

MWLS 粒子法による電子状態の記述

法政大学 善甫 康成

長時間の電子状態ダイナミクスを安定に記述するため、粒子ベース計算の枠組みを開発することを目的とする。Bohm 定式化(Bohmian)では、時間依存 Schrödinger 方程式は連続方程式および Hamilton-Jacobi 方程式に分解され、量子効果は量子ポテンシャル項として表現される。一方で、量子ポテンシャルは低密度領域や節近傍で発散しやすく、単純な数値実装では計算の不安定化を招くことが多い。

本研究では、Gauss 波束に対して遠方の漸近形が解析的に与えられる点に着目し、計算領域外側へ粒子を導入して移動壁境界として機能させるとともに、最小二乗近似により外側領域の漸近形を当てはめることで、量子ポテンシャル計算の安定化を図る。1次元調和振動子における波束時間発展を例に、移動壁および漸近形補正の導入によりトラジェクトリーの破綻が抑制されることを示す。

さらに、粒子法における空間微分推定として移動加重最小二乗法(MWLS)を用いる。MWLSでは、評価点 \mathbf{x}_0 近傍で空間関数 $f(\mathbf{x})$ を Taylor 展開し、周辺点 j に対する重み関数を ω_j とし、重み付き近似を行う。すなわち、周辺点での差分に重みを付した量 $f_j^\Omega = [f(x_j) - f(x_0)]\omega_j$ を、展開係数を $p_i(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_0)$ と表し、それを基底関数と見立て線形結合として

$$f_j^\Omega = \sum_{i=1}^{n_p} a_i p_i(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_0) \omega_j$$

と表す。ここで $\{a_i\}$ は $f(\mathbf{x}_0)$ の所定次数までの微係数から成る係数に対応する。これらを周辺点についてまとめると行列形式では $\mathbf{f}^\Omega = \mathbf{P}^\Omega \mathbf{a}$ と表されるので、 \mathbf{P}^Ω の疑似逆行列により \mathbf{a} を最小二乗法で決定する。

Gaussian
波束の場合、計算領域外側に粒子を配置して**移動壁境界**として扱い、最小二乗法により解析的な漸近形を当て

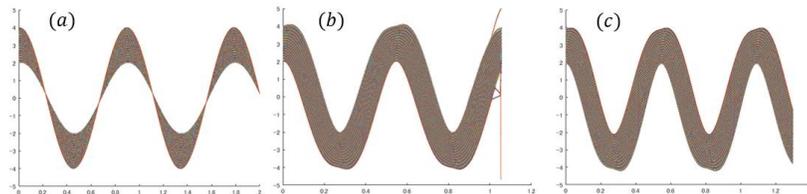


図1. 1次元調和振動子におけるGauss波束の時間発展。(a)量子ポテンシャルを無視した場合 ($Q = 0$), (b) Gauss被覆関数のみに基づく場合, (c) 計算領域外側に導入した移動壁境界および漸近形補正を併用した場合のトラジェクトリー比較。(c)において量子ポテンシャル計算の安定化が確認される。

はめることで、量子ポテンシャル計算の安定化が可能である。波束運動の記述では、Gaussian 波束を被覆関数(小さい密度を覆う関数)として用いることで、量子ポテンシャルの挙動を安定化できる(図1)。

典型的な量子効果の検証として二重スリット問題を解析し、量子トラジェクトリーと量子ポテンシャル分布の対応から干渉構造が再現されることを示す(図2)。本発表では、上記の安定化手法と MWLS に基づく微分推定の要点を整理し、複数の解析例とともに本手法の有効性および適用上の留意点を報告する。

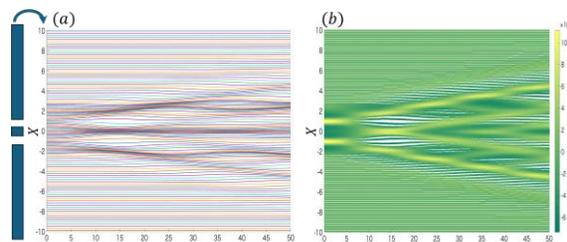


図2. 二重スリットにおける干渉構造。(a)量子トラジェクトリー, (b)量子ポテンシャル分布(黄色系ほど正, 緑色系ほど負の寄与が強い)