

数値計算スキームとしての差分型非線形シュレーディンガー方程式

原研・計算科学技術推進センター 佐々 成正 (Narimasa Sasa)

1 はじめに

物理現象を予測するためには、その系を記述するモデル方程式を解いて何らかの知見を得なくてはならない。これらのモデル方程式が解析的に扱えれば非常に都合がいいのだが、残念ながらそのような場合は少ない。従って、計算機を用いた数値シミュレーションを使って現象を予測し、理解しようとするのが広く行なわれており、必要不可欠な道具となっている。これらのモデル方程式は常微分方程式や偏微分方程式を用いて表されることが多いので、微分方程式に対する数値計算手法もこのような必要性から発達してきたといえることができる。

偏微分方程式の数値シミュレーションを行う場合、スキームとして一番問題となるのは、微分項をどう近似して計算機に載せるかということである。差分法は偏微分方程式の微分項を差分に置き換えて数値シミュレーションをおこなう方法であるが、当然のことながら、差分の仕方によって、安定性や数値誤差が大きく異なってくる。また極端な場合には、元の偏微分方程式にはない性質が現れることもある。偏微分方程式は可積分なのに、適当な差分法で解くとカオティックな振舞いを起こすことがあるということもよく知られている事実である。従って、理想的には元の偏微分方程式の性質をそのまま引き継ぎ、精度や安定性も良い差分法が存在すれば非常に都合が良いのだが、現実にはそういった例はほとんど見られない。

本稿では、この問題に対する試金石として、可積分差分方程式を数値計算法へ応用する試みについて考察する。可積分差分方程式は元の(連続系の)ソリトン方程式の持つ可積分性を保ちながら差分化した方程式である。すなわち、厳密解や保存量を持つという元の偏微分方程式の性質を保ったまま差分化しており、この意味で数学的には理想的な差分化であると言える。具体的な問題として、我々は非線形シュレーディンガー方程式、

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2|\psi|^2 \psi = 0, \quad (1)$$

について考えたい。この方程式は可積分であるばかりでなく、ファイバー中の光ソリトンや深水波など多くの物理系を記述する方程式として、しばしば登場するものである。しかも、この方程式には様々なタイプの数値計算スキームが適用できるので、可積分差分スキームと他の数値計算スキームとの比較も容易である。

以下では、可積分差分スキームにはどのようなものがあるか、また数値計算に応用するときの注意点、および他の数値計算スキームとの計算効率、精度について比較検討を順次おこなっていく。

2 差分型非線形シュレーディンガー方程式

本稿では方程式(1)に対して、数値計算スキームに応用可能な次の3つのタイプの差分型非線形シュレーディンガー(FD-NLS)方程式について考えることにする(ここでは便宜的に type1 ~ type3 と名前をつけておく)。

[type1][1]

$$\frac{i}{\delta}(\psi_X^{T+\delta/2} - \psi_X^{T-\delta/2}) - \frac{4}{\epsilon^2}(\psi_X^{T+\delta/2} + \psi_X^{T-\delta/2}) + \frac{4}{\epsilon^2}(\psi_{X+\epsilon/2}^T + \psi_{X-\epsilon/2}^T)(1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_X^T|^2)\Gamma_X^T = 0, \quad (2)$$

$$\Gamma_X^T = \frac{(1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_X^{T-\delta/2}|^2)(1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_{X+\epsilon/2}^{T-\delta/2}|^2)}{(1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_X^T|^2)(1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_{X+\epsilon/2}^T|^2)}\Gamma_{X+\epsilon/2}^{T-\delta/2}, \quad (3)$$

[type2][2]

$$\frac{i}{\delta}(\psi_X^{T+\delta} - \psi_X^T) - \frac{4}{\epsilon^2}(\psi_X^{T+\delta} + \psi_X^T) + \frac{4}{\epsilon^2}(\psi_{X+\epsilon/2}^T + \psi_{X-\epsilon/2}^{T+\delta})(1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_X^T|^2)\Gamma_X^T = 0, \quad (4)$$

$$\Gamma_X^T = \frac{1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_{X-\epsilon/2}^T|^2}{1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_{X-\epsilon/2}^{T+\delta}|^2}\Gamma_{X-\epsilon/2}^T, \quad (5)$$

[type3]

$$\frac{i}{\delta}(\psi_X^{T+\delta} - \psi_X^T) - \frac{4}{\epsilon^2}(\psi_X^{T+\delta} + \psi_X^T) + \frac{4}{\epsilon^2}(\psi_{X+\epsilon/2}^{T+\delta} + \psi_{X-\epsilon/2}^T)(1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_X^T|^2)\Gamma_X^T = 0, \quad (6)$$

$$\Gamma_X^{T+\delta} = \frac{1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_{X-\epsilon/2}^T|^2}{1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_{X-\epsilon/2}^{T+\delta}|^2}\Gamma_{X-\epsilon/2}^T. \quad (7)$$

ここで Γ_X^T は $\delta \rightarrow 0$ のとき, $\Gamma_X^T \rightarrow 1$ となる補助変数である. 従って, 上に挙げた3つの方程式(2)-(7)は全て $\delta \rightarrow 0$ の極限で, 微差分型非線形シュレーディンガー (SD-NLS) 方程式 [3],

$$i\frac{\partial \psi_X}{\partial t} - \frac{8}{\epsilon^2}\psi_X + \frac{4}{\epsilon^2}(\psi_{X+\epsilon/2} + \psi_{X-\epsilon/2})(1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_X^T|^2) = 0, \quad (8)$$

に一致する. これらの方程式を数値計算スキームとみなしたとき type1 は陽解法-初期値問題, type2 は陽解法-初期値, 境界値問題, type3 は陰解法-初期値問題に対するスキームとなっている.

また, 3つの方程式(2)-(7)は, 互いに変数変換で移りあえるので, 本質的には1つの方程式である. このことを具体的に確かめるため, 3つの方程式(2)-(7)の変数を改めて,

$$\begin{aligned} \psi_1(m_1, n_1) &\equiv \psi_X^T, & \Gamma_1(m_1, n_1) &\equiv \Gamma_X^T, \\ (m_1 = T/\delta, & n_1 = X/\epsilon) & \text{[for type1]}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \psi_2(m_2, n_2) &\equiv \psi_X^T, & \Gamma_2(m_2, n_2) &\equiv \Gamma_X^T, \\ (m_2 = T/\delta, & n_2 = X/\epsilon) & \text{[for type2]}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \psi_3(m_3, n_3) &\equiv \psi_X^T, & \Gamma_3(m_3, n_3) &\equiv \Gamma_X^T, \\ (m_3 = T/\delta, & n_3 = X/\epsilon) & \text{[for type3]}, \end{aligned} \quad (11)$$

と明示すれば, type1 と type2 は,

$$\psi_2(m_2, n_2) = \psi_1(m_1 - 1/2, n_1), \quad (12)$$

$$\Gamma_2(m_2, n_2) = \frac{1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_1(m_1, n_1)|^2}{1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_1(m_1 - 1/2, n_1)|^2}\Gamma_1(m_1, n_1), \quad (13)$$

$$m_2 = m_1 + n_1, \quad n_2 = -n_1 \quad (14)$$

という変数変換で結ばれている。同様にして, type1 と type3 の間には,

$$\psi_3(m_3, n_3) = \psi_1(m_1 - 1/2, n_1), \quad (15)$$

$$\Gamma_3(m_3, n_3) = \frac{1 + \frac{\epsilon^2}{4} |\psi_1(m_1, n_1)|^2}{1 + \frac{\epsilon^2}{4} |\psi_1(m_1 - 1/2, n_1)|^2} \Gamma_1(m_1, n_1), \quad (16)$$

$$m_3 = m_1 - n_1, \quad n_3 = -n_1, \quad (17)$$

という関係がある。

ここで, 方程式 (2), (3) の 1 ソリトン解を具体的に求めておく。方程式 (2), (3) の bilinear form は従属変数変換,

$$\psi_X^T = \frac{g_X^T}{f_X^T}, \quad (18)$$

$$\Gamma_X^T = \frac{f_{X+\epsilon/2}^T f_{X-\epsilon/2}^T f_X^T f_X^T}{f_X^{T+\delta/2} f_X^{T-\delta/2} f_{X+\epsilon/2}^{T-\delta/2} f_{X-\epsilon/2}^{T+\delta/2}}, \quad (19)$$

によって次のように得られる。

$$\left(\frac{i}{\delta} - \frac{4}{\epsilon^2}\right) g_X^{T+\delta/2} f_X^{T-\delta/2} - \left(\frac{i}{\delta} + \frac{4}{\epsilon^2}\right) g_X^{T-\delta/2} f_X^{T+\delta/2} + \frac{4}{\epsilon^2} (g_{X+\epsilon/2}^T f_{X-\epsilon/2}^T g_{X-\epsilon/2}^T f_{X+\epsilon/2}^T) = 0, \quad (20)$$

$$f_{X+\epsilon/2}^{T-\delta/2} f_{X-\epsilon/2}^{T+\delta/2} - f_X^T f_X^T = \frac{\epsilon^2}{4} g_X^T (g_X^T)^*. \quad (21)$$

この bilinear form を解けば, 方程式 (2), (3) に対する 1 ソリトン解,

$$g_X^T = e^n, \quad (22)$$

$$f_X^T = 1 + a_{11} e^{n+n_1^*}, \quad (23)$$

を得ることができる。ただし,

$$e^n = (Q_1 P_1)^{2X/\epsilon} \left(\frac{Q_1}{P_1}\right)^{2T/\delta} C_0, \quad (24)$$

$$Q_1^2 = \frac{\left(\frac{i}{\delta} + \frac{4}{\epsilon^2}\right) P_1^2 - \frac{4}{\epsilon^2}}{\frac{4}{\epsilon^2} P_1^2 + \left(\frac{i}{\delta} - \frac{4}{\epsilon^2}\right)}, \quad (25)$$

$$a_{11} = \frac{\epsilon^2}{4} \frac{1}{[P_1 P_1^* - 1/(P_1 P_1^*)]^2}, \quad (26)$$

と与えられており, P_1 と C_0 は任意の複素数である。図 1~3 は, ϵ と δ の値を変えた時の, 1 ソリトン解の時間発展の様子を描いたものである。図 1 では $\epsilon = 2.0$ と比較的その値が大きいため, 折れ線でつながった形のソリトン解が走る様子がわかる。図 2, 図 3 となるにつれて ϵ の値が小さくなっていくが, このとき Γ の値が 1.0 に近付いていく様子がわかる。

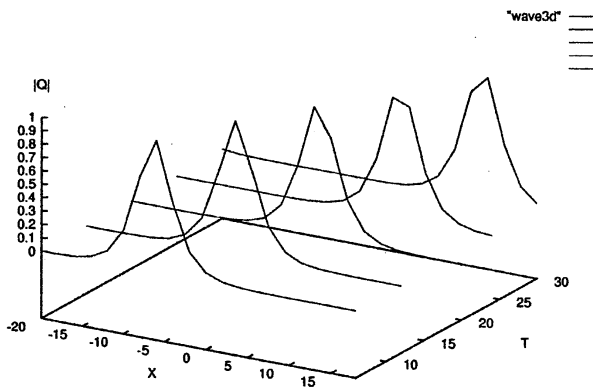


図 1-1. 1ソリトン解 ($|\psi|$) の時間発展の様子 $\epsilon = 2.0, \delta = 1.0$

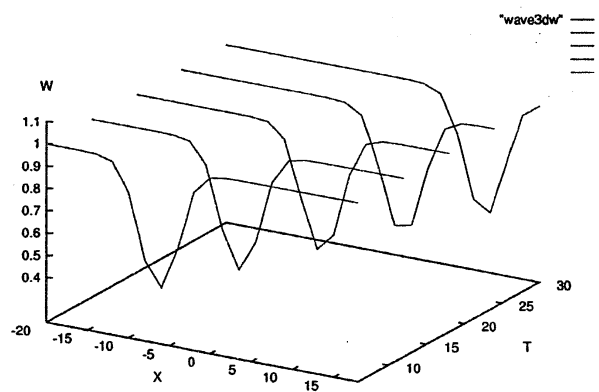


図 1-2. 1ソリトン解 (Γ) の時間発展の様子 $\epsilon = 2.0, \delta = 1.0$

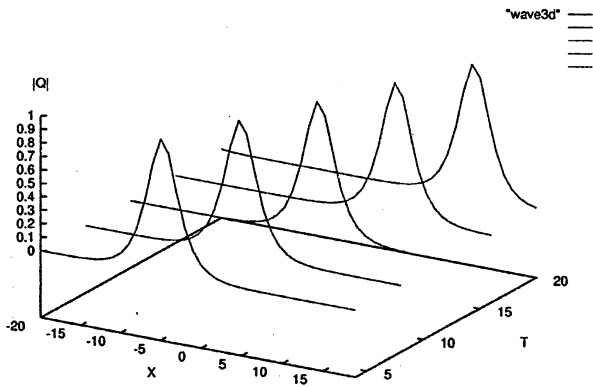


図 2-1. 1ソリトン解 ($|\psi|$) の時間発展の様子 $\epsilon = 1.0, \delta = 0.5$

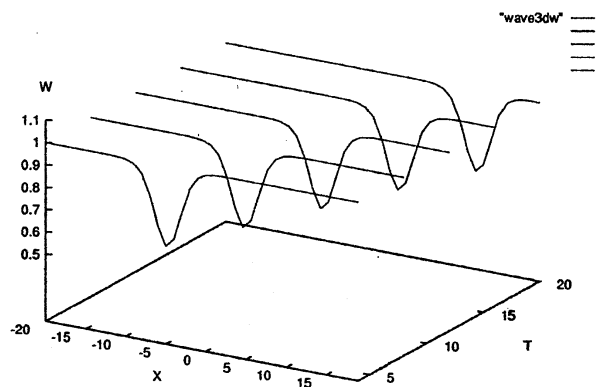


図 2-2. 1ソリトン解 (Γ) の時間発展の様子 $\epsilon = 1.0, \delta = 0.5$

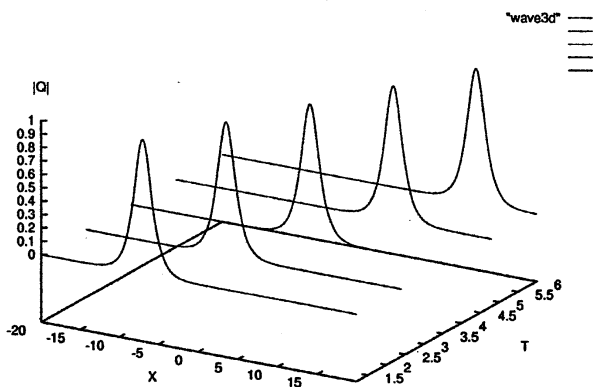


図 3-1. 1ソリトン解 ($|\psi|$) の時間発展の様子 $\epsilon = 0.05, \delta = 0.0001$

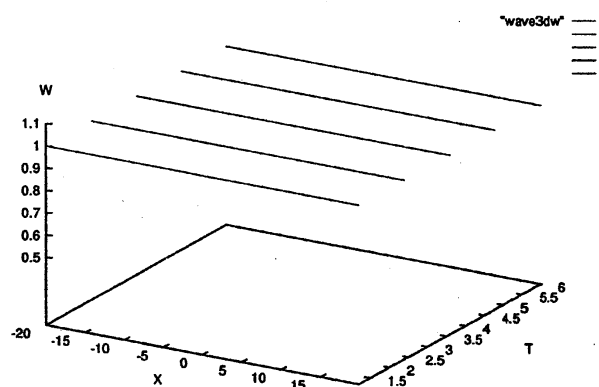


図 3-2. 1ソリトン解 (Γ) の時間発展の様子 $\epsilon = 0.05, \delta = 0.0001$

方程式 (1) に対する可積分差分方程式は、実は他にも様々な形が知られている。例えば、最

初に提案されたのは次のような方程式である [4].

$$(a\psi_{n+1}^m - b\psi_n^{m+1})(1 + ab\psi_n^m \bar{\psi}_{n+1}^{m+1}) - (a-b)\psi_n^m = 0, \quad (27)$$

$$(a\bar{\psi}_n^{m+1} - b\bar{\psi}_{n+1}^m)(1 + ab\psi_n^m \bar{\psi}_{n+1}^{m+1}) - (a-b)\bar{\psi}_{n+1}^{m+1} = 0. \quad (28)$$

ここで, $\psi_n^{m+1} = \psi(x+a, x_2+a^2/2)$, $\psi_{n+1}^m = \psi(x+b, x_2+b^2/2)$, $x_2 = -it$ と定義する. $\bar{\psi}_n^m$ は ψ_n^m の複素共役ではなく, 方程式 (27), (28) は 2つの従属変数に対する差分方程式であると解釈する. 方程式 (27), (28) は $a, b \rightarrow 0$ の極限で方程式 (1) に一致するので, 確かに非線形シュレーディンガー方程式の可積分差分化になっている. しかし, $\bar{\psi}_n^m$ と ψ_n^m は互いに複素共役ではなく $a, b \rightarrow 0$ の極限においてのみ複素共役となる. 従って, 方程式 (27), (28) を数値計算スキームとして用いることはできない.

このように, 全ての可積分差分方程式が数値計算スキームとして使えるわけではなく, それに適したものとそうでないものがあることに注意しなければならない.

3 いろいろな数値計算スキーム

この節において, 非線形シュレーディンガー方程式 (1) に対する主な数値計算スキームをまとめておくことにする [5]. まず, 空間方向の微分を計算するスキームは, 主に差分法と関数展開法の2つに分けることができる. また, 時間発展の方法は差分法や Runge-Kutta 法等, いろいろな方法があって, それぞれを空間発展の方法と組み合わせれば1つの数値計算スキームが出来上がる. ここでは, それらの組合せの中で比較的良く用いられているものについて挙げておく.

[差分法 (空間)]

[1] (中心差分による) 陽解法

$$\frac{i}{\delta}(\psi_X^{T+\delta} - \psi_X^{T-\delta}) + \frac{4}{\epsilon^2}(\psi_{X+\epsilon/2}^T - 2\psi_X^T + \psi_{X-\epsilon/2}^T) + 2|\psi_X^T|^2\psi_X^T = 0. \quad (29)$$

方程式 (1) において, 各微分項を中心差分に置き換えたのが方程式 (29) である. 数値計算スキーム差分法の中で, もっとも単純なスキームであると言える.

[2] Crank-Nicolson 法 (その1)

$$\begin{aligned} \frac{i}{\delta}(\psi_X^{T+\delta} - \psi_X^T) + \frac{2}{\epsilon^2}(\psi_{X+\epsilon/2}^{T+\delta} - 2\psi_X^{T+\delta} + \psi_{X-\epsilon/2}^{T+\delta}) \\ + \frac{2}{\epsilon^2}(\psi_{X+\epsilon/2}^T - 2\psi_X^T + \psi_{X-\epsilon/2}^T) + 2|\psi_X^T|^2\psi_X^T = 0. \end{aligned} \quad (30)$$

方程式 (1) において, 線形項の差分を陰的にしたものが, Crank-Nicolson 法である. 陰解法であるから, 各時間ステップを解くときに逆行列を解かなくてはならない.

[3] Crank-Nicolson 法 (その2)

$$\begin{aligned} \frac{i}{\delta}(\psi_X^{T+\delta} - \psi_X^T) + \frac{2}{\epsilon^2}(\psi_{X+\epsilon/2}^{T+\delta} - 2\psi_X^{T+\delta} + \psi_{X-\epsilon/2}^{T+\delta}) \\ + \frac{2}{\epsilon^2}(\psi_{X+\epsilon/2}^T - 2\psi_X^T + \psi_{X-\epsilon/2}^T) + |\psi_X^{T+\delta}|^2\psi_X^{T+\delta} + |\psi_X^T|^2\psi_X^T = 0. \end{aligned} \quad (31)$$

方程式 (30) において、非線形項の時間を T と $T + \delta$ に分けたものが方程式 (31) である。

[関数展開法 (空間)]

[4] Split-step Fourier 法

この方法は方程式 (1) を 2 つの部分,

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = 0, \quad (32)$$

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} + 2|\psi|^2 \psi = 0, \quad (33)$$

に分け、等時間づつ、方程式 (32) と (33) を交互に使うことによって時間発展させる方法である。方程式 (32) は線形なので Fourier 変換を使って簡単に解くことができる。特に、FFT を使えば高速に処理がおこなえる。また、方程式 (33) も常微分方程式なので簡単に解ける。このために split-step Fourier 法は計算効率の良いスキームになっている。

4 可積分差分方程式を用いた数値計算スキーム

この節では第 2 節で解説した可積分差分方程式を使って、実際に数値計算をする方法について考えたい。まずここでは、数値計算する初期波形が局在している場合に限って考察する。すなわち、計算領域 $(-L/2 \leq x \leq L/2)$ は十分大きく取って、領域の両端での値が $|\psi(\pm L/2, t)| = 0$ である場合を考える。従って、準周期解のような非局在の初期波形は考えないことにする。このとき、我々は第 2 節で挙げた FD-NLS 方程式の中で、方程式 (4),(5)[type2] を使って実際に数値計算を行なう。

このときの具体的な計算手順は、

1. 初期波形 ψ_X^0 を与える。
2. 境界での値は $\psi_{-L/2}^0 = 0, \psi_{-L/2}^\delta = 0, \Gamma_{-L/2}^0 = 1$ であるから、方程式 (5) を使って $\Gamma_{-L/2+\epsilon/2}^0$ を求める。
3. この $\Gamma_{-L/2+\epsilon/2}^0$ を使って、方程式 (4) から $\psi_{-L/2+\epsilon/2}^\delta$ を求める。
4. この手順を繰り返して、初期波形 ψ_X^0 から ψ_X^δ を求める。

で与えられる。この手順を繰り返して時間発展を求めていく。

さて、実際にこの手順で数値計算を行なってみると、この type2 による数値誤差は以外に大きく、後で示すように、第 3 節ので挙げた、(中心差分による) 陽解法 (29) よりも計算精度は悪くなってしまふ。この原因を探るために、方程式 (4),(5) を ϵ, δ で展開すると、

$$\begin{aligned} & \frac{i}{\delta}(\psi_X^{T+\delta} - \psi_X^T) - \frac{4}{\epsilon^2}(\psi_X^{T+\delta} + \psi_X^T) + \frac{4}{\epsilon^2}(\psi_{X+\epsilon/2}^T + \psi_{X-\epsilon/2}^{T+\delta})(1 + \frac{\epsilon^2}{4}|\psi_X^T|^2)\Gamma_X^T \\ = & i \frac{\partial \psi}{\partial t} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + 2|\psi|^2 \psi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \delta \left(\frac{2}{\epsilon} \right) i \left[\frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3} + 6 |\psi|^2 \frac{\partial \psi}{\partial x} \right] \\
& - \delta^2 \left(\frac{2}{\epsilon} \right)^2 \left[\frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^2 |\psi|^2}{\partial x^2} \psi + 6 \frac{\partial |\psi|^2}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} + 6 |\psi|^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - 6 \left| \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|^2 \psi + 6 |\psi|^4 \psi \right] \\
& + \frac{2}{4!} \left(\frac{\epsilon}{2} \right)^2 \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} + \left(\frac{\epsilon}{2} \right)^2 |\psi|^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \\
& + \dots
\end{aligned} \tag{34}$$

となることがわかる。展開係数の中に ϵ の逆冪が入っているので δ のオーダーは少なくとも ϵ より小さくなければならない。この式 (34) から、 $\delta(2/\epsilon)$ の項の存在が陽解法 (29) より誤差が大きくなる原因になっていると考えられる。そこで、その項を消去するための工夫が必要になってくる。そのため、まず FD-NLS 方程式 (4),(5) で、 $\epsilon \rightarrow -\epsilon$ と置き換えた次の方程式、
[type2-]

$$\frac{i}{\delta} (\psi_X^{T+\delta} - \psi_X^T) - \frac{4}{\epsilon^2} (\psi_X^{T+\delta} + \psi_X^T) + \frac{4}{\epsilon^2} (\psi_{X-\epsilon/2}^T + \psi_{X+\epsilon/2}^{T+\delta}) \left(1 + \frac{\epsilon^2}{4} |\psi_X^T|^2 \right) \Gamma_X^T = 0, \tag{35}$$

$$\Gamma_X^T = \frac{1 + \frac{\epsilon^2}{4} |\psi_{X+\epsilon/2}^T|^2}{1 + \frac{\epsilon^2}{4} |\psi_{X+\epsilon/2}^{T+\delta}|^2} \Gamma_{X+\epsilon/2}^T, \tag{36}$$

を考える。type2 の場合、常に $\psi_{-L/2}^T=0$, $\Gamma_{-L/2}^T=0$ という境界条件を満たしているとき計算が可能で、 $X=-L/2$ から $X=L/2$ へ向かって順次 ψ_X^T を求めていった。一方この type2- の場合、常に $\psi_{L/2}^T=0$, $\Gamma_{L/2}^T=0$ という境界条件を満たしている場合に計算が可能となり、type2 の場合とは逆に、 $X=L/2$ から $X=-L/2$ の方へ向かって ψ_X^T を計算していくことになる。ここでは、すでに述べたように、 $\psi_{\pm L/2}^T=0$ 、と仮定しているので、type2 と type2- の両方が使用可能である。そこで、時間 1 ステップごとに type2 と type2- を交互に用いて時間発展させるという方法について考えよう。このようにすると、type2 単独でやらせた時よりも数値誤差が少なくなる効果が認められる。これは、式 (34) を見ればわかるように、 $\delta(2/\epsilon)$ の項が実効的に消去されているからだと考えられる。表 1 は 1 ソリトン解 ($\psi=e^{iX} \operatorname{sech} X$) を初期値として $T=0$ から $T=1.0$ まで時間発展させたとき、各空間サイトでの数値解 (ψ_X^T) と厳密解 ($\tilde{\psi}_X^T$) を比較し、その差 (の絶対値) の最大値を書かせたものである。この結果を見ると、type2 だけだと、誤差が大きくなっており、type2 と type2- を交互にやる方法では誤差が陽解法と同程度になっていることがわかる。また表 2 では、初期値として 1 ソリトン解 ($\psi=e^{5iX} \operatorname{sech} X$) を選んでいるが、この場合は type2 と type2- を交互にやる方法の誤差が陽解法の誤差より小さくなっていることがわかる。従って、type2 と type2- を交互に使うと誤差を陽解法と同等以上に減らすことができる。

計算手法	mesh size	$\max \psi_X^T - \tilde{\psi}_X^T $
陽解法	$\epsilon = 0.05$	0.00185
(中心差分)	$\delta = 0.0005$	
FD-NLS 方程式	$\epsilon = 0.05$	0.01822
(type2)	$\delta = 0.0005$	
FD-NLS 方程式	$\epsilon = 0.05$	0.00195
(type2 & type2-)	$\delta = 0.0005$	

表 1. $T=1$ での最大誤差 ($\max |\psi_X^T - \tilde{\psi}_X^T|$) の値.
初期波形は 1 ソリトン解 ($\psi = e^{iX} \operatorname{sech} X$).

計算手法	mesh size	$\max \psi_X^T - \tilde{\psi}_X^T $
陽解法 (中心差分)	$\epsilon = 0.05$ $\delta = 0.0005$	0.1561
FD-NLS 方程式 (type2)	$\epsilon = 0.05$ $\delta = 0.0005$	0.9396
FD-NLS 方程式 (type2 & type2-)	$\epsilon = 0.05$ $\delta = 0.0005$	0.0509

表2. $T = 1$ での最大誤差 ($\max|\psi_X^T - \tilde{\psi}_X^T|$) の値.

初期波形は 1 ソリトン解 ($\psi = e^{i5X} \text{sech}X$).

次に, 計算精度をさらに上げる方法について述べる. まず, type2 の展開式 (34) を元にして, もし ϵ, δ を適当に小さくとれば,

$$\psi_X^T = \psi + \left(\frac{\epsilon}{2}\right)^2 \psi_{02} + \delta^2 \left(\frac{2}{\epsilon}\right)^2 \psi_{22} + \left(\frac{\epsilon}{2}\right)^4 \psi_{04} + \delta^4 \left(\frac{2}{\epsilon}\right)^4 \psi_{44} + \delta^2 \psi_{20} + \dots, \quad (37)$$

のように展開できると仮定する. そして, ϵ と δ の値を変えて計算した結果から, ψ の値を推定するという方法をとる. 具体的には, 空間メッシュ $\epsilon, 2\epsilon, 4\epsilon$ のそれぞれに対して, 時間メッシュを $\delta, 2\delta$ とした合計 6 回の計算をおこない,

$$\psi_{appr} = \left(\begin{aligned} &37\psi_X^T[\epsilon, 2\delta] + 923\psi_X^T[\epsilon, \delta] - 1685\psi_X^T[2\epsilon, 2\delta] \\ &+ 1385\psi_X^T[2\epsilon, \delta] + 1423\psi_X^T[4\epsilon, 2\delta] - 1408\psi_X^T[4\epsilon, \delta] \end{aligned} \right) / 675, \quad (38)$$

から近似解 ψ_{appr} を計算するという方法をとる. ここで, $\psi_X^T[\epsilon, \delta]$ は空間メッシュ ϵ , 時間メッシュ δ とし, type2 と type2- を交互に使って得られた計算結果を示している.

5 計算効率の比較

この節では前節で解説した, FD-NLS 方程式を使った数値計算スキーム (38) と第 2 節に挙げておいたいくつかの数値計算スキームとの計算効率の比較をおこなう. 比較の方法には, 数値解と厳密解の差がある値以下になるように, ϵ と δ を適当に調節し, それぞれの計算にかかった時間 (CPU-time) の長短によって計算効率を比較するという方法を用いる [5]. 当然のことだが, ϵ と δ はそのときの計算時間ができるだけ短くなるように選ぶ.

表 3 は 1 ソリトン解 ($\psi = e^{2iX} \text{sech}X$) を初期値として $T=0$ から $T=1.0$ まで時間発展させたとき, 各空間サイトでの数値解 (ψ_X^T) と厳密解 ($\tilde{\psi}_X^T$) との差 (の絶対値) が必ず 0.006 以下になるという条件で計算時間を比較したものである. この計算にはパーソナルコンピュータ (Pentium Pro 200MHz) を用いた. また, 表 4 では初期波形を $\psi = 2e^{2iX} \text{sech}2X$, 最大誤差を 0.004 に変えて計算している. 表 3, 4 から明らかな様に, FD-NLS 方程式を使ったスキーム (38) は差分法の中では一番計算効率が良いことがわかる. これは, 可積分差分スキームが安定であるために, ϵ と δ を比較的大きな値に取れることに起因していると考えられる. しかし, split-step Fourier 法と比較すると計算効率という点では全くおよばないことがわかる. 関数展開法では空間微分の誤差を差分法よりもはるかに小さくできるから, その差が計算効率に出てきていると考えられる. 表 5 では 2 ソリトン解の衝突時の場合について同様の比較をお

こなっている。このときもスキーム (38) は差分法の中では一番計算効率が良いが, split-step Fourier 法には劣る結果が出ている。

計算手法	mesh size	$\max \psi_X^T - \tilde{\psi}_X^T $	Time(sec.)
陽解法 (式 (29))	$\epsilon = 0.04$ $\delta = 0.0004$	0.00529	8.79
Crank-Nicolson 法 (式 (31))	$\epsilon = 0.04$ $\delta = 0.002$	0.00535	27.29
FD-NLS 方程式 (式 (38))	$\epsilon = 0.1$ $\delta = 0.0025$	0.00404	4.55
split-step Fourier 法	$\epsilon = 0.3125$ $\delta = 0.0143$	0.00578	0.19

表 3. $T=1$ での最大誤差 ($\max|\psi_X^T - \tilde{\psi}_X^T|$) < 0.006 を満たすための計算時間の比較. 初期波形は 1 ソリトン解 ($\psi = e^{i2X} \text{sech} X$)

計算手法	mesh size	$\max \psi_X^T - \tilde{\psi}_X^T $	Time(sec.)
陽解法 (式 (29))	$\epsilon = 0.01$ $\delta = 0.000025$	0.00269	502.77
Crank-Nicolson 法 (式 (31))	$\epsilon = 0.01143$ $\delta = 0.002$	0.00343	112.48
FD-NLS 方程式 (式 (38))	$\epsilon = 0.05$ $\delta = 0.0005$	0.00259	30.78
split-step Fourier 法	$\epsilon = 0.15625$ $\delta = 0.00125$	0.00378	2.93

表 4. $T=1$ での最大誤差 ($\max|\psi_X^T - \tilde{\psi}_X^T|$) < 0.004 を満たすための計算時間の比較. 初期波形は 1 ソリトン解 ($\psi = 2e^{i2X} \text{sech} 2X$)

計算手法	mesh size	$\max \psi_X^T - \tilde{\psi}_X^T $	Time(sec.)
陽解法 (式 (29))	$\epsilon = 0.025$ $\delta = 0.00015$	0.00347	520.58
Crank-Nicolson 法 (式 (31))	$\epsilon = 0.025$ $\delta = 0.003$	0.00342	438.86
FD-NLS 方程式 (式 (38))	$\epsilon = 0.05$ $\delta = 0.00341$	0.00327	120.36
split-step Fourier 法	$\epsilon = 0.3125$ $\delta = 0.0075$	0.00276	3.55

表 5. $T=15$ での最大誤差 ($\max|\psi_X^T - \tilde{\psi}_X^T|$) < 0.004 を満たすための計算時間の比較. 初期波形は 2 ソリトン解 ($\eta_1=1.0, \xi_1=-0.5, \eta_2=0.5, \xi_2=0.3$).

6 まとめ

本稿では、差分型非線形シュレーディンガー方程式を実際の数値計算スキームに応用する試みについて考察を行なった。方程式(4),(5)はそのままでは数値誤差が大きくなるので、誤差を減らす工夫を試みた。そのとき重要だったのが可積分差分スキームは時間、空間メッシュを比較的大きく取っても正確に計算できるという性質である。このため、小さな時間、空間メッシュで一回計算するのではなく、大きな時間、空間メッシュで数回計算し誤差を消去するという方法が可能となった。この方法を用いると、可積分差分スキームを使った方法は差分法の中では計算効率が非常に良いということが言える。しかし、split-step Fourier法などの関数展開法と比べると計算効率の点では劣っていることがわかった。従って、差分法しか用いることの出来ない状況下での数値計算にはその威力を発揮すると考えられる。

参考文献

- [1] 広田 良吾, 太田 泰広, 日本物理学会春の分科会予稿集 66(1991).
- [2] 辻本 諭, 広田 良吾, private communication.
- [3] M. J. Ablowitz and J. F. Ladik, J. Math. Phys. **16** 598(1975).
- [4] E. Date, M. Jimbo and T. Miwa, J. Phys. Soc. Jpn. **52** 761(1983).
- [5] T. R. Taha and M. J. Ablowitz, J. Comp. Phys. **55** 203(1984).