数理解析研究所講究録
第1551巻 2007年 63-68

確率モデルにおける近似法

兵庫県立大学工学研究科　乾　徳夫 (Norio Inui)
Graduate School of Engineering,
University of Hyogo

1 はじめに

講演では確率モデルの解析に必要なモンテカルロシュミレーション法，級数展開法を述べたあとに，De Raedt が提案し Richadson が発展させた積公式法による1次元 Schödinger 方程式の解法について解説した．この手法は数理生物に多用されている拡散方程式を解く際に利用できる．本講究では，積公式法の数値誤差について報告する．

2 1次元 Schödinger 方程式

自由粒子の1次元 Schödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{1}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} \tag{1}$$

を考える．本講究では $\hbar=1/2$, $m=1$ なる単位系を採用し，下記の偏微分方程式を積公式法 [1, 2] で解いた場合に生じる誤差について考察する．

$$i\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} \tag{2}$$

3 積公式法のアルゴリズム

3.1 時空間の離散化

長さ1の円周上で Schödinger 方程式を考える．円周を $N-1$ 等分する．したがって，格子数は N であり格子間隔 Δx は $1/(N-1)$ である．格子には番号0から $N-1$ までの整数が割り当てられており，その変数を n で表す．時間は間隔は Δt で分割し離散時間を τ で表す．また，時刻 $\tau\Delta t$, 場所 $n\Delta x$ での波動関数の値を $\psi_{n,\tau}$ と表す．

積公式法における波動関数の写像を示す [2]. $V=0$ の場合，τ から $\tau+1$ への変換は次の二つの演算子を続けて作用することにより実行される．

$$e^{i\Delta tT_{even}}\psi_{n,\tau} \equiv \begin{cases}\alpha\psi_{n,\tau}+\beta\psi_{n+1,\tau} & n=even\\ \alpha\psi_{n,\tau}+\beta\psi_{n-1,\tau} & n=odd\end{cases} \tag{3}$$

$$e^{i\Delta tT_{odd}}\psi_{n,\tau} \equiv \begin{cases}\alpha\psi_{n,\tau}+\beta\psi_{n-1,\tau} & n=even\\ \alpha\psi_{n,\tau}+\beta\psi_{n+1,\tau} & n=odd\end{cases} \tag{4}$$

3.2 格子の偶奇性に着目したアルゴリズムの書き換え

Δx と Δt が有限である限り，(4) で定義される差分方程式の解と偏微分方程式 (2) の解との間には誤差を生じる．その誤差を評価するために差分方程式をできるかぎり解析的に解いていく．積公式法では偶数番目の格子点と奇数番目の格子点では変換規則が異なる．そこで，偶数番目の波動関数 ψ^e と奇数番目の波動関数 ψ^o を次の様に定義する．

$$\begin{aligned} \psi^e_{j,\tau} &= \psi_{2j,\tau}, \quad j = 0,1,2,\ldots N/2 \\ \psi^o_{j,\tau} &= \psi_{2j+1,\tau}, \quad j = 0,1,2,\ldots N/2-1 \end{aligned} \tag{5}$$

この変換により，$\psi^e_{j,\tau}$ と $\psi^o_{j,\tau}$ の時間発展は次式で与えられる．

$$\begin{aligned} \psi^e_{j,\tau} &= \alpha^2\psi^e_{j,\tau} + \alpha\beta\psi^o_{j,\tau} + \alpha\beta\psi^o_{j-1,\tau} + \beta^2\psi^e_{j-1,\tau} \\ \psi^o_{j,\tau} &= \alpha^2\psi^o_{j,\tau} + \alpha\beta\psi^e_{j,\tau} + \alpha\beta\psi^e_{j+1,\tau} + \beta^2\psi^o_{j+1,\tau} \end{aligned} \tag{6}$$

4 積公式法による自由粒子の波動関数の導出

4.1 離散化フーリエ変換

差分方程式 (6) を解くために離散化フーリエ変換を行う．$\psi^e_{j,\tau}$ と $\psi^o_{j,\tau}$ の離散化フーリエ変換は次式で与えられる．

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}^e_{k,\tau} &= \sum_{j=0}^{J-1} \psi^e_{j,\tau} e^{-\frac{2i\pi jk}{J}}, \quad k = 0,1,\ldots,J-1 \\ \tilde{\psi}^o_{k,\tau} &= \sum_{j=0}^{J-1} \psi^o_{j,\tau} e^{-\frac{2i\pi jk}{J}}, \quad k = 0,1,\ldots,J-1 \end{aligned} \tag{7}$$

(6) より $\tilde{\psi}^e_{k,\tau}$ と $\tilde{\psi}^o_{k,\tau}$ の時間発展を行列を用いて表すと次のように書ける．

$$\begin{bmatrix} \tilde{\psi}^e_{k,\tau+1} \\ \tilde{\psi}^o_{k,\tau+1} \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} \tilde{\psi}^e_{k,\tau} \\ \tilde{\psi}^o_{k,\tau} \end{bmatrix} \tag{8}$$

$$M = \begin{bmatrix} \alpha^2 + \beta^2 e^{-\frac{2i\pi k}{J}} & \alpha\beta\left(1 + e^{-\frac{2i\pi k}{J}}\right) \\ \alpha\beta\left(1 + e^{\frac{2i\pi k}{J}}\right) & \alpha^2 + \beta^2 e^{\frac{2i\pi k}{J}} \end{bmatrix}$$

式 (8) は次の公式を使うと式 (6) から直ちに導くことができる．

$$\sum_{j=0}^{J-1} \psi^e_{j+1,\tau} e^{-\frac{2i\pi jk}{J}} = e^{\frac{2i\pi k}{J}} \tilde{\psi}^e_{k,\tau} \tag{9}$$

<u>Proof</u>

$$\sum_{j=0}^{J-1} \psi^e_{j+1,\tau} e^{-\frac{2i\pi jk}{J}} = e^{\frac{2i\pi k}{J}} \sum_{j=0}^{J-1} \psi^e_{j+1,\tau} e^{-\frac{2i\pi (j+1)k}{J}}$$

$$
\begin{aligned}
&= e^{\frac{2i\pi k}{J}} \left(\sum_{j=1}^{J-1} \psi^e_{j,\tau} e^{-\frac{2i\pi jk}{J}} + \psi^e_{J,\tau} e^{-\frac{2i\pi Jk}{J}} \right) \\
&= e^{\frac{2i\pi k}{J}} \left(\sum_{j=1}^{J-1} \psi^e_{j,\tau} e^{-\frac{2i\pi jk}{J}} + \psi^e_{0,\tau} \right) \\
&= e^{\frac{2i\pi k}{J}} \tilde{\psi}^e_{k,\tau} \qquad (10)
\end{aligned}
$$

4.2 波動関数の解析解

M の固有値は $\theta = \pi k/J$ とおくと

$$\lambda_1 = a^2 + b^2 \cos 2\theta + b \cos\theta g(\theta) \qquad (11)$$

$$\lambda_2 = a^2 + b^2 \cos 2\theta - b \cos\theta g(\theta) \qquad (12)$$

$$g(\theta) = \sqrt{4a^2 - 2b^2 + 2b^2 \cos 2\theta} \qquad (13)$$

である．これより，$\tilde{\psi}^e_{k,\tau}$ と $\tilde{\psi}^e_{k,\tau}$ は次式で与えられる．

$$
\begin{aligned}
\tilde{\psi}^e_{k,\tau} &= c_{e1}\lambda_1^\tau + c_{e2}\lambda_2^\tau \\
\tilde{\psi}^e_{k,\tau} &= c_{o1}\lambda_1^\tau + c_{o2}\lambda_2^\tau \qquad (14)
\end{aligned}
$$

ここで

$$
\begin{aligned}
c_{e1} &= \left(\frac{1}{2} - \frac{ib\sin\theta}{g(\theta)}\right) v^e_{k,0} + \frac{ae^{-i\theta}}{g(\theta)} v^o_{k,0} \\
c_{e2} &= \left(\frac{1}{2} + \frac{ib\sin\theta}{g(\theta)}\right) v^e_{k,0} - \frac{ae^{-i\theta}}{g(\theta)} v^o_{k,0} \\
c_{o1} &= \left(\frac{1}{2} + \frac{ib\sin\theta}{g(\theta)}\right) v^o_{k,0} + \frac{ae^{i\theta}}{g(\theta)} v^e_{k,0} \\
c_{o2} &= \left(\frac{1}{2} - \frac{ib\sin\theta}{g(\theta)}\right) v^o_{k,0} - \frac{ae^{i\theta}}{g(\theta)} v^e_{k,0}
\end{aligned}
\qquad (15)
$$

である．波動関数は逆離散フーリエ変換する事により

$$\psi^e_{j,\tau} = \frac{1}{J} \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\psi}^e_{k,\tau} e^{-\frac{2i\pi jk}{J}} \qquad (16)$$

$$\psi^o_{j,\tau} = \frac{1}{J} \sum_{k=0}^{J-1} \tilde{\psi}^o_{k,\tau} e^{-\frac{2i\pi jk}{J}} \qquad (17)$$

と求まる．

5 時空間メッシュの有限サイズ効果に伴う計算誤差

本来，連続である時空間を離散化したために生じる誤差を考える．式(2)には厳密解が存在するので，それと積公式法で求めらる近似解と比較する．比較する厳密解の境界条件と初期波動関数を以下に定める．境界条件として周期境界条件を課し，

$$\begin{cases} \psi(0,t) = \psi(1,t) = 0 \\ \left.\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right|_{x=0} = \left.\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right|_{x=1} \end{cases} \tag{18}$$

また，初期条件は

$$\psi(x,0) = \sqrt{2}\sin(2\pi\kappa x) \tag{19}$$

とする．

境界条件(18)と初期条件(19)を満たす方程式(2)の解は

$$\psi(x,t) \quad = \quad \sqrt{2\pi}e^{-i(2\pi\kappa)^2 t}\sin(2\pi\kappa x) \tag{20}$$

である．離散化した場合の初期条件は

$$\psi_{n,0} \quad = \quad C_\kappa\sqrt{2}\sin(2\pi\kappa\Delta xn) \tag{21}$$

$$C_\kappa \quad = \quad \left(N - \frac{\sin 2\pi N\kappa\Delta x}{\sin 2\pi\kappa\Delta x}\right)^{1/2} \tag{22}$$

とするのが妥当である．ここで C_k は規格化定数である．この初期波動関数を偶数格子点と奇数格子点にわけて，それを離散フーリエ変換したとすると，

$$\tilde{\psi}^e_{k,0} \quad = \quad \sqrt{2}C_\kappa\sum_{j=0}^{J-1}\sin(4\pi\kappa\Delta xj)e^{-\frac{2i\pi jk}{J}} \tag{23}$$

$$\tilde{\psi}^o_{k,0} \quad = \quad \sqrt{2}C_\kappa\sum_{j=0}^{J-1}\sin(2\pi\kappa\Delta x(2j+1))e^{-\frac{2i\pi jk}{J}} \tag{24}$$

N が大きい場合，$\tilde{\psi}^e_{k,0}$ は次の近似式で表すことができる．

$$\tilde{\psi}^e_{k,0} \approx \begin{cases} -\frac{\sqrt{2}i}{4}N^{\frac{1}{2}} + \left(\frac{\sqrt{2}i}{8} + \frac{\sqrt{2}\kappa}{4}\right)N^{-\frac{1}{2}} & \kappa = k \\ \frac{\sqrt{2}\kappa ki}{2(k^2-\kappa^2)}N^{-\frac{1}{2}} & \kappa \neq k \end{cases} \tag{25}$$

同様に，$\tilde{\psi}^o_{k,0}$ の N が大きい場合，次の近似式で表すことができる．

$$\tilde{\psi}^o_{k,0} \approx \begin{cases} -\frac{\sqrt{2}i}{4}N^{\frac{1}{2}} + \left(\frac{\sqrt{2}\kappa\pi}{2} + \frac{\sqrt{2}}{8}i\right)N^{-\frac{1}{2}} & \kappa = k \\ \frac{\sqrt{2}\kappa ki}{2(k^2-\kappa^2)}N^{-\frac{1}{2}} & \kappa \neq k \end{cases} \tag{26}$$

6 周波数のシフト

式 (14) からフーリエ係数 $\tilde{\psi}^e_{k,\tau}$ と $\tilde{\psi}^o_{k,\tau}$ の時間発展は固有値 λ_1 と λ_2 から定まることがわかる．それぞれ，絶対値が 1 の複素数であるので，次の形で表現できる．

$$\lambda_1 = e^{-i2\pi\nu_1(\Delta t,\Delta x)\Delta t\tau} \tag{27}$$
$$\lambda_2 = e^{-i2\pi\nu_2(\Delta t,\Delta x)\Delta t\tau} \tag{28}$$

$\nu_1(\Delta t, \Delta x)$ と $\nu_2(\Delta t, \Delta x)$ のどちらとも，解析的な形で書けるが複雑である．

実際のシミュレーションでは Δt が小さい場合が多いので，ここでは Δt がゼロの極限を考察する．極限値 $\lim_{\Delta t\to 0}\nu_i(\Delta t, \Delta x)\Delta t (i = 1, 2)$ を $f_i(\Delta x)$ で表すことにすると

$$f_1(\Delta x) = \frac{2}{\Delta x^2\pi}\sin\left(\frac{k\pi\Delta x}{1+\Delta x}\right)^2 \tag{29}$$
$$f_2(\Delta x) = \frac{2}{\Delta x^2\pi}\cos\left(\frac{k\pi\Delta x}{1+\Delta x}\right)^2 \tag{30}$$

となる．$\Delta x = 0$ の近傍でテイラー展開すると

$$f_1(\Delta x) = 2k^2\pi - 4k^2\pi\Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^2) \tag{31}$$
$$f_2(\Delta x) = \frac{2}{\pi\Delta x^2} - 2k^2\pi + 4k^2\pi\Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^2) \tag{32}$$

従って，f_1 は $\Delta \to 0$ の極限で $2k^2\pi$ に収束し，f_2 は発散する．Δt と Δx を共に 0 にもっていった極限では連続の方程式の解に収束すべきであり，その意味において f_1 の極限値は妥当であるが，f_2 の発散は異常である．この点は，f_2 の高周波成分の係数が $\Delta \to 0$ の極限でゼロに収束することから問題は解消される．

7 Δt と Δx が小さい場合の誤差

Δt が $(\Delta x)^2$ より十分小さい場合を考える．Δx が有限であれば，積公式法で求められる波形は異なるモードの重ねあわせとなるが，Δx が小さい，つまり，N が大きい場合は $\kappa = k$ 以外のモードは第一近似として無視できる従って，近似解は

$$\psi^e_{j,\tau} = \psi^o_{j,\tau} = \frac{1}{\sqrt{N}}e^{-i(2\pi(2k^2\pi-4k^2\pi\Delta x)\Delta t\tau+4\pi\kappa\Delta xj)} \tag{33}$$

となる．つまり，$\Delta t \ll (\Delta x)^2$ であれば，有限サイズ効果に伴う計算誤差は周波数が $4k^2\pi\Delta x$ だけ小さくなることと言える．

次に $\epsilon \equiv \Delta t/\Delta x^2$ を固定して Δx と Δt を共に 0 接近させていく場合には，ν_1 は，次の値に収束する．

$$\lim_{\Delta x\to 0}\nu_1(\epsilon\Delta^2 x, \Delta x) \to \frac{2k^2\pi\tan\epsilon}{\epsilon} \tag{34}$$

従って，$\epsilon \neq 0$ である限り真値の $2k^2\pi$ には収束しない．これが意味する事は，Δt の刻み幅は Δx^2 より急激に小さくなるの様な極限のとり方をしない限り厳密な解に収束しないことである．例えば，$\Delta t/\Delta x^3 = 1$ と固定した場合，$\Delta x = 0$ の近傍で周波数 ν_1 は次のように 0 へ収束する．

$$\nu_1(\Delta^3 x, \Delta x) \approx 2k^2\pi - 4k^2\pi\Delta x, \quad \Delta x \to 0 \tag{35}$$

8 まとめ

積公式法は，無条件かつ安定に Schödinger 方程式を解くことができ，かつ，並列計算に向いた解法であることより高速化が容易である．また，時間発展を記述する漸化式は極めて単純でありコードのサイズも小さい．さらに，理論的には Trotter 公式を基礎としているため見通しも良い．以上の点から積公式法は優れたアルゴリズムであるが，本解析で示したように，メッシュの切り方により，格子サイズを 0 にした極限においても正確な解に収束する保障が無い．実用においてはこの点に注意しなくてはならない．

References

[1] H. De Raedt, Comput. Phys. Report. 7 (1987) 1.

[2] J. L. Richardson, Comp. Phys. Com. 63(1991) 84.