

## 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

$$\int_0^t f(\sigma)g(t-\sigma)d\sigma \quad (1.1)$$

の線形多段階法による近似を考察している. 特に,  $g(t)$  が  $g(t) = t^{\mu-1}/\Gamma(\mu)$  ( $\mu$  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

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

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

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

を (1.1) に代入して, (形式的に) 積分の順序を交換すると

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

のようになり, この  $x(t, \lambda)$  は  $t$  に関して

$$\frac{dx}{dt} = \lambda x + f(t), \quad x(0) = 0 \quad (1.3)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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,

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

で定義される数列  $\alpha_k$  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

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

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

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

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,  $\xi_L, \xi_R$  を,  $\text{supp } V, \text{supp } \varphi \subset (\xi_L, \xi_R)$  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].

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

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,

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

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

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

の関係により,  $\tilde{w}(t, x)$  は

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

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

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

を用いて,

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

のように表される. この式で,  $x = \xi_R$  とおくと

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

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  $t_n = n\Delta t$  ( $\Delta t > 0$ ,  $n = 0, 1, \dots$ ) 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

$$\begin{cases} i \frac{w^{n+1} - w^n}{\Delta t} = \frac{1}{2} (-w_{xx}^n + V(x)w^n - w_{xx}^{n+1} + V(x)w^{n+1}) \\ w^{n+1}(\xi_L) - e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\Delta t/2} \sum_{k=0}^{n+1} \alpha_{n+1-k} w_x^k(\xi_L) = 0 \\ w^{n+1}(\xi_R) + e^{\frac{\pi}{4}i} \sqrt{\Delta t/2} \sum_{k=0}^{n+1} \alpha_{n+1-k} w_x^k(\xi_R) = 0 \end{cases} \quad (2.4)$$

となり, さらに,

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

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

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

とおくことにより,

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

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

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

は自明解  $\psi(x) \equiv 0$  以外の解をもたない.

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

$$-i \int_{\xi_L}^{\xi_R} \psi_{xx}(x) \overline{\psi(x)} dx + \frac{2}{\Delta t} \int_{\xi_L}^{\xi_R} [2/\Delta t + iV(x)] |\psi(x)|^2 dx = 0 \quad (2.10)$$

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,

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

したがって、(2.10) 式の実部をとると、

$$\frac{1}{\sqrt{\Delta t}} \left( |\psi(\xi_L)|^2 + |\psi(\xi_R)|^2 \right) + \int_{\xi_L}^{\xi_R} [2/\Delta t - \text{Im } V(x)] |\psi(x)|^2 dx = 0$$

となり、 $\text{Im } V(x) \leq 0$  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、 $\text{Im } V(x) \leq 0$  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、

$$\int_{x_L}^{x_R} |w^n(x)|^2 dx \leq \int_{x_L}^{x_R} |w^0(x)|^2 dx \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (2.11)$$

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、空間変数に対しても離散化する。(2.8) 式の第1式の両辺に  $\phi \in H^1(\xi_L, \xi_R)$  をかけて  $\xi_L$  から  $\xi_R$  まで積分し、部分積分により変形すると、

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

が得られる。また、 $f^n(x)$  の定義式 (2.5) と

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

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

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

となる。さらに、(2.4) の境界条件から

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

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

が得られる。ここで、 $\beta_n$  は、

$$\beta_n = (-1)^n \alpha_n \quad (n = 0, 1, \dots) \quad (3.5)$$

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

区間  $[\xi_L, \xi_R]$  の  $M$  等分点

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

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。 $\phi_i$  ( $i = 0, 1, \dots, m$ ) 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

$$\left\{ \begin{array}{l} - \int_{\xi_L}^{\xi_R} \frac{dw^{n+1}}{dx} \frac{d\phi_0}{dx} dx + \int_{\xi_L}^{\xi_R} [2i/\Delta t - V(x)] w^{n+1}(x) \phi_0(x) dx \\ \quad - w_x^{n+1}(\xi_L) = \int_{\xi_L}^{\xi_R} f^n(x) \phi_0(x) dx \\ - \int_{\xi_L}^{\xi_R} \frac{dw^{n+1}}{dx} \frac{d\phi_i}{dx} dx + \int_{\xi_L}^{\xi_R} [2i/\Delta t - V(x)] w^{n+1}(x) \phi_i(x) dx \\ \quad = \int_{\xi_L}^{\xi_R} f^n(x) \phi_i(x) dx \quad (i = 1, 2, \dots, M-1) \\ - \int_{\xi_L}^{\xi_R} \frac{dw^{n+1}}{dx} \frac{d\phi_M}{dx} dx + \int_{\xi_L}^{\xi_R} [2i/\Delta t - V(x)] w^{n+1}(x) \phi_M(x) dx \\ \quad + w_x^{n+1}(\xi_R) = \int_{\xi_L}^{\xi_R} f^n(x) \phi_M(x) dx \end{array} \right. \quad (3.6)$$

が得られる。右辺の積分は、(3.2) により

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

の関係をみだす。

各  $n = 1, 0, \dots$  に対して、近似解を

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

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

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

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

で近似するのが自然である。ここで,

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

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

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

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

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

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

$$\mu_{ij} = \int_{\xi_L}^{\xi_R} \phi_i(x) \phi_j(x) dx \quad (3.15)$$

$$\gamma_{ij} = \int_{\xi_L}^{\xi_R} \left( -\frac{d\phi_i}{dx} \frac{d\phi_j}{dx} dx + [2i/\Delta t + V(x)] \phi_i(x) \phi_j(x) \right) dx \quad (3.16)$$

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

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



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

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

とおいて

$$F_i^0 = \sum_{j=0}^M \hat{\gamma}_{ij} z_j^0 \quad (z_j^0 = \varphi(x_j)) \quad (3.17)$$

のように与えるのがよい.

さらに,

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

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

$$a_{00} = \gamma_{00} - e^{-\frac{\pi}{4}i} \sqrt{2/\Delta t}, \quad a_{MM} = \gamma_{MM} - e^{-\frac{\pi}{4}i} \sqrt{2/\Delta t}, \quad a_{ij} = \gamma_{ij} \quad (\text{それ以外})$$

$$b_0^n = F_0^n + \hat{g}_L^n, \quad b_M^n = F_M^n - \hat{g}_R^n, \quad b_i^n = F_i^n \quad (1 \leq i \leq M-1)$$

で定義すると, (3.14) は

$$A \mathbf{z}^{n+1} = \mathbf{b}^n \quad (3.18)$$

のように表される. 特に,  $V(x) \equiv 0$  の場合,

$$A = \frac{1}{\Delta x} \begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \\ & 1 & -2 & 1 & \\ & & 1 & -2 & 1 \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

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

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  $\text{Im } V(x) \leq 0$  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  $\mathbf{z} = [z_0, z_1, \dots, z_M]^T$  に対して,  
 $\phi_{\mathbf{z}}(x) = \sum_{j=0}^M z_j \phi_j(x)$  とおくと, 行列  $A$  の定義により

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{z}}^T A \mathbf{z} = & \int_{\xi_L}^{\xi_R} \left( - \left| \frac{d\phi_{\mathbf{z}}}{dx} \right|^2 + [2i/\Delta t - V(x)] |\phi_{\mathbf{z}}(x)|^2 \right) dx \\ & - e^{-\frac{\pi}{4}i} \sqrt{2/\Delta t} (|z_0|^2 + |z_M|^2) \end{aligned} \quad (3.19)$$

が成り立つ. 特に, 右辺の虚部は

$$\int_{\xi_L}^{\xi_R} [2/\Delta t - \text{Im} V(x)] |\phi_{\mathbf{z}}(x)|^2 dx + \frac{1}{\sqrt{\Delta t}} (|z_0|^2 + |z_M|^2) \quad (3.20)$$

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

$$\varphi(x) = \rho(x) \exp(2ix)$$

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,

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

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

$$\rho(x) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{x^2}{1-x^2}\right) & (-1 < x < 1) \\ 0 & (x < -1, 1 < x) \end{cases} \quad (4.3)$$

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  $C^\infty$  級となっている. 人工境界の端点の値は

$$\xi_L = -5, \quad \xi_R = 5 \quad (4.4)$$

を用いる.

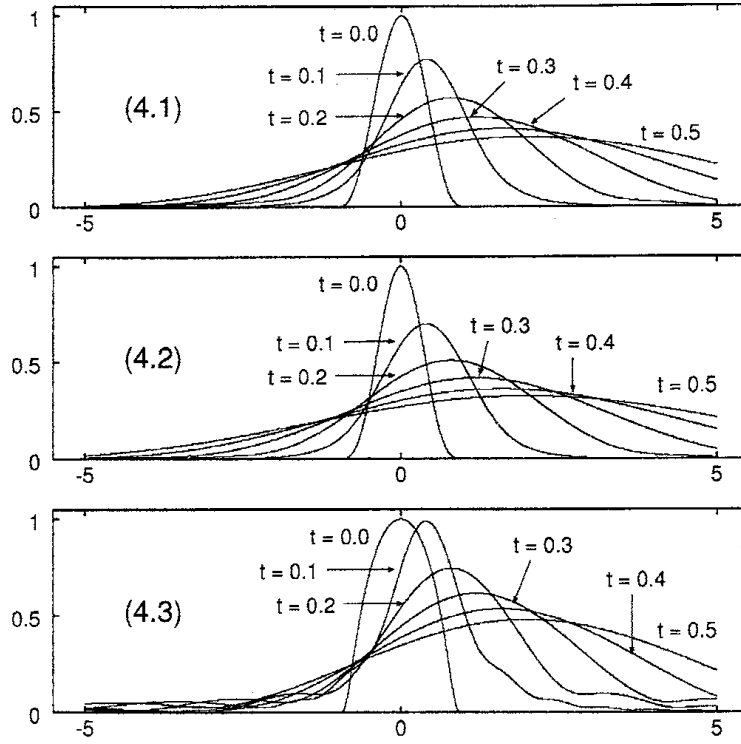


図 4.1 シュレーディンガー方程式の近似解

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

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

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、 $\Delta t$  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。 $\Delta t$  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、 $\Delta t$  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  $\Delta t$  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  $\hat{z}_j^n \approx w(n(\Delta t/2), j(\Delta x/2))$  とするとき、端点  $t = 0.5$  における両者の差

$$\epsilon_N = \max_{1 \leq j \leq M} |z_j^N - \hat{z}_{2j}^{2N}| \quad (4.6)$$

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),  $C^\infty$  級の (4.3) については、 $\mathcal{O}(\Delta t^2)$  の収束傾向が見られる。

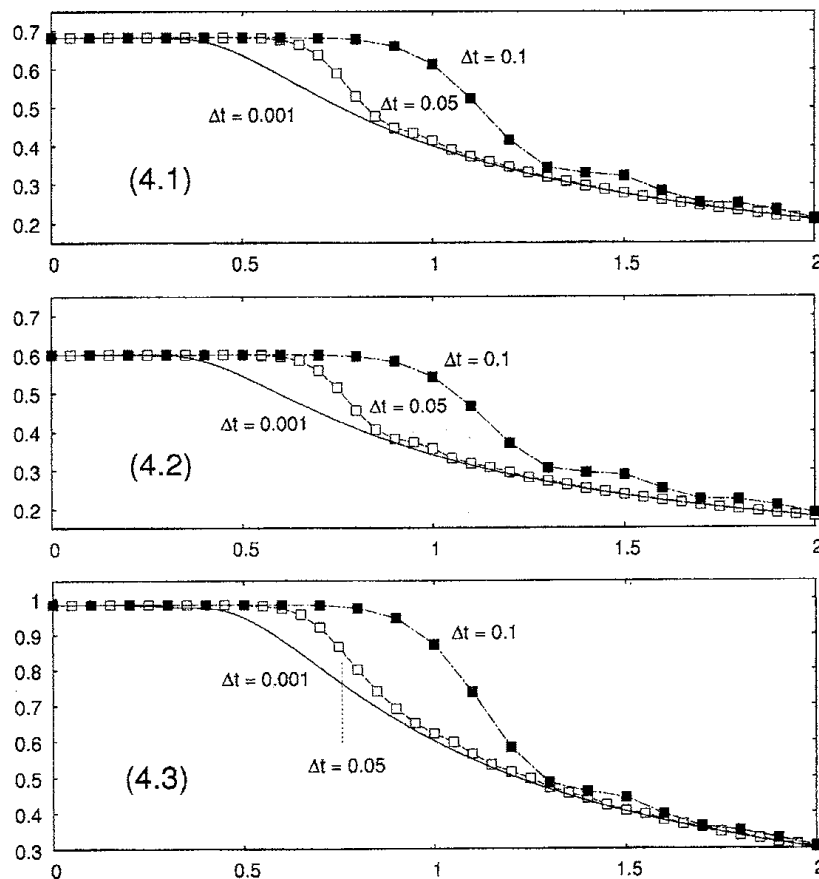


図 4.2 エネルギー関数の時間変化

表 1.1 数値解の誤差の特性

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

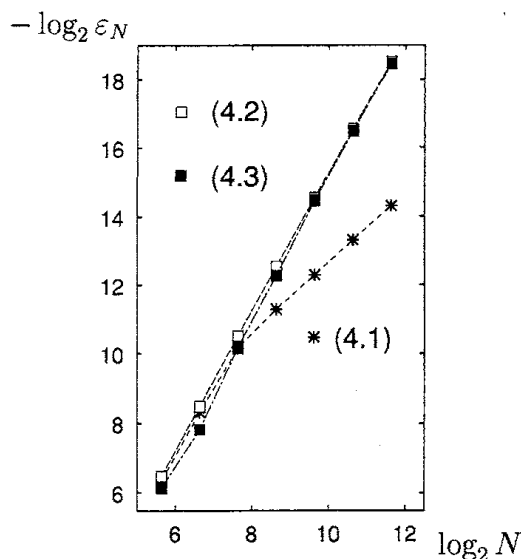


図 4.3 数値解の誤差の特性

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.