xi_n\}_3^T d\xi_n C_{3\varsigma}$$

である.

汎関数 $F_n[w, u]$ に関する零値条件 (2.5) において, 任意関数 $w(x)$ の多様性は 2 次元ベクトル $\mathbf{w}(x_n)$ の成分を選択する自由度で決まる. これらの自由度を利用することで, 2 階差分方程式

$$(2.26) \quad c_n \mathbf{u}(x_{n-1}) + b_n \mathbf{u}(x_n) + a_n \mathbf{u}(x_{n+1}) = \mathbf{0}$$

を導出することができる. ここに, $\mathbf{0} = [0, 0]^T$, 係数 c_n, b_n, a_n は 2×2 行列であり 2×2 の零行列 $\mathbf{0}_2$ および単位行列 E_2 を用いて

$$(2.27) \quad c_n = R_{\theta-}^T f_{3-} [\mathbf{0}_2, E_2]^T,$$

$$(2.28) \quad b_n = (R_{\theta-}^T f_{3-} + R_{\theta+}^T f_{3+}) [E_2, \mathbf{0}_2]^T,$$

$$(2.29) \quad a_n = R_{\theta+}^T f_{3+} [\mathbf{0}_2, E_2]^T,$$

と定義されている.

本節で得られた差分方程式の変数 $\mathbf{u}(x_n)$ は, 場の変数の関数値のみならず導関数も成分に含んでいる. このため, Dirichlet 型と Neumann 型の境界値問題を混在させて差分方程式を解く必要がある. この混在を許して散乱問題の解く技術が, 3.1.3 節で論じる伝達行列を利用した境界条件の表現法である.

3. 散乱問題と離散化誤差

3.1 逐次伝達法

3.1.1 伝達行列とその漸化式

方程式 (2.14), (2.26) 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、(2.14) あるいは (2.26) をまとめて

$$(3.1) \quad c_n \Phi_{n-1} + b_n \Phi_n + a_n \Phi_{n+1} = 0$$

とすると、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しない記述方法である。

逐次伝達法は連続する場の変数 Φ_n, Φ_{n+1} の間に

$$(3.2) \quad \Phi_{n+1} = S_n \Phi_n$$

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 [1]。このとき、(3.1) を用いることで、 S_n を決定する漸化式 (recursion relation)

$$(3.3) \quad S_{n-1} = -(b_n + a_n S_n)^{-1} c_n$$

が得られる [3,9,17]。RTM は S_N の値を与え (3.3) 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。

RTM と類似した数値計算法として伝達行列法 (TMM) [4] がある。この方法は、空間軸を分割し狭い領域内で微分方程式の係数を定数で近似しその基本解を隣接する領域と接続する手法である。一方、RTM は差分方程式における係数に空間依存を与えて解析するので、定数係数の基本解を用いる TMM よりも解析精度が高い。

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 $\Phi_n = e^{ikh} \Phi_0$ と表現できる。このとき $\Psi = [\Phi_0, e^{ikh} \Phi_0]^T$ を導入すると (3.1) から

$$(3.4) \quad A\Psi + e^{ikh} B\Psi = 0,$$

$$(3.5) \quad A = \begin{bmatrix} c_n & O \\ O & E \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} b_n & a_n \\ -E & O \end{bmatrix}$$

を導出できる。ここで、 E (あるいは O) は Φ_n がスカラーか 2次元ベクトルかによって、それぞれ単位元又は 2×2 単位行列 E_2 (あるいは零元又は 2×2 零行列 O_2) である。(3.4)

は一般化固有値問題 [19] 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 (2.1) 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 S_n は位相を増減するスカラー因子である。この伝達行列を記号 K_{\pm} を用いて

$$(3.6) \quad K_{\pm} = e^{\pm ikh}$$

と表現する。一方、場の変数 $\Phi(x)$ がベクトル場である場合、4つの固有モードが存在する。これらのうち、2つのモードは固有値 $e^{\pm ikh}$ を有する進行波で、それらの固有ベクトルを $\Phi_{0r}^{(\pm)}$ で表す。残る2つは、振幅変調を伴いつつ伝搬する波であり固有値 $e^{\pm \eta h}$ ($\text{Re}[\eta] > 0$) とその固有ベクトル $\Phi_{0m}^{(\rho)}$ を持つとする。ここで、 $\rho = \text{dmp/grw}$ であり固有値の指数部が $-\eta h$ なら **dmp**, ηh なら **grw** とする。また、このときの伝達行列 S_n を記号 $K_S^{(\text{dmp/grw})}$ ($S = \pm$) を用いて示すと、

$$(3.7) \quad K_S^{(\text{dmp})} = [\Phi_{0r}^{(S)}, \Phi_{0m}^{(\text{dmp})}] \text{diag}[e^{Sikh}, e^{-\eta h}] [\Phi_{0r}^{(S)}, \Phi_{0m}^{(\text{dmp})}]^{-1},$$

$$(3.8) \quad K_S^{(\text{grw})} = [\Phi_{0r}^{(S)}, \Phi_{0m}^{(\text{grw})}] \text{diag}[e^{Sikh}, e^{\eta h}] [\Phi_{0r}^{(S)}, \Phi_{0m}^{(\text{grw})}]^{-1}$$

と表現できる [11]。ここで、 $\text{diag}[\]$ はベクトルを対角成分とする対角行列を表す。

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 軸の正の方向に入力波 Φ_{in} が進入している場合を想定して、RTMにより散乱問題を解く手順をまとめる。入力波 Φ_{in} がスカラーかベクトルであるかに応じて、それぞれ $\Phi_{\text{in}} = 1$ あるいは $\Phi_{\text{in}} = \Phi_{0r}^{(+)}$ を選ぶ。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、散乱体は $1 < n < N$ にあると仮定する。入射波が散乱されることで非散乱領域 $n \leq 1$ 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

$$(3.9) \quad \Phi_n = \begin{cases} (K_+^{(\text{dmp})})^n \Phi_{\text{in}} + (K_-^{(\text{grw})})^n \Phi_{\text{rf}}, & , n \leq 1 \\ (K_+^{(\text{dmp})})^{(n-N)} \Phi_{\text{tr}}, & , n \geq N \end{cases}$$

と表現する。ただし、 Φ_n がスカラー場の場合、**dmp/grw** で指定される差異はなく $K_{\pm}^{(\text{dmp/grw})} = K_{\pm}$ である。(3.9) から散乱波が透過している領域 ($n \geq N$) で、

$$(3.10) \quad S_N = K_+^{(\text{dmp})}$$

であることを導出できる。境界条件 (3.10) を漸化式 (3.3) に用いることで、任意の $n (< N)$ に対する伝達行列 S_n を境界値 S_N から決定することができる。

変数 Φ_n がベクトル場である場合その成分は $u(x_n)$ のみならず $u'(x_n)$ も含んでいる。連続システムの定常的な散乱問題では、これらの2成分が互いに依存している。離散システ

ムはこの依存関係を (3.9) で表現し、境界 $x_{\text{in}} (= x_0)$ において強制的に $u'(x_0)$ の値を変化させた場合にも対応している。この場合、エバネッセント波 [20] が発生し境界からシステム内部に減衰しながら浸透する。固有状態 $\Phi_{0m}^{(\text{dmp})}$ を利用するとこのような減衰波の自由度を Φ_{in} に組み込むことが可能である。(3.9) において入射波の変化を $(K_+^{(\text{dmp})})^n \Phi_{\text{in}}$ と伝達行列の上付き指標を (dmp) としたのは、このエバネッセント波の減衰を表すためである。更に、エバネッセント波が散乱領域の内部で発生し非散乱領域に侵入する場合もある。入力側 ($n \leq 1$) および出力側 ($n \geq N$) で、それぞれ反射波を $(K_-^{(\text{grw})})^n \Phi_{\text{rf}}$ 、透過波を $(K_+^{(\text{dmp})})^{(n-N)} \Phi_{\text{tr}}$ と表現したのはこの様子表現するためである。

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

$$(3.11) \quad \Phi_{\text{rf}} = -(S_0 - K_-^{(\text{grw})})^{-1}(S_0 - K_+^{(\text{dmp})})\Phi_{\text{in}}$$

を得る。一方、透過波 Φ_{tr} は (3.2) を繰り返し適用することで

$$(3.12) \quad \Phi_{\text{tr}} = S_{N-1} \cdots S_2 S_1 S_0 (\Phi_{\text{in}} + \Phi_{\text{rf}})$$

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 $r = \Phi_{\text{in}}^{-1} \Phi_{\text{rf}}$ 、 $t = \Phi_{\text{in}}^{-1} \Phi_{\text{tr}}$ と表現できる。また、ベクトル場の場合、 $\tilde{\Phi}_{0t}$ で $[\Phi_{0t}^{(+)}, \Phi_{0m}^{(\text{dmp})}]^{-1}$ の第 1 行ベクトルを表すと、

$$(3.13) \quad r = \tilde{\Phi}_{0t} \Phi_{\text{rf}}, \quad t = \tilde{\Phi}_{0t} \Phi_{\text{tr}}$$

で与えられる。なお、反射率 R および透過率 T は、それぞれ $R = |r|^2$ および $T = |t|^2$ で求めることができる。

3.2 補間法の違いによる離散化誤差

3.2.1 非散乱領域での進行波とその離散化誤差

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 (2.1) の厳密解を導くことができる。その解は $u(x) = e^{\pm i\sqrt{v_0}x}$ と表現できる進行波解であり定数係数微分方程式の基本解である。一方、離散的なシステムである 2 階差分方程式 (3.1) も定数係数となることからその厳密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 次の補間多項式を用いた場合、固有値問題 (3.4) の固有多項式が本質的に 2 次方程式であることから、固有値は $e^{\pm ikh} = (-b_n \pm \sqrt{b_n^2 - 4a_n c_n}) / 2a_n$ 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

$$(3.14) \quad k = \sqrt{v_0} + \frac{6\theta^2 - 5}{120} (\sqrt{v_0})^3 h^2 + \frac{-20\theta^2 + 12\theta^4 + 15}{3200} (\sqrt{v_0})^5 h^4 + \dots$$

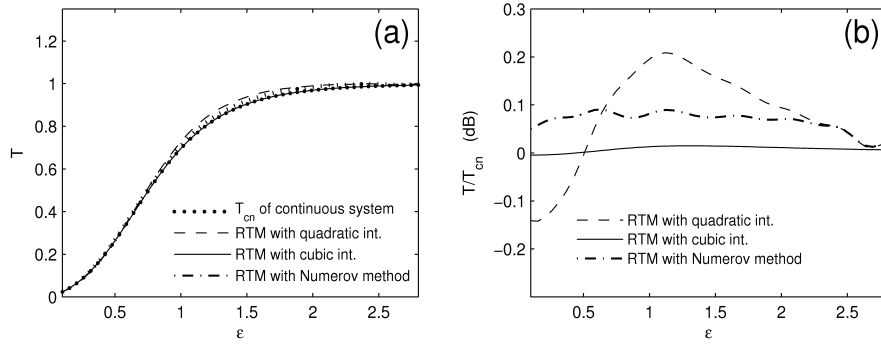


Fig. 1. The ε -dependence of transmission rates under sech^2 potential. (a) T under various discretizations methods and T_{cn} of the continuous system. (b) T over T_{cn} as a measure of accuracy.

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．この離散化誤差は，Numerov 法を用いた場合の大きさと一致している．なお，微分方程式を差分方程式で近似する際の誤差が h^6 程度であるが [7]，波数の表現式に関する誤差とは異なるので注意が必要である．

3 次の補間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， h^4 に比例する項を消去でき

$$(3.15) \quad k = \sqrt{v_0} - \frac{1}{60480} (\sqrt{v_0})^7 h^6 + \dots$$

と展開できる．即ち，前述の 2 次の補間多項式を用いた場合よりも，進行波に関する離散化の誤差の大きさをさらに抑えることができ h^6 程度にすることができた．なお，ポテンシャル関数の補間式 (2.22) に 5 次の Lagrange 多項式を用いた理由は，この分割幅依存との整合性を保つためである．

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．このパラメータ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離散化誤差

ポテンシャル関数 $v(x)$ が $v(x) = \varepsilon - \text{sech}^2(x)$ で与えられた場合，微分方程式 (2.1) 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，解析的に整備された手法で連続システムでの散乱問題を解くことが可能

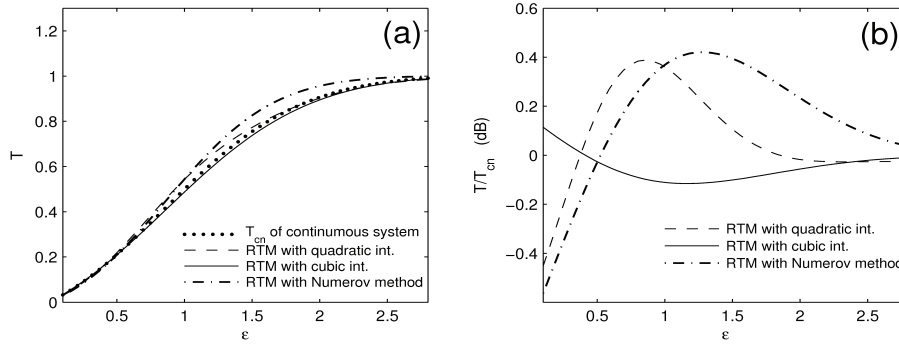


Fig. 2. The ε -dependence of transmission rates under the box potential. (a) T under various discretizations and T_{cn} of the continuous system. (b) T over T_{cn} as a measure of accuracy.

であり，透過率 T_{cn} を

$$(3.16) \quad T_{cn} = \frac{\sinh^2(\pi\sqrt{\varepsilon})}{\sinh^2(\pi\sqrt{\varepsilon}) + \cosh^2(\pi\sqrt{3}/2)}$$

と解析的な式で表現できる [13, 22]. この連続システムでの値と RTM により得られる離散システムでの値 $T(= |t|^2)$ を比較して Fig. 1 に示した. 計算の際に用いたシステムパラメータの値は次の通りである: $x_{in} = -10$, $x_{out} = 10$, $N = 17$, $h = 1.1765$. 空間軸の分割数 N を多くすると離散システムでの計算結果を連続システムでの値により近づけることが可能である. しかし, 両者の差を強調するために N の値をなるべく小さく設定した.

Fig. 1(a) は透過率の ε 依存性であり, 点線が連続システムの値 T_{cn} である. 他の曲線は RTM により数値的に求めた離散システムでの値 $T(= |t|^2)$ を示している. 線種の違いは差分方程式を導出する際に使用した手法の違いを示しており, 3 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実線と破線で, Numerov 法を用いた場合を一点破線で示した. よりよく連続システムでの T_{cn} と離散システムでの T の違いを表示するために比 T/T_{cn} を Fig. 1(b) に示した. 縦軸の単位は dB であり $10\log_{10}(T/T_{cn})$ の値を示している. 以後, この値を離散化誤差を評価する数値として使用する.

いずれの曲線も $\varepsilon \approx 1$ において離散化誤差が増大する傾向がある. この状況は関数 $\text{sech}^2(x)$ のピークと ε がほぼ一致する場合で $x \approx 0$ のとき $v(x) \approx 0$ となり量子力学的にはポテンシャルが強く散乱現象に影響を与えるか否かの限界である [15]. 全範囲を通じて最も小さな離散化誤差を有しているのが実線であり, 場の変数に 3 次多項式を用いて離散化を行ったシステムである.

3.2.3 箱型ポテンシャル下での離散化誤差

いわゆる箱型ポテンシャル中における散乱問題は, 連続システムでの透過率を解析的な手法で求め得る別の例である. そのポテンシャル関数 $v(x)$ は, a および V_0 をポテンシヤ

ルの幅および高さとしたとき

$$(3.17) \quad v(x) = \begin{cases} \varepsilon & , |x| \geq a \\ \varepsilon - V_0 & , |x| < a \end{cases}$$

であり，連続システムでの透過率は

$$(3.18) \quad T_{cn} = \frac{4\varepsilon(V_0 - \varepsilon)}{4\varepsilon(V_0 - \varepsilon) + V_0^2 \sinh^2(a\sqrt{V_0 - \varepsilon})}$$

で与えられる [15]. (3.18) の値と RTM で得られる離散システムの値 $T(=|t|^2)$ を比較して Fig. 2 に示した. 計算に用いたシステムパラメータの値は次の通りである: $x_{in} = -3, x_{out} = 3, N = 6, h = 1, a = 1, V_0 = 1$. これらの値は積分値 $\int_{-\infty}^{\infty} v(x)dx$ が，前節のポテンシャル関数による値と同じになるように設定した. 曲線の種類による違いは Fig. 1 の場合と同じであり，やはり分割数 N もなるべく小さく設定して計算方法による違いを強調した.

前節と同様にいずれの曲線も $\varepsilon \approx 1$ において離散化誤差 T/T_{cn} が増大する傾向がある. また， T/T_{cn} が最も小さいものは実線で示した 3 次多項式を用いた離散化システムである. しかし，Fig. 1(b) と比較すると Fig. 2(b) の実線のデータは，1 桁以上大きな離散化誤差が現れている. その主な理由の一つは，ポテンシャル関数 $v(x)$ を (2.22) を用いて高い次数の多項式で補間していることである. 箱型ポテンシャルは $x = \pm a$ で不連続に変化するので，高い次数の多項式で近似すると連続システムでの関数が有しているよりも多い階数の微分可能性を仮定してしまい解析精度の悪化をもたらす. 解析精度を確保するためには，ポテンシャル関数の補間方法についても考慮する必要がある. このことに関連した考察が後続の 3.3 節に述べられている.

3.3 離散化誤差の h -依存

3.2.1 節で論じたように散乱体が存在しない非散乱領域では，進行波の波数 k を用いて離散化誤差の分割幅依存を評価することが可能であった. しかし，散乱体が存在するシステムでは自由に進む進行波が存在しないので，波数に代わる物理量が必要である. 幸いポテンシャル関数が sech^2 型および箱型の場合，連続システムにおける透過率の厳密解 (3.16) および (3.18) が得られているので，この厳密解の値 T_{cn} と RTM による値 T の比を用いて離散化誤差の分割幅依存を評価することができる. Fig. 3 がその結果をまとめたものである. ここで， $\langle T/T_{cn} \rangle$ は相乗平均であり，Fig. 1 および Fig. 2 で検討した場合と同様な区間 $0.1 \leq \varepsilon \leq 2.8$ を等間隔で 50 分割しその各分割点における T/T_{cn} の値から求めた.

Fig. 3(a) はポテンシャルが sech^2 の場合で，線種の違いは Fig. 1(b) と共通である. すでに Fig. 1 で示されているように，3 次多項式を用いた離散化システム (実線) の場合が離散化誤差が最も小さく高い解析精度を確保している. その分割幅依存は $h < 2 \times 10^{-1}$ において傾きが緩和される傾向があるが，ほぼ h^6 で近似でき (3.15) が示す h -依存性と同じであ

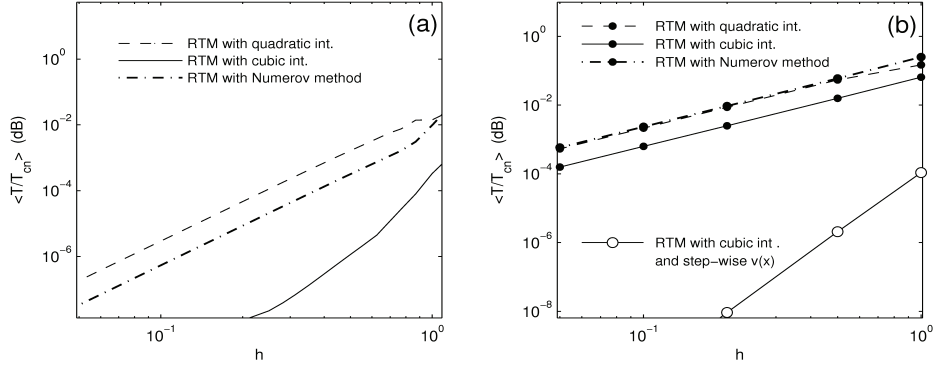


Fig. 3. Geometric mean of the ratio of the transmittances $\langle T/T_{\text{cn}} \rangle$ as a function of the segmentation width h . (a) Scattering under sech^2 potential. (b) Scattering under the box potential.

る。一方、2次多項式(破線)およびNumerov法(一点破線)を用いた場合、離散化誤差が h^4 の依存性を示しておりこの場合も3.2.1節での議論と一致している。即ち、微分が可能なポテンシャル下での散乱では、進行波の波数で離散誤差を評価することも可能である。

Fig. 3(b)は箱型ポテンシャルの場合の離散化誤差であり直線で変化が示されているが、マーカー「●」および「○」で示された箇所でのみ値が求められている。その理由は、空間軸の分割点 x_n とポテンシャル関数(3.17)の不連続点 $x = \pm a$ との相対位置により離散化誤差が変動するためである。そこで、 $2a/h$ が整数であり常に $x = \pm a$ が分割点上にある場合のみを表示した。この場合も、最も離散化誤差が最も小さいものは実線で示した3次多項式を用いた離散化システムである。しかし、離散化誤差の h -依存性はいずれもほぼ h^2 であり、波数を用いた3.2.1節の議論から予想される h^4 の依存性よりも悪化している。この h -依存性の悪化の主な理由は、ポテンシャル関数 $v(x)$ が位置 $x = \pm a$ において不連続なため、補間式(2.9)および(2.22)を用いると汎関数の離散化表現に h^2 に比例した誤差が発生することである。この誤差を抑えるためにはポテンシャル関数の補間式を不連続な変化に対応できるようにする必要がある。そこで、補間式を(2.22)式から

$$(3.19) \quad v(x) = \sum_{q=-1}^0 v(x_{n+q} + \frac{h}{2}) H(\xi_{n+q})$$

に変更した。ここで、関数 $H(\xi_{n+q})$ は $H(\xi_{n+q}) = 1$ ($0 \leq \xi_{n+q} < h$), $H(\xi_{n+q}) = 0$ ($\xi_{n+q} < 0, \xi_{n+q} \geq h$)と定義された階段状の関数である。この変更を行って得られた離散化誤差がマーカー「○」で示したデータであり、その分割幅依存は当初の予想通りである h^6 に改善されている。

2次多項式を用いた離散化システムでもポテンシャル関数の補間式を(3.19)に変更すると、離散化誤差を減少させることが可能である。しかし、その分割幅依存はやはり h^2 に留まっていた。その理由は、補間式(2.6)の2階微分が区間 $[x_{n-1}, x_{n+1}]$ で連続であり、

場の変数が本来有している微分可能性よりも高い微分可能性を仮定したことにある．一方，マーカー「o」が示す 3 次多項式 (2.18) を用いた離散システムでは，隣接する 2 区間 $[x_{n-1}, x_n]$ と $[x_n, x_{n+1}]$ において場の変数を独立な多項式を用いて補間しているので，場の変数の 2 階微分 $u''(x)$ が有する不連続性を効果的に表現することができている．

限られた場合ではあるが，弱形式離散化スキームの下で補間関数をシステムに合わせて選択すると，離散化誤差を抑え得る例を示した．補間方法の選択に関する一般的な処方箋は，ポテンシャル関数，場の変数，任意関数の 3 者に関する補間式の整合性を考慮することである．例えば，3 次より高い補間多項式を用いた弱形式離散化スキームを検討するならば，(2.18) の様に 2 つの区間 $[x_{n-1}, x_n]$ と $[x_n, x_{n+1}]$ を独立な多項式を用いて近似する 5 次の代数補間を選ぶと，場の変数が不連続な場合でも効果的に対応できる．その際，離散システムにおける場の変数として 3 次元ベクトル $\mathbf{u}(x_n) = [u(x_n) \ u'(x_n) \ u''(x_n)]^T$ を用いるとよい．このとき， $\theta = 1$ として進行波の波数で離散化誤差を評価すると，その分割幅依存は h^{10} で近似できることを数値的に確認している．従って，高い微分可能性を有するポテンシャル関数を (2.22) のように代数補間するならば，補間多項式の次数を 9 に選ぶのが場の変数との整合的が最も良い．

4. むすび

弱形式離散化スキームは散乱問題の数値解法に関する戦略的な手順であり，弱形式理論の枠組みを用いて 2 階の差分方程式を導出する手順，および，この差分方程式に RTM を適用して散乱問題を解く手順を提供する．その特徴の一つは，汎関数の積分区間を調整することで離散化精度の向上を達成することである．さらに，このスキームは，弱形式理論による定式化が可能なシステムに適用可能であるという意味で高い汎用性を有している．

ポテンシャル関数が空間的に変化しない非散乱領域で，離散システムでの進行波の波数を空間軸の分割幅 h の冪で展開することで離散化誤差を評価した．弱形式スキームで場の変数を補間する際に使用する多項式の次数を 2 とすると，既存の方法である Numerov 法と同程度の離散化誤差が得られた．このとき，汎関数の積分領域を離散点の前後 $\pm\sqrt{5/6}h$ に調整したことが有効に働いた．さらに，離散化誤差は場の変数を補間する多項式の次数を 3 に増やすことで改善することができた．

解析的な手法で散乱問題の厳密解を得ることができる連続システムに複数の弱形式離散化を行い RTM で透過率を求めた．これらの透過率を比較することでさまざまな方法で行った離散化の誤差を評価した．いずれの場合も 3 次多項式を用いた離散化システムが，最も小さな離散化誤差を有していた．ただし，ポテンシャル関数を補間する方法は，関数の微分可能性を考慮して選択する必要がある．具体的には，連続的な sech^2 ポテンシャルの下では 5 次多項式，不連続な箱型ポテンシャル下では階段状の補間が有効であった．

本研究は，論旨展開の見通しが良いことから，1 次元システムでの散乱問題，および，多項式補間に限って議論を行った．しかし，高い空間次元中でのシステムやさまざまな補

間法あるいは補間基底を用いた検討も可能である [11]. また, 弱形式離散化スキームの汎用性を示す典型例として, 弾性梁などが従う 4 階微分方程式に対する研究も可能であり, 現在その研究も進めている.

謝辞 本研究の一部は科研費 (23560065) の補助を受けて行われた.

参考文献

- [1] J. A. Appelbaum and D. R. J. Hamann, Self-consistent electronic structure of solid surfaces, *Physical Review B*, **6** (1972), 2166-2177.
- [2] M. D. Feit and J. A. Fock, Light propagation in graded-index optical fibers, *Applied optics*, **17** (1978), 3990–3998.
- [3] J. Ferrante and J. R. Smith, Theory of the bimetallic interface, *Physical Review B*, **31** (1995), 3427–3434.
- [4] D. K. Ferry and E. K. Goodnick, *Transport in nanostructures*, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1997.
- [5] M. J. Forray, *Variational calculus in science and engineering*, McGraw Hill, New York, 1968.
- [6] G. R. Hadley, Wide-angle beam propagation using Pade approxmant operators, *Optics Letters*, **17** (1992), 1426–1428.
- [7] F. Y. Hajj, H. Kobeisse and N. R. Nassif, On the numerical solution of Shroedinger’s radial equation, *Journal of Computational Physics*, **16** (1974), 150–159.
- [8] R L. Higdon, Absorbing boundary conditon for difference appeximation to the multi-dimensional wave equation, *Mathematics of Computation*, **47** (1986), 437-459.
- [9] K. Hirose and M. Tukada, First-principles calculation of the electronic structure for a bi-electrode junction system under strong field and current, *Physical Review B*, **51** (1985), 5278–5290.
- [10] H. Kato and Y. Kanno, Microwave absorption of catalyst in a thermal decompositionn reaction by recursive transfer metohd, *Japanese Journal of Applied Physics*, **47** (2008), 4846–4850.
- [11] 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*, **E97-A** (2014), 1075–1085.

- [12] H. Kato and H. Kato, Weak-form discretization, waveguide boundary conditions and extraction of quasi-localized waves causing Fano resonance, *IEICE Transactions: Fundamentals*, **E97-A** (2014), 1720–1727.
- [13] G. L. Lamb, *Elements of soliton theory*, John Wiley & Sons, New Yourk, 1985.
- [14] Ph Lambin and J. P Vigneron, Improved continued fraction treatment of the one-dimensional scattering problem, *Journal of Physics A (Math. and Gen.)*, **14**(1981), 1815–1819.
- [15] A. Messiah, *Mécanique quantique*, Dunode, Paris, 1959.
- [16] 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*, **J86-C** (2003), 591–600.
- [17] 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*, **160** (1985), 331–352.
- [18] H. P. Nolting and G. Sztefka, Eigenmode matching and propagation theory for square meander-type couplers, *Photonics Technology Letters*, **4** (1992), 1386–1389.
- [19] L. Ramdas Ram-Mohan, *Finite element and boundary element applications in quantum mechanics*, Oxford Univ. Press, Oxford, 2002.
- [20] S. Ramo, J. R. Whinnery and T. V. Duzer, *Fields and waves in communication electronics*, John Wiley & Sons, New York, 1994.
- [21] P. Solín, *Partial differential equations and the finite element method*, John Wiley & Sons, Hoboken, 2006.
- [22] J. P Vigneron and Ph Lambin, Transmission coefficient for one-dimensional potential barriers using continued fractions, *Journal of Physics A (Math. and Gen.)*, **13** (1980), 1135–1144.

加藤 初弘 (正会員) 〒400-8511 甲府市武田 4-3-11 山梨大学 工学部

1987年北大・工・応用物理学専攻博士課程修了。同年(株)東芝入社。1994年函館工業高等専門学校を経て1999年山梨大学工学部現在に至る。

加藤 初儀 (非会員) 〒059-1275 苫小牧市錦岡 433 苫小牧高専

1984年北大・工・応用物理学専攻修士課程修了。1998年博士(工)を北大より取得。日本電気(株)半導体事業本部勤務を経て、現在苫小牧高専教授。電磁波やフォノンなどを含め広く散乱現象に興味を持つ。