

プログラムのページ

担当 鈴木 誠道

7303 軸上ポテンシャル関数の最良多項式近似
相馬 嵩 (理化学研究所情報科学研究室)

半径1の無限に長い円とう内部のポテンシャル Φ は円とう座標 z, r, θ をもちいて次のように表わすことができる¹⁾.

$$\Phi(z, r, \theta) = \sum_{m=0}^{\infty} \Phi_m(z, r) \cos m(\theta - \theta_m),$$

$$\Phi_m(z, r) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{I_m(kr)}{I_m(k)} dk \int_{-\infty}^{\infty} F_m(\zeta) \cos k(z - \zeta) d\zeta. \quad (1)$$

ここで I_m は m 次の変形ベッセル関数, F_m は $\theta = \theta_m$ での境界条件である. 任意の関数 F_m は式 (2) で定義されるステップ関数

$$u(\zeta) = -\frac{1}{2} (\zeta < 0), \quad 0 (\zeta = 0), \quad +\frac{1}{2} (\zeta > 0) \quad (2)$$

の重ね合せとして

$$F_m(z) = \int_{-\infty}^{\infty} F'_m(\zeta) u(z - \zeta) d\zeta \quad (3)$$

と表わすことができるので, 境界条件 F_m に対するポテンシャルは

$$\Phi_m(z, r) = \int_{-\infty}^{\infty} F'_m(\zeta) \Phi_m^*(z - \zeta, r) d\zeta \quad (4)$$

となる. ここで Φ_m^* は境界条件 u に対するポテンシャルである. 式 (1) から

$$\Phi_m^*(z, r) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{I_m(kr) \sin kz}{k I_m(k)} dk \quad (5)$$

と表わすことができる. 一方円とう内部のポテンシャルは軸上のポテンシャル $\varphi_m(z)$ により

$$\Phi_m(z, r) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \varphi_m^{(2k)}(z) r^{2k+m}}{4^k k! (m+1)(m+2) \dots (m+k)} \quad (6)$$

のように展開できる¹⁾. Φ_m^* に対する軸上のポテンシャルを $B_m(z)$ とすると式 (5) と (6) より

表 1

関数	近似式	領域	精度	N	M	見出し
$B_0(z)$	$zP(z^2)/Q(z^2)$	$[-2.6, +2.6]$	7.01	4	3	B Z 00-0
$B_0(z)$	$0.5 - \exp(-j_{0,1}z)/j_{0,1}J_0'(j_{0,1})$	$[+2.6, +\infty]$	6.51	—	—	B Z 00-1
$B_0(z)$	$0.5 \tanh(\omega_0 z)$	$[-\infty, +\infty]$	2.35	—	—	B Z 00-2
$B_0'(z)$	$P(z^2)/Q(z^2)$	$[-3.0, +3.0]$	6.91	4	4	B Z 01-0
$B_0'(z)$	$\exp(-j_{0,1}z)/J_0'(j_{0,1})$	$[+3.0, +\infty]$	6.72	—	—	B Z 01-1
$B_0'(z)$	$0.5 \omega_0 \tanh'(\omega_0 z)$	$[-\infty, +\infty]$	2.10	—	—	B Z 01-2
$B_0^*(z)$	$zP(z^2)/Q(z^2)$	$[-3.3, +3.3]$	7.20	4	5	B Z 02-0
$B_0^*(z)$	$-j_{0,1} \exp(-j_{0,1}z)/J_0'(j_{0,1})$	$[+3.3, +\infty]$	6.70	—	—	B Z 02-1
$B_0^*(z)$	$0.5 \omega_0^2 \tanh''(\omega_0 z)$	$[-\infty, +\infty]$	1.61	—	—	B Z 02-2
$B_0'''(z)$	$P(z^2)/Q(z^2)$	$[-3.6, +3.6]$	7.13	7	5	B Z 03-0
$B_0'''(z)$	$j_{0,1}^2 \exp(-j_{0,1}z)/J_0'(j_{0,1})$	$[+3.6, +\infty]$	6.68	—	—	B Z 03-1
$B_0'''(z)$	$0.5 \omega_0^3 \tanh'''(\omega_0 z)$	$[-\infty, +\infty]$	0.79	—	—	B Z 03-2
$B_0^{(4)}(z)$	$zP(z^2)/Q(z^2)$	$[-3.9, +3.9]$	6.92	5	7	B Z 04-0
$B_0^{(4)}(z)$	$-j_{0,1}^3 \exp(-j_{0,1}z)/J_0'(j_{0,1})$	$[+3.9, +\infty]$	6.66	—	—	B Z 04-1
$B_0^{(4)}(z)$	$0.5 \omega_0^4 \tanh^{(4)}(\omega_0 z)$	$[-\infty, +\infty]$	0.0087	—	—	B Z 04-2
$B_1(z)$	$zP(z^2)/Q(z^2)$	$[-2.3, +2.3]$	7.38	4	3	B Z 10-0
$B_1(z)$	$0.5 + 0.5 \exp(-j_{1,1}z)/J_1'(j_{1,1})$	$[+2.3, +\infty]$	6.78	—	—	B Z 10-1
$B_1(z)$	$0.5 \tanh(\omega_1 z)$	$[-\infty, +\infty]$	2.55	—	—	B Z 10-2
$B_1'(z)$	$P(z^2)/Q(z^2)$	$[-2.5, +2.5]$	6.89	4	4	B Z 11-0
$B_1'(z)$	$-0.5 j_{1,1} \exp(-j_{1,1}z)/J_1'(j_{1,1})$	$[+2.5, +\infty]$	6.55	—	—	B Z 11-1
$B_1'(z)$	$0.5 \omega_1 \tanh'(\omega_1 z)$	$[-\infty, +\infty]$	2.18	—	—	B Z 11-2
$B_1''(z)$	$zP(z^2)/Q(z^2)$	$[-2.8, +2.8]$	6.86	4	5	B Z 12-0
$B_1''(z)$	$0.5 j_{1,1}^2 \exp(-j_{1,1}z)/J_1'(j_{1,1})$	$[+2.8, +\infty]$	6.62	—	—	B Z 12-1
$B_1''(z)$	$0.5 \omega_1^2 \tanh''(\omega_1 z)$	$[-\infty, +\infty]$	1.58	—	—	B Z 12-2

$j_{0,1} = 2.40482 \quad 55577$
 $J_0'(j_{0,1}) = 0.51914 \quad 74973$
 $j_{1,1} = 3.83170 \quad 59702$
 $J_1'(j_{1,1}) = -0.40275 \quad 93957$

$$B_m(z) = \frac{1}{2^m m! \pi} \int_0^\infty \frac{k^{m-1} \sin kz}{I_m(k)} dk \quad (7)$$

なることがわかる。

この関数は電子光学における収差計算などに現われるもので、 $m=0$ の場合が軸対称集束場を、 $m=1$ の場合がコサイン分布の偏向場を与える。

表1は関数 $B_0(z)$, $B_1(z)$ およびその微分に対する近似式、変数領域、精度、多項式の次数等を示す。ここで多項式 P, Q は

$$P(x) = \sum_{n=0}^N P_n x^n, \\ Q(x) = \sum_{m=0}^M Q_m x^m \quad (8)$$

で、また精度 a は領域内での最大絶対誤差を ε としたとき

$$a = -\log_{10} |\varepsilon| \quad (9)$$

で定義される。なお変数領域は \exp 関数をもちいた近似の精度が 6.5 となる条件から決めた。また $j_{m,n}$ はベッセル関数 $J_m(x)$ の n 番目のゼロ点である。参考のために \tanh 関数による近似の精度も同時に示している。そこにもちいられている定数 ω_0, ω_1 は $B_0(z)$ および $B_1(z)$ の近似で $z=0$ における勾配がそれぞれ $B_0'(0)$, $B_1'(0)$ と等しくなる条件

$$\omega_0 = 2B_0'(0) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{dk}{I_0(k)} \approx 1.32622749, \\ \omega_1 = 2B_1'(0) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{k}{I_1(k)} dk \approx 1.775785997 \quad (10)$$

から求めたものである。

表2は最良近似有理式の係数である。これらの係数を求めるのに山下氏のプログラム²⁾ をもちい、被近似関数の“原器”としては展開式³⁾

$$B_0(z) = \frac{1}{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\sin \left\{ \beta \left(m + \frac{1}{2} \right) z \right\}}{\left(m + \frac{1}{2} \right) I_0 \left\{ \beta \left(m + \frac{1}{2} \right) \right\}} \\ + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sinh(j_{0,n} z)}{j_{0,n} J_0'(j_{0,n}) \left\{ 1 + \exp \left(\frac{2\pi j_{0,n}}{\beta} \right) \right\}}, \quad (\beta > 0) \quad (11)$$

$$= \frac{1}{2} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp(-j_{0,n} z)}{j_{0,n} J_0'(j_{0,n})}, \quad (z \neq 0) \quad (12)$$

$$B_1(z) = \frac{\beta}{2\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\sin \left\{ \beta \left(m + \frac{1}{2} \right) z \right\}}{I_1 \left\{ \beta \left(m + \frac{1}{2} \right) \right\}}$$

表2 最良近似有理式の係数

B Z00-0			
P00	(+0)	+ .66311	25656
P01	(+0)	+ .57186	83446
P02	(-1)	+ .94697	56584
P03	(-2)	+ .22610	40893
P04	(-4)	- .19265	95798
Q00	(+1)	+ .1	
Q01	(+1)	+ .14893	99460
Q02	(+0)	+ .56930	41497
Q03	(-1)	+ .40609	72877
B Z01-0			
P00	(+0)	+ .66311	38698
P01	(+0)	+ .16560	10547
P02	(-1)	- .29190	47144
P03	(-2)	+ .17996	99811
P04	(-4)	- .43551	73211
Q00	(+1)	+ .1	
Q01	(+1)	+ .21308	72453
Q02	(+1)	+ .14257	76146
Q03	(+0)	+ .33742	89722
Q04	(-1)	+ .29522	05458
B Z02-0			
P00	(+1)	- .24947	96793
P01	(+0)	- .55857	55334
P02	(-1)	+ .77711	04526
P03	(-2)	- .37527	56277
P04	(-4)	+ .70298	99325
Q00	(+1)	+ .1	
Q01	(+1)	+ .29227	05829
Q02	(+1)	+ .29760	96767
Q03	(+1)	+ .12176	42341
Q04	(+0)	+ .18364	01201
Q05	(-1)	+ .12228	54515
B Z03-0			
P00	(+1)	- .24947	97722
P01	(+2)	+ .10479	06255
P02	(+1)	+ .35066	37294
P03	(+0)	- .81891	37215
P04	(-1)	+ .80345	95533
P05	(-2)	- .45900	47924
P06	(-3)	+ .15054	01956
P07	(-5)	- .22003	60371
Q00	(+1)	+ .1	
Q01	(+1)	+ .38961	07814
Q02	(+1)	+ .57352	19599
Q03	(+1)	+ .38336	31311
Q04	(+1)	+ .10464	58145
Q05	(-1)	+ .43874	67261
B Z04-0			
P00	(+2)	+ .40398	15818
P01	(+2)	- .47532	56274
P02	(+2)	- .18812	20168
P03	(+1)	+ .12575	19464
P04	(-1)	- .27275	69736
P05	(-3)	+ .16058	20814
Q00	(+1)	+ .1	
Q01	(+1)	+ .48517	32037
Q02	(+1)	+ .94576	38390
Q03	(+1)	+ .93354	32418
Q04	(+1)	+ .47782	26529
Q05	(+1)	+ .11361	90681
Q06	(-1)	+ .80144	47301

Q07	(-2)	+ .60143	70969
B Z 10-0			
P00	(+0)	+ .88789	24710
P01	(+0)	+ .88817	53832
P02	(+0)	+ .23496	57869
P03	(-2)	+ .73950	79753
P04	(-4)	- .71452	40971
Q00	(+1)	+ .1	
Q01	(+1)	+ .20094	21448
Q02	(+1)	+ .11249	51847
Q03	(+0)	+ .11911	83666
B Z 11-0			
P00	(+0)	+ .88789	28704
P01	(+0)	- .27985	70871
P02	(-1)	+ .40908	95652
P03	(-2)	- .32137	35592
P04	(-3)	+ .11051	63047
Q00	(+1)	+ .1	
Q01	(+1)	+ .27121	45258
Q02	(+1)	+ .24193	71357
Q03	(+0)	+ .73969	13895
Q04	(-1)	+ .48795	09685
B Z 12-0			
P00	(+1)	- .53759	36989
P01	(+1)	+ .14127	66904
P02	(+0)	- .16805	25685
P03	(-1)	+ .10515	58409
P04	(-3)	- .28371	88508
Q00	(+1)	+ .1	
Q01	(+1)	+ .35938	32539
Q02	(+1)	+ .47205	56957
Q03	(+1)	+ .26569	09830
Q04	(+0)	+ .53875	32014
Q05	(-1)	+ .27382	85617

$$-\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sinh(j_{1,n}z)}{J_1'(j_{1,n}) \left\{ 1 + \exp\left(\frac{2\pi j_{1,n}}{\beta}\right) \right\}}, \quad (13)$$

($\beta > 0$)

$$= \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp(-j_{1,n}z)}{J_1'(j_{1,n})}, \quad (z \neq 0) \quad (14)$$

をもとに二倍精度のルーチンを用意した。計算には FACOM 230-60 を使用した。極大点の近似値としてチェビシェフ多項式の極大点をもちいたのでは収れんしない場合があった。誤差の関数をディスプレイして対話型式により何回か修正して最終的な結果を得た。

最後に原器のコーディングをされた小野厚夫、浦野忠夫両氏に感謝する。

参考文献

- 1) Wendt, G.: Statische Felder und stationäre Ströme, Handbuch der Physik XVI, 1~164, (1958).
- 2) 山下真一郎: 偶関数の最良近似有理式を求めるプログラム, 情報処理, Vol. 12, No. 6, 372~376, (1971).
- 3) Verster, J. L.: On the Use of Gauzes in Electron Optics, Philips Res. Rpt. 18, 465~605, (1963).

(昭和 47 年 11 月 15 日受付)