数理解析研究所講究録 1441 巻 2005 年 14-27

分数型台形則の応用について

An application of the fractional trapezoidal rule

小藤 俊幸 TOSHIYUKI KOTO

名古屋大学大学院情報科学研究科
Graduate School of Information Science, Nagoya University
e-mail : koto@math.human.nagoya-u.ac.jp

1. はじめに

1980 年代中頃からの一連の研究 [4, 5, 6, 7, 8, 9] ([10, 11, 17] も参照) において, Ch. Lubich は, 畳み込み

$$\int_0^t f(\sigma)g(t-\sigma)\mathrm{d}\sigma \tag{1.1}$$

の線形多段階法による近似を考察している. 特に, $g(t)$ が $g(t)=t^{\mu-1}/\Gamma(\mu)$ (μ は正の実数) で与えられる場合 [6], (1.1) は, いわゆる分数階積分

$$I^{\mu}[f](t) = \frac{1}{\Gamma(\mu)}\int_0^t \frac{f(\sigma)}{(t-\sigma)^{1-\mu}}\,\mathrm{d}\sigma \tag{1.2}$$

となり, 対応する算法は, 分数型多段階法 (fractional multistep method) と呼ばれている. 最近, この近似法の台形則の場合が, [2, 19] において, シュレーディンガー方程式の数値計算に応用された. 彼らの提案するスキームの特性, 特に, 収束性を数値実験により調べようというのが, 本研究の目的である. まずは, Lubich の分数型台形則を簡単に紹介する. なお, 常微分方程式の数値解法に関する基礎事項については, 例えば, [13, 14] を, いわゆる fractional calculus については, [12, 15, 16] などを参照されたい.

$G(\lambda)$ を $g(t)$ のラプラス変換とし, 逆ラプラス変換の公式から得られる

$$g(t-\sigma) = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{\Gamma} G(\lambda)\mathrm{e}^{\lambda(t-\sigma)}\mathrm{d}\lambda$$

を (1.1) に代入して, (形式的に) 積分の順序を交換すると

$$\int_0^t f(\sigma)g(t-\sigma)\mathrm{d}\sigma = \frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_{\Gamma} G(\lambda)x(t,\lambda)\mathrm{d}\lambda$$
$$\left(x(t,\lambda) = \int_0^t \mathrm{e}^{\lambda(t-\sigma)}f(\sigma)\mathrm{d}\sigma\right)$$

のようになり, この $x(t,\lambda)$ は t に関して

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \lambda x + f(t), \quad x(0) = 0 \tag{1.3}$$

の微分方程式をみたす．そこで，(1.3) の線形多段階法による近似値 $x_n = x_n(\lambda) \approx x(t_n, \lambda)$ $(t_n = n\Delta t)$ を用いて，ステップ点 $t = t_n$ 上における (1.1) の値を

$$\int_0^{t_n} f(\sigma)g(t_n - \sigma)\mathrm{d}\sigma \approx \frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_\Gamma G(\lambda)x_n\,\mathrm{d}\lambda \tag{1.4}$$

で近似しようというのが，基本的なアイデアである．

例えば，(1.3) に対する台形則は

$$x_n - x_{n-1} = \frac{\Delta t}{2}\left[\lambda x_n + \lambda x_{n-1} + f(t_n) + f(t_{n-1})\right]$$

となる．便宜上，$x_{-1} = f(t_{-1}) = 0$ とおき，両辺に ζ^n をかけて，$n = 0$ から無限大までの和をとると，

$$(1-\zeta)\sum_{n=0}^{\infty} x_n\,\zeta^n = \frac{\Delta t}{2}(1+\zeta)\Big(\lambda\sum_{n=0}^{\infty} x_n\,\zeta^n + \sum_{n=0}^{\infty} f(t_n)\zeta^n\Big)$$

が得られる．さらに，この式は

$$\sum_{n=0}^{\infty} x_n\,\zeta^n = \left(\frac{2}{\Delta t}\frac{1-\zeta}{1+\zeta} - \lambda\right)^{-1}\sum_{n=0}^{\infty} f(t_n)\zeta^n$$

と書き直され，コーシーの積分定理により

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_\Gamma G(\lambda)x_n\,\mathrm{d}\lambda\right)\zeta^n &= \frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_\Gamma\left(\frac{2}{\Delta t}\frac{1-\zeta}{1+\zeta} - \lambda\right)^{-1} G(\lambda)\mathrm{d}\lambda\cdot\sum_{n=0}^{\infty} f(t_n)\zeta^n\\ &= G\left(\frac{2}{\Delta t}\frac{1-\zeta}{1+\zeta}\right)\sum_{n=0}^{\infty} f(t_n)\zeta^n\end{aligned}$$

が得られる．したがって，

$$G\left(\frac{2}{\Delta t}\frac{1-\zeta}{1+\zeta}\right) = \sum_{n=0}^{\infty}\omega_n(\Delta t)\zeta^n$$

のように展開するとき，(1.4) の近似値は

$$\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\int_\Gamma G(\lambda)x_n\,\mathrm{d}\lambda = \sum_{k=0}^{n}\omega_{n-k}(\Delta t)\,f(t_k)$$

と表すことができる．

特に，$g(t) = t^{-1/2}/\Gamma(1/2) = 1/(\pi\sqrt{t})$，すなわち，$\frac{1}{2}$ 階積分の場合，ラプラス変換は $G(\lambda) = 1/\sqrt{\lambda}$ となり，

$$\alpha_k = \prod_{j=1}^{[k/2]}\frac{2j-1}{2j} \tag{1.5}$$

で定義される数列 α_k を用いて

$$G\left(\frac{2}{\Delta t}\frac{1-\zeta}{1+\zeta}\right) = \sqrt{\frac{\Delta t}{2}\frac{1+\zeta}{1-\zeta}} = \sqrt{\frac{\Delta t}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\alpha_n\zeta$$

のように展開される．したがって，$\frac{1}{2}$ 階積分に対する台形則は

$$I^{1/2}[f](t_n) \approx \sqrt{\Delta t/2}\sum_{k=0}^{n}\alpha_{n-k}f(t_k) \tag{1.6}$$

で与えられる．

2. シュレーディンガー方程式の数値計算

2.1 透過境界条件

空間 1 次元のシュレーディンガー方程式に対する初期値問題

$$\begin{cases} \mathrm{i}\,w_t + w_{xx} = V(x)w & (t \geq 0,\ -\infty < x < \infty) \\ w(0,x) = \varphi(x) & (-\infty < x < \infty) \end{cases} \tag{2.1}$$

について考える．この問題の素朴な計算法として，左右の端点（人工境界）をできるだけ遠方にとり，両端点での値を 0 とおいて近似解を求めることが考えられる．このようにしても，端点から離れた部分においては，物理的に妥当と思われる近似解が得られる場合もあるが，端点付近では（反射による）不自然な振動が起るなどして，(2.1) の解とは言い難くなる．そのため，さまざまな（人工）境界条件を設定することにより，物理的に自然な解を得ることが試みられている．そのひとつが，透過境界条件 [19] と呼ばれる条件である（その他，例えば，吸収境界条件と呼ばれる条件については，[1] とその参考文献を参照されたい）．

ポテンシャル $V(x)$ と初期関数 $\varphi(x)$ の台は有界であると仮定し，ξ_L，ξ_R を，$\operatorname{supp} V$, $\operatorname{supp}\varphi \subset (\xi_L, \xi_R)$ となる定数とする．このとき，(2.1) の解は，以下の初期値・境界値問題の解となる [2]．

$$\begin{cases} \mathrm{i}\,w_t + w_{xx} = V(x)w & (t \geq 0,\ \xi_L \leq x \leq \xi_R) \\ w(t,\xi_L) - \mathrm{e}^{\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}I^{1/2}[w_x(\,\cdot\,,\xi_L)](t) = 0 & (t \geq 0) \\ w(t,\xi_R) + \mathrm{e}^{\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}I^{1/2}[w_x(\,\cdot\,,\xi_R)](t) = 0 & (t \geq 0) \\ w(0,x) = \varphi(x) & (\xi_L \leq x \leq \xi_R) \end{cases} \tag{2.2}$$

ここで，$I^{1/2}$ は，変数 t に関する $\frac{1}{2}$ 階積分を表す．実際，$w(t,x)$ を (2.1) の解とし，

$$\widetilde{w}(t,x) = \begin{cases} w(t, 2\xi_R - x) & (x < \xi_R) \\ w(t,x) & (x \leq \xi_R) \end{cases}$$

とおくと，$V(x)=0,\ \varphi(x)=0\ (x>\xi_R)$，

$$\widetilde{w}_x(t,x) \;=\; \begin{cases} -w_x(t,2\xi_R-x) & (x<\xi_R) \\ w_x(t,x) & (x>\xi_R) \end{cases}$$

の関係により，$\widetilde{w}(t,x)$ は

$$\begin{cases} \mathrm{i}\,\widetilde{w}_t+\widetilde{w}_{xx} \;=\; 2w_x(t,\xi_R)\delta(x-\xi_R) \quad (t\geq 0,\ -\infty<x<\infty) \\ \widetilde{w}(0,x)=0 \quad (-\infty<x<\infty) \end{cases}$$

をみたすことが示される．ここで，δ はディラックのデルタ関数である．したがって，$\widetilde{w}(t,x)$ はシュレーディンガー方程式の基本解

$$E(t,x) \;=\; \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}}{2\sqrt{\pi t}}\exp\left(\frac{\mathrm{i}\,x^2}{4t}\right) \tag{2.3}$$

を用いて，

$$\begin{aligned} \widetilde{w}(t,x) &= -2\,\mathrm{i}\int_0^t\int_{-\infty}^{\infty}E(t-\sigma,x-y)w_x(\sigma,\xi_R)\delta(y-\xi_R)\mathrm{d}y\mathrm{d}\sigma \\ &= -2\,\mathrm{i}\int_0^t E(t-\sigma,x-\xi_R)w_x(\sigma,\xi_R)\mathrm{d}\sigma \end{aligned}$$

のように表される．この式で，$x=\xi_R$ とおくと

$$E(t-\sigma,0) \;=\; \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}}{2\sqrt{\pi}}\frac{1}{\sqrt{t-\sigma}}$$

により，$x=\xi_R$ における境界条件が得られる．$x=\xi_L$ における条件も同様である．

2.2 時間変数に関する離散化

問題 (2.2) を変数 t に関して離散化する．ステップ点を $t_n=n\Delta t$ ($\Delta t>0,\ n=0,\ 1,\ \ldots$) とし，微分方程式については，通常の台形則を用い，境界条件に現れる $\frac{1}{2}$ 階積分については，分数型台形則 (1.6) を用いる．$w^n(x)$ を $w(t_n,x)$ の近似関数とするとき，(2.2) の変数 t に関する半離散近似は

$$\begin{cases} \mathrm{i}\,\dfrac{w^{n+1}-w^n}{\Delta t} \;=\; \dfrac{1}{2}\Big(-w^n_{xx}+V(x)w^n-w^{n+1}_{xx}+V(x)w^{n+1}\Big) \\ w^{n+1}(\xi_L)-\mathrm{e}^{\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{\Delta t/2}\displaystyle\sum_{k=0}^{n+1}\alpha_{n+1-k}\,w^k_x(\xi_L) \;=\; 0 \\ w^{n+1}(\xi_R)+\mathrm{e}^{\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{\Delta t/2}\displaystyle\sum_{k=0}^{n+1}\alpha_{n+1-k}\,w^k_x(\xi_R) \;=\; 0 \end{cases} \tag{2.4}$$

となり，さらに，

$$f^n(x) = -w_{xx}^n + [\,2\mathrm{i}/\Delta t + V(x)\,]w^n(x), \tag{2.5}$$

$$g_L^n = -\sum_{k=0}^{n} \alpha_{n+1-k}\, w_x^k(\xi_L), \tag{2.6}$$

$$g_R^n = -\sum_{k=0}^{n} \alpha_{n+1-k}\, w_x^k(\xi_R) \tag{2.7}$$

とおくことにより，

$$\begin{cases} w_{xx}^{n+1} + [\,2\mathrm{i}/\Delta t - V(x)\,]w^{n+1} = f^n(x) \\ w_x^{n+1}(\xi_L) - \mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t}\; w^{n+1}(\xi_L) = g_L^n \\ w_x^{n+1}(\xi_R) + \mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t}\; w^{n+1}(\xi_R) = g_R^n \end{cases} \tag{2.8}$$

のように表される．このとき，つぎが成り立つ．

定理 1 関数 $V(x)$ が $\mathrm{Im}\, V(x) \leq 0$ をみたすならば，2点境界値問題

$$\begin{cases} \psi_{xx} + [\,2\mathrm{i}/\Delta t - V(x)\,]\psi = 0 \\ \psi_x(\xi_L) - \mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t}\; \psi(\xi_L) = 0 \\ \psi_x(\xi_R) + \mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t}\; \psi(\xi_R) = 0 \end{cases} \tag{2.9}$$

は自明解 $\psi(x) \equiv 0$ 以外の解をもたない．

証明 第1式に $-\mathrm{i}\,\overline{\psi(x)}$ をかけて ξ_L から ξ_R まで積分すると，

$$-\mathrm{i}\int_{\xi_L}^{\xi_R} \psi_{xx}(x)\,\overline{\psi(x)}\,\mathrm{d}x + \frac{2}{\Delta t}\int_{\xi_L}^{\xi_R} [\,2/\Delta t + \mathrm{i}\,V(x)\,]\,|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x = 0 \tag{2.10}$$

さらに，第1項を部分積分と境界条件を使って変形すると，

$$\begin{aligned} &-\mathrm{i}\int_{\xi_L}^{\xi_R} \psi_{xx}(x)\,\overline{\psi(x)}\mathrm{d}x \\ &= -\mathrm{i}\Big[\psi_x(x)\,\overline{\psi(x)}\,\Big]_{\xi_L}^{\xi_R} + \mathrm{i}\int_{\xi_L}^{\xi_R} \psi_x(x)\,\overline{\psi_x(x)}\mathrm{d}x \\ &= -\mathrm{i}\Big(\psi_x(\xi_R)\,\overline{\psi(\xi_R)} - \psi_x(\xi_L)\,\overline{\psi(\xi_L)}\Big) + \mathrm{i}\int_{\xi_L}^{\xi_R} |\psi_x(x)|^2\,\mathrm{d}x \\ &= \mathrm{i}\,\mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t}\Big(|\psi(\xi_L)|^2 + |\psi(\xi_R)|^2\Big) + \mathrm{i}\int_{\xi_L}^{\xi_R} |\psi_x(x)|^2\,\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{\sqrt{\Delta t}}\Big(|\psi(\xi_L)|^2 + |\psi(\xi_R)|^2\Big) \\ &\qquad + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{\Delta t}}\Big(|\psi(\xi_L)|^2 + |\psi(\xi_R)|^2\Big) + \mathrm{i}\int_{\xi_L}^{\xi_R} |\psi_x(x)|^2\,\mathrm{d}x \end{aligned}$$

したがって，(2.10) 式の実部をとると，

$$\frac{1}{\sqrt{\Delta t}}\Big(|\psi(\xi_L)|^2+|\psi(\xi_R)|^2\Big)+\int_{\xi_L}^{\xi_R}[\,2/\Delta t-\mathrm{Im}\,V(x)\,]\,|\psi(x)|^2\,\mathrm{d}x\;=\;0$$

となり，$\mathrm{Im}\,V(x)\le 0$ ならば $\psi(x)\equiv 0$ が言える．(証明終り)

交代定理 (例えば，[20]) により，$\mathrm{Im}\,V(x)\le 0$ の条件のもと，(2.8) は，任意の $f^n(x)$, g_L^n, g_R^n に対して一意解をもつ．したがって，$w^0(x)$ を初期条件によって与えるとき，2 点境界値問題 (2.8) を反復して解くことにより，近似解 $w^n(x)$ を求めることができる．

このスキームは，ある種の安定性をもつことが知られている [2, 3]．すなわち，

$$\int_{x_L}^{x_R}|w^n(x)|^2\,\mathrm{d}x\;\le\;\int_{x_L}^{x_R}|w^0(x)|^2\,\mathrm{d}x\quad(n=1,\;2,\;\dots\,)\tag{2.11}$$

が成り立つ．また，Lubich の理論に基き，整合性も示される．しかし，スキームの収束性は，今のところ，明かではないようである．

3. 有限要素近似

有限要素法を用いて，半離散近似 (2.4) を，さらに，空間変数に関しても離散化する．(2.8) 式の第 1 式の両辺に $\phi\in H^1(\xi_L,\xi_R)$ をかけて ξ_L から ξ_R まで積分し，部分積分により変形すると，

$$\begin{aligned}&-\int_{\xi_L}^{\xi_R}\frac{\mathrm{d}w^{n+1}}{\mathrm{d}x}\,\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x+\int_{\xi_L}^{\xi_R}[\,2\mathrm{i}/\Delta t-V(x)\,]w^{n+1}(x)\phi(x)\mathrm{d}x\\&\quad+w_x^{n+1}(\xi_R)\phi(\xi_R)-w_x^{n+1}(\xi_L)\phi(\xi_L)\;=\;\int_{\xi_L}^{\xi_R}f^n(x)\phi(x)\mathrm{d}x\end{aligned}\tag{3.1}$$

が得られる．また，$f^n(x)$ の定義式 (2.5) と

$$w_{xx}^n+[\,2\mathrm{i}/\Delta t-V(x)\,]w^n\;=\;f^{n-1}(x)$$

から $f^n(x)=(4\mathrm{i}/\Delta t)w^n(x)-f^{n-1}(x)$ が成り立ち，$\phi(x)$ をかけて積分すると

$$\int_{\xi_L}^{\xi_R}f^n(x)\phi(x)\mathrm{d}x\;=\;\frac{4\mathrm{i}}{\Delta t}\int_{\xi_L}^{\xi_R}w^n(x)\phi(x)\mathrm{d}x-\int_{\xi_L}^{\xi_R}f^{n-1}(x)\phi(x)\mathrm{d}x\tag{3.2}$$

となる．さらに，(2.4) の境界条件から

$$w_x^{n+1}(\xi_L)\;=\;\mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\,\sqrt{2/\Delta t}\,\sum_{k=0}^{n+1}\beta_{n+1-k}\,w^k(\xi_L)\tag{3.3}$$

$$w_x^{n+1}(\xi_R)\;=\;-\,\mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\,\sqrt{2/\Delta t}\,\sum_{k=0}^{n+1}\beta_{n+1-k}\,w^k(\xi_R)\tag{3.4}$$

が得られる．ここで，β_n は，

$$\beta_n = (-1)^n \alpha_n \quad (n=0,\ 1,\ \ldots) \tag{3.5}$$

であり，(3.3)，(3.4) は $\alpha_0 \beta_0 = 1,\ \sum_{k=0}^{n} \alpha_{n-k} \beta_k = 0\ (n=0,\ 1,\ \ldots)$ の関係を使って導かれる．

区間 $[\xi_L, \xi_R]$ の M 等分点

$$x_j = \xi_L + j\Delta x \quad \left(\Delta x = \frac{\xi_R - \xi_L}{M},\quad j=0,\ 1,\ \ldots,\ M\right)$$

について，各小区間 $[x_j, x_{j+1}]$ 上では 1 次関数である $[\xi_L, \xi_R]$ 上の連続関数の空間を考える．$\phi_i\ (i=0,\ 1,\ \ldots,\ m)$ を

$$\phi_i(x_j) = \begin{cases} 1 & (i=j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

となる区分的 1 次関数とする．

このとき，(3.1) で $\phi = \phi_i$ とおくことにより

$$\begin{cases} -\displaystyle\int_{\xi_L}^{\xi_R} \frac{\mathrm{d}w^{n+1}}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}\phi_0}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x + \int_{\xi_L}^{\xi_R} [\,2\mathrm{i}/\Delta t - V(x)\,] w^{n+1}(x)\phi_0(x)\mathrm{d}x \\ \qquad\qquad - w_x^{n+1}(\xi_L) = \displaystyle\int_{\xi_L}^{\xi_R} f^n(x)\phi_0(x)\mathrm{d}x \\ -\displaystyle\int_{\xi_L}^{\xi_R} \frac{\mathrm{d}w^{n+1}}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}\phi_i}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x + \int_{\xi_L}^{\xi_R} [\,2\mathrm{i}/\Delta t - V(x)\,] w^{n+1}(x)\phi_i(x)\mathrm{d}x \\ \qquad\qquad = \displaystyle\int_{\xi_L}^{\xi_R} f^n(x)\phi_i(x)\mathrm{d}x \quad (i=1,\ 2,\ \ldots,\ M-1) \\ -\displaystyle\int_{\xi_L}^{\xi_R} \frac{\mathrm{d}w^{n+1}}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}\phi_M}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x + \int_{\xi_L}^{\xi_R} [\,2\mathrm{i}/\Delta t - V(x)\,] w^{n+1}(x)\phi_M(x)\mathrm{d}x \\ \qquad\qquad + w_x^{n+1}(\xi_R) = \displaystyle\int_{\xi_L}^{\xi_R} f^n(x)\phi_M(x)\mathrm{d}x \end{cases} \tag{3.6}$$

が得られる．右辺の積分は，(3.2) により

$$\int_{\xi_L}^{\xi_R} f^n(x)\phi_i(x)\mathrm{d}x = \frac{4\mathrm{i}}{\Delta t}\int_{\xi_L}^{\xi_R} w^n(x)\phi_i(x)\mathrm{d}x - \int_{\xi_L}^{\xi_R} f^{n-1}(x)\phi_i(x)\mathrm{d}x \tag{3.7}$$

の関係をみたす．

各 $n=1,\ 0,\ \ldots$ に対して，近似解を

$$w^n(x) \approx \sum_{j=0}^{M} z_j^n\,\phi_j(x) \quad (z_j^n \in \mathbb{C}) \tag{3.8}$$

のような形に表すとき，(3.3), (3.4) により，(3.6) の第１式，第３式の左辺に現れる端点での導関数値は

$$
\begin{aligned}
w_x^{n+1}(\xi_L) &\approx \mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t}\sum_{k=0}^{n+1}\beta_{n+1-k}\,z_0^k \\
&= \mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t}\,z_0^{n+1} + \hat{g}_L^n \qquad (3.9)\\
w_x^{n+1}(\xi_R) &\approx -\mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t}\sum_{k=0}^{n+1}\beta_{n+1-k}\,z_M^k \\
&= -\mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t}\,z_M^{n+1} + \hat{g}_R^n \qquad (3.10)
\end{aligned}
$$

で近似するのが自然である．ここで，

$$\hat{g}_L^n = \mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t}\sum_{k=0}^{n}\beta_{n+1-k}\,z_0^k \qquad (3.11)$$

$$\hat{g}_R^n = -\mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t}\sum_{k=0}^{n}\beta_{n+1-k}\,z_M^k \qquad (3.12)$$

とおいている．

(3.7) 式，(3.6) の $w^n(x)$, $w^{n+1}(x)$ を (3.8) の形の近似関数でおきかえて

$$F_i^n = \frac{4\mathrm{i}}{\Delta t}\sum_{j=0}^{M}\mu_{ij}\,z_j^n - F_i^{n-1} \quad (i = 0,\ 1,\ \ldots,\ M) \qquad (3.13)$$

$$
\left\{
\begin{aligned}
&\sum_{j=0}^{M}\gamma_{0j}\,z_j^{n+1} - \mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t}\,z_0^{n+1} = F_0^n + \hat{g}_L^n \\
&\sum_{j=0}^{M}\gamma_{ij}\,z_j^{n+1} = F_i^n \quad (i = 1,\ 2,\ \ldots,\ M-1) \\
&\sum_{j=0}^{M}\gamma_{Mj}\,z_j^{n+1} - \mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t}\,z_M^{n+1} = F_M^n - \hat{g}_R^n
\end{aligned}
\right. \qquad (3.14)
$$

が得られる．ここで，F_i^n は $\int_{\xi_L}^{\xi_R} f^n(x)\phi_i(x)\mathrm{d}x$ の近似値を表し，

$$\mu_{ij} = \int_{\xi_L}^{\xi_R}\phi_i(x)\phi_j(x)\mathrm{d}x \qquad (3.15)$$

$$\gamma_{ij} = \int_{\xi_L}^{\xi_R}\Big(-\frac{\mathrm{d}\phi_i}{\mathrm{d}x}\,\frac{\mathrm{d}\phi_j}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x + [\,2\mathrm{i}/\Delta t - V(x)\,]\phi_i(x)\phi_j(x)\Big)\mathrm{d}x \qquad (3.16)$$

である．関数 $f^n(x)$ の定義式 (2.5) から $f^0(x) = -\varphi_{xx} + [\,2\mathrm{i}/\Delta t + V(x)\,]\varphi(x)$ となり，初期関数に関する仮定 $\mathrm{supp}\,\varphi \subset (\xi_L, \xi_R)$ から

$$\int_{\xi_L}^{\xi_R} f^0(x)\phi_i(x)\mathrm{d}x = \int_{\xi_L}^{\xi_R}\Big(\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}x}\,\frac{\mathrm{d}\phi_i}{\mathrm{d}x} + [\,2\mathrm{i}/\Delta t + V(x)\,]\varphi(x)\phi_i(x)\Big)\mathrm{d}x$$

が成り立つ．区分的 1 次関数の範囲内で完結させるという点からは，F^0 は

$$\widehat{\gamma}_{ij} = \int_{\xi_L}^{\xi_R}\left(\frac{\mathrm{d}\phi_i}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}\phi_j}{\mathrm{d}x} + [\,2\mathrm{i}/\Delta t + V(x)\,]\phi_i(x)\phi_j(x)\right)\mathrm{d}x$$

とおいて

$$F_i^0 = \sum_{j=0}^{M}\widehat{\gamma}_{ij}\,z_j^0 \quad \left(z_j^0 = \varphi(x_j)\right) \tag{3.17}$$

のように与えるのがよい．

さらに，

$$\boldsymbol{z}^n = [z_0^n\,,\,z_1^n\,,\,\dots\,,\,z_M^n]^T$$

とおき，行列 $A = (a_{ij})_{0\le i,j\le M}$，ベクトル $\boldsymbol{b}^n = [b_0^n\,,b_1^n\,,\,\dots\,,\,b_M^n]^T$ を

$$a_{00} = \gamma_{00} - \mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t},\quad a_{MM} = \gamma_{MM} - \mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t},\quad \boldsymbol{a}_{ij} = \gamma_{ij}\ \ (\text{それ以外})$$
$$b_0^n = F_0^n + \widehat{g}_L^n,\quad b_M^n = F_M^n - \widehat{g}_R^n,\quad \boldsymbol{b}_i^n = F_i^n\ (1\le i\le M-1)$$

で定義すると，(3.14) は

$$A\boldsymbol{z}^{n+1} = \boldsymbol{b}^n \tag{3.18}$$

のように表される．特に，$V(x)\equiv 0$ の場合，

$$A = \frac{1}{\Delta x}\begin{bmatrix} -1 & 1 & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \text{\Large 0} & \\ & 1 & -2 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \text{\Large 0} & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -1 \end{bmatrix}$$
$$+\frac{2\mathrm{i}}{\Delta t}\frac{\Delta x}{6}\begin{bmatrix} 2 & 1 & & & & \\ 1 & 4 & 1 & & \text{\Large 0} & \\ & 1 & 4 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \text{\Large 0} & & & 1 & 4 & 1 \\ & & & & 1 & 2 \end{bmatrix} - \mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{\frac{2}{\Delta t}}\begin{bmatrix} 1 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & 0 & & \text{\Large 0} & \\ & 0 & 0 & 0 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ \text{\Large 0} & & & 0 & 0 & 0 \\ & & & & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

となる．また，定理 1 に対応して，つぎが成り立つ．したがって，初期関数から (3.17) を計算し（$z_0^0 = z_M^0 = 0$ とし），以降,「(3.11), (3.12), (3.13) で右辺を計算して，連立一次方程式 (3.14) を解く」 を $n = 0,\ 1,\ \dots$ について繰り返すことにより，近似解を求めることができる

定理 2 関数 $V(x)$ が $\mathrm{Im}\,V(x)\le 0$ をみたすならば，A は正則である．

証明　複素数を成分とする $M+1$ 次元ベクトル $\boldsymbol{z}=[z_0\,,\,z_1\,,\,\ldots\,,\,z_M]^T$ に対して，$\phi_{\boldsymbol{z}}(x)=\sum_{j=0}^{M} z_j\,\phi_j(x)$ とおくと，行列 A の定義により

$$\begin{aligned}\overline{\boldsymbol{z}}^T A\boldsymbol{z} &= \int_{\xi_L}^{\xi_R}\Bigl(-\Bigl|\frac{\mathrm{d}\phi_{\boldsymbol{z}}}{\mathrm{d}x}\Bigr|^2+[\,2\mathrm{i}/\Delta t-V(x)]\,|\phi_{\boldsymbol{z}}(x)|^2\Bigr)\mathrm{d}x \\ &\quad -\mathrm{e}^{-\frac{\pi}{4}\mathrm{i}}\sqrt{2/\Delta t}\,\bigl(|z_0|^2+|z_M|^2\bigr) \end{aligned} \tag{3.19}$$

が成り立つ．特に，右辺の虚部は

$$\int_{\xi_L}^{\xi_R}[\,2/\Delta t-\mathrm{Im}\,V(x)\,]\,|\phi_{\boldsymbol{z}}(x)|^2\,\mathrm{d}x+\frac{1}{\sqrt{\Delta t}}\bigl(|z_0|^2+|z_M|^2\bigr) \tag{3.20}$$

となることから，$\mathrm{Im}\,V(x)\leq 0$ の条件のもと，$A\boldsymbol{z}=\boldsymbol{0}$ ならば，$\phi_{\boldsymbol{z}}(x)\equiv 0$，すなわち，$\boldsymbol{z}=\boldsymbol{0}$ であることが言える．したがって，$\mathrm{Im}\,V(x)\leq 0$ ならば，A は正則である．(証明終り)

4. 数値実験

自由粒子 $V(x)\equiv 0$ の場合を考えることとし，初期関数を

$$\varphi(x) \;=\; \rho(x)\exp(2\mathrm{i}x)$$

の形で与える．ここで，$\rho(x)$ は実数値関数であり，具体的には，

$$\rho(x) \;=\; \begin{cases} (1-x^2)^3 & (-1<x<1) \\ 0 & (x<-1,\ 1<x) \end{cases} \tag{4.1}$$

$$\rho(x) \;=\; \begin{cases} (1-x^2)^4 & (-1<x<1) \\ 0 & (x<-1,\ 1<x) \end{cases} \tag{4.2}$$

$$\rho(x) \;=\; \begin{cases} \exp\Bigl(-\dfrac{x^2}{1-x^2}\Bigr) & (-1<x<1) \\ 0 & (x<-1,\ 1<x) \end{cases} \tag{4.3}$$

の 3 つを用いる．いずれも，台が $[-1,1]$ であり，(4.1) は C^2 級，(4.2) は C^3 級，(4.3) は C^∞ 級となっている．人工境界の端点の値は

$$\xi_L=-5, \qquad \xi_R=5 \tag{4.4}$$

を用いる．

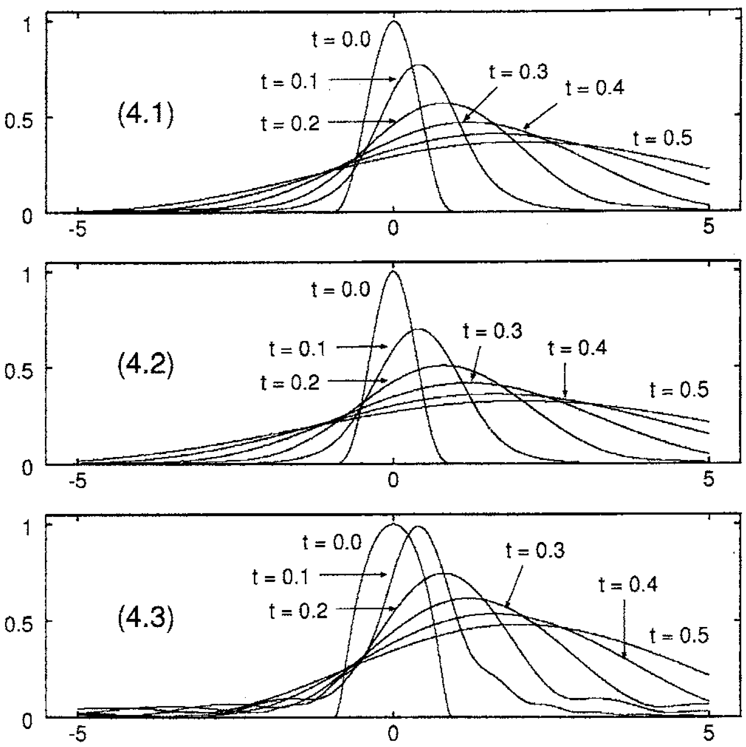

図 4.1 シュレーディンガー方程式の近似解

図 4.1 は各初期関数に対する近似解の様子を示している．横軸が x，縦軸は $|\ w\ |^2$ である．また，**図 4.2** は，初期関数を (4.1) で与えた場合の $t = t_n$ における近似値のエネルギー関数

$$\int_{\xi_L}^{\xi_R} |\phi^n(x)|^2\,\mathrm{d}x \quad \left(\phi^n(x) = \sum_{j=0}^{M} z_j^n \phi_j(x)\right) \tag{4.5}$$

の変化を横軸を t にとって示したものである．空間変数に関する刻み幅は $\Delta x = 0.01$ に固定し，Δt を $\Delta t = 0.1$, $\Delta t = 0.05$, $\Delta t = 0.001$ のように変えた場合の結果が示されている．Δt の大きさによって，(4.5) の値そのものはかなり変化するが，時間に関して単調に減少する傾向がいずれの初期関数，Δt に関しても見られる．

表 1.1，**図 4.3** は，スキームの収束性を見るため，$\Delta t = \Delta x$ の関係を保ちながら，刻み幅を半分，半分と縮めていったときに，誤差がどのような傾向を示すかを調べた結果を表す．具体的には，$0 \leq t \leq 0.5$ とし，$\Delta t = 0.5/N$（N は整数）の形で Δt を与える．$\Delta t = \Delta x$ とするため，$[\xi_L, \xi_R] = [-5, 5]$ を $M = 20N$ 等分して計算を行う．ある N, M で得られる近似値を $z_j^n \approx w(n\Delta t, j\Delta x)$ とし，さらに，N, M を $2N$, $2M$ に変えて得られる近似値を $\widehat{z}_j^n \approx w(n(\Delta t/2), j(\Delta x/2))$ とするとき，端点 $t = 0.5$ における両者の差

$$\epsilon_N = \max_{1 \leq j \leq M} |z_j^N - \widehat{z}_{2j}^{2N}| \tag{4.6}$$

は，近似値に含まれる誤差の目安を与えると考えられる．C^2 級の初期関数に対応する (4.1) については，$\mathcal{O}(\Delta t)$，C^3 級の (4.2)，C^∞ 級の (4.3) については，$\mathcal{O}(\Delta t^2)$ の収束傾向が見られる．

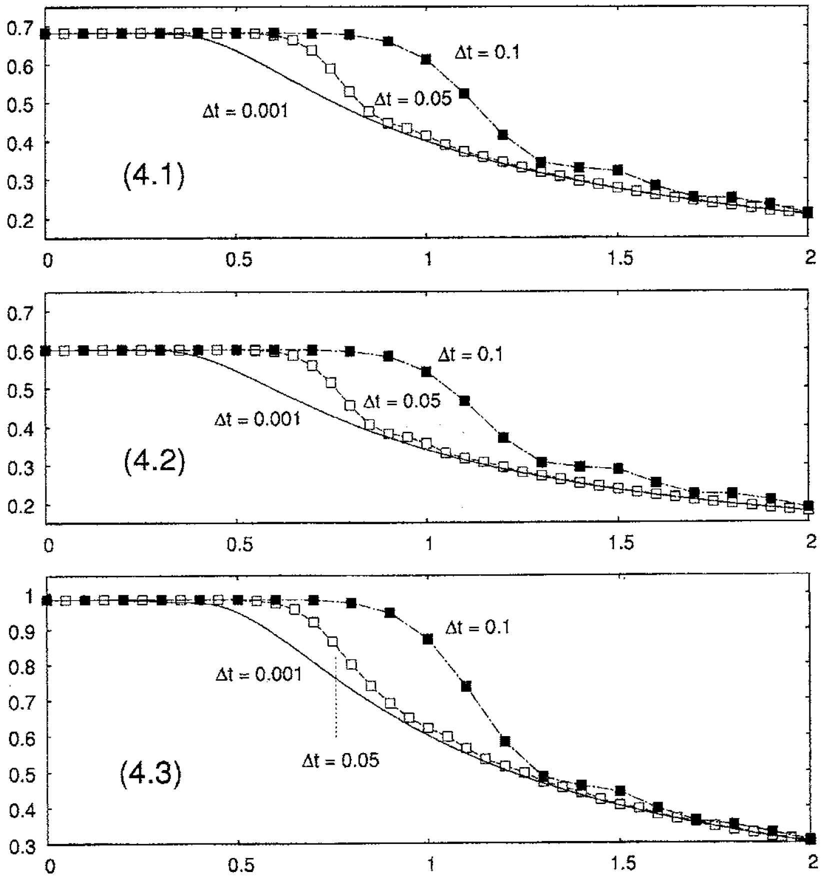

図 4.2 エネルギー関数の時間変化

表 1.1 数値解の誤差の特性

	(4.1)		(4.2)		(4.3)	
N	ϵ_N	$-\log_2 \epsilon_N$	ϵ_N	$-\log_2 \epsilon_N$	ϵ_N	$-\log_2 \epsilon_N$
50	1.23×10^{-2}	6.35	1.12×10^{-2}	6.48	1.41×10^{-2}	6.15
100	3.12×10^{-3}	8.32	2.75×10^{-3}	8.50	4.40×10^{-3}	7.83
200	8.78×10^{-4}	10.15	6.79×10^{-4}	10.52	8.61×10^{-4}	10.18
400	4.00×10^{-4}	11.29	1.69×10^{-4}	12.53	2.01×10^{-4}	12.28
800	1.99×10^{-4}	12.30	4.24×10^{-5}	14.53	4.46×10^{-5}	14.45
1600	9.93×10^{-5}	13.30	1.05×10^{-5}	16.53	1.11×10^{-5}	16.47
3200	4.96×10^{-5}	14.30	2.65×10^{-6}	18.53	2.74×10^{-6}	18.48

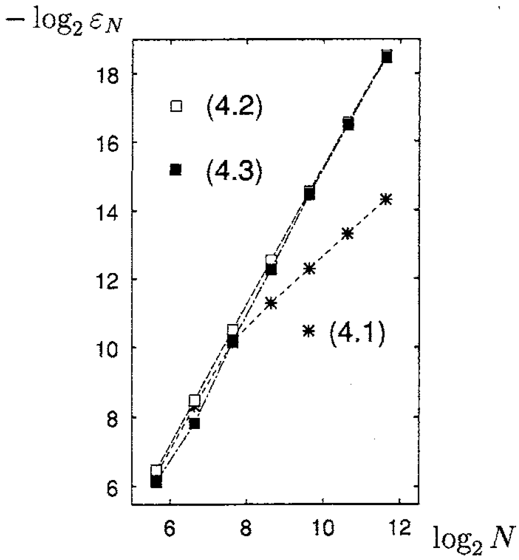

図 4.3 数値解の誤差の特性

謝辞 田端正久 九州大学教授より有益なご助言を頂きました．感謝いたします．

参考文献

[1] I. Alonso-Mallo, N. Reguera, Discrete absorbing boundary conditions for Schrödinger-type equations. Practical implementation, *Math. Comp.*, **73** (2004), 127–142.

[2] X. Antoine, C. Besse, Unconditionally stable discretization schemes of non-reflecting boundary conditions for the one-dimensional Schrödinger equation, *J. Comput. Phys.* **188** (2003), 157–175.

[3] X. Antoine, C. Besse, V. Mouysset, Numerical schemes for the simulation of the two-dimensional Schrödinger equation using non-reflecting boundary conditions, *Math. Comp.* **73** (2004), 1779–1799.

[4] Ch. Lubich, Fractional linear multistep methods for Abel-Volterra integral equations of the second kind, *Math. Comp.* **45** (1985), 463–469.

[5] Ch. Lubich, A stability analysis of convolution quadratures for Abel-Volterra integral equations, *IMA J. Numer. Anal.* **6** (1986), 87–101.

[6] Ch. Lubich, Discretized fractional calculus, *SIAM J. Math. Anal.* **17** (1986), 704–719.

[7] Ch. Lubich, Fractional linear multistep methods for Abel-Volterra integral equations of the first kind, *IMA J. Numer. Anal.* **7** (1987), 97–106.

[8] Ch. Lubich, Convolution quadrature and discretized operational calculus. I, *Numer. Math.* **52** (1988), 129–145.

[9] Ch. Lubich, Convolution quadrature and discretized operational calculus. II, *Numer. Math.* **52** (1988), 413–425.

[10] Ch. Lubich, On convolution quadrature and Hille-Phillips operational calculus, *Appl. Numer. Math.* **9** (1992), 187–199.

[11] Ch. Lubich, A. Schädle, Fast convolution for nonreflecting boundary conditions, *SIAM J. Sci. Comput.* **24** (2002), 161–182.

[12] K. S. Miller, B. Ross, *An introduction to the fractional calculus and fractional differential equations*, John Wiley & Sons Inc., New York, 1993.

[13] 三井斌友，小藤俊幸，常微分方程式の解法，共立出版，2000.

[14] 三井斌友，小藤俊幸，齊藤善弘，微分方程式による計算科学入門，共立出版，2004.

[15] K. Nishimoto, *Fractional calculus*, Descartes Press Co., Koriyama, 1984.

[16] K. B. Oldham, J. Spanier, *The fractional calculus*, Academic Press, New York-London, 1974.

[17] A. Schädle, Non-reflecting boundary conditions for the two-dimensional Schrödinger equation, *Wave Motion* **35** (2002), 181–188.

[18] X. Wu, Z.-Z. Sun, Convergence of difference scheme for heat equation in unbounded domains using artificial boundary conditions, *Appl. Numer. Math.* **50** (2004), 261–277.

[19] D. Yevick, T. Friese, F. Schmidt, A comparison of transparent boundary conditions for the Fresnel equation, *J. Comput. Phys.* **168** (2001), 433–444.

[20] 吉田耕作，微分方程式の解法 第２版，岩波全書，1978.