

数値計算：時間依存のシュレ ディンガー方程式 Symplectic 解法

早稲田大学 基幹理工学部 電子光システム学科

山中研究室

1w090477-6

帆足 正樹

2012 年 8 月 15 日

目次

1	諸言	2
2	Symplectic 解法	2
2.1	概説	2
2.2	演算子の指数関数	2
2.3	Symplectic 数値解法	3
2.4	時間依存 Schrödinger 方程式への応用	3
2.5	影のハミルトニアンと誤差	4
3	数値計算	5
3.1	Schrödinger 方程式の無次元化	5
3.2	Symplectic 解法	6
3.3	数値計算	7
3.4	数値計算結果	8
4	結言	10
4.1	波束の挙動について	10
4.2	Symplectic 解法について	10

1 諸言

本研究の目的は二つある。一つ目は、調和振動子内にガウス波束を入れたときの粒子の挙動を知ることである。二つ目は、Symplectic 数値計算法について深く理解することである。今回、調和振動子内にガウス波束を入れたときに粒子は時間依存の Schrödinger 方程式を満たす。これを Symplectic 数値計算法を用いて解いていく。

まず第 2 章では、Symplectic 数値解法が一般的にどのような解法を指すのかについて説明する。そして第 3 章において、調和振動子内にガウス波束を入れた時の時間依存 Schrödinger 方程式を Symplectic 解法を用いて解き粒子の挙動と Symplectic 解法の性質の両方について考察する。

2 Symplectic 解法

2.1 概説

Symplectic 数値解法は Hamilton 力学系に対して非常に有効な数値計算手法であることが知られている。Euler 法や Runge-Kutta 法は時間発展のステップが進むにつれ、誤差が蓄積されてしまうという欠点がある。それに対して、Symplectic 数値解法は系のエネルギーを原理的に保存する解法であり、また計算量もそれほど多くないため有効な数値計算手法として注目されている。それゆえに、古典力学系のみならず量子多体系の解析や乱流解析への応用が期待されている解法である。今回の研究では 1 次の陽的な Symplectic 解法を用いる。

2.2 演算子の指数関数

演算子の指数関数は以下のように定義される。

$$e^A = I + A + \frac{1}{2!}A^2 + \frac{1}{3!}A^3 + \dots \quad (2.1)$$

このとき非可換な作用素 A, B の指数関数に関する関係式

$$\exp(\Delta t(A + B)) = \prod_{i=1}^{\infty} \exp(a_i \Delta t A) \exp(b_i \Delta t B) \quad (2.2)$$

が成り立つ。

また適当な分割を用いることにより m を自然数として

$$\exp(\Delta t(A + B)) = \prod_{i=1}^{r_m} \exp(a_i \Delta t A) \exp(b_i \Delta t B) + O(\Delta t^{m+1}) \quad (2.3)$$

となることが知られている。この指数の積の数 r_m は m 次分割が得られるように調整されたものとする。今回は、 $m = 1$ となる 1 次の陽的な Symplectic 解法を用いる。

2.3 Symplectic 数値解法

時刻 t について 1 階の偏微分方程式を解くことを考える。ただし、 A, B は非可換な作用素で t に依存しないと仮定する。

$$\frac{\partial f}{\partial t} = (A + B)f \quad (2.4)$$

演算子の指数関数を用いてこれを解くと、

$$f(t + \Delta t) = \exp[(A + B)\Delta t]f(t) \quad (2.5)$$

となる。 $\exp[(A + B)\Delta t]$ が計算困難な場合、和の指数を計算可能な $\exp(a\Delta t A)$ と $\exp(b\Delta t B)$ の有限積に分割し近似的に数値計算する方法がある。この数値計算法を Symplectic 数値解法と呼ぶ。Symplectic 解法では以下の近似式を用いて $\exp[(A + B)\Delta t]$ を m 次に分割する。

$$\exp[(A + B)\Delta t] = \prod_{i=1}^{r_m} \exp(a_i \Delta t A) \exp(b_i \Delta t B) + O(\Delta t^{m+1}) \quad (2.6)$$

これを式 (2.5) に代入して、

$$f(t + \Delta t) = \left\{ \prod_{i=1}^{r_m} \exp(a_i \Delta t A) \exp(b_i \Delta t B) \right\} f(t) + O(\Delta t^{m+1}) \quad (2.7)$$

時間発展が記述できたので数値計算を用いて方程式 (2.4) を解くことができる。これを m 次の陽的な Symplectic 解法という。 m 次の陽的な Symplectic 解法を用いたとき、式 (2.7) より、誤差は Δt^{m+1} のオーダーで生じることになる。

本研究で使用する 1 次の陽的な解法では、近似式として式 (2.8) を用いる。誤差は Δt^2 のオーダーで生じる。

$$\exp[(A + B)\Delta t] = \exp(\Delta t A) \exp(\Delta t B) + O(\Delta t^2) \quad (2.8)$$

2.4 時間依存 Schrödinger 方程式への応用

時間依存 Schrödinger 方程式への Symplectic 解法の適用について述べる。

運動エネルギーの演算子を \hat{K} 、ポテンシャルの演算子を \hat{U} とする。

H_m は一定の値とはならず H の値付近で振動する。しかし、その振幅は Δt^{m+1} のオーダーであって時間が進んでもエネルギーの単調増大や単調減少は起こらない。これが Symplectic 解法においてエネルギーが保存される原理である。近似度を高めることは、エネルギーの振動の振幅を小さくすることになる。Symplectic 解法では、一定の精度でエネルギーを保存できるため Schrödinger 方程式が記述する運動をその精度で正確に計算することができる。

3 数値計算

3.1 Schrödinger 方程式の無次元化

一次元の時間依存 Schrödinger 方程式は

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi \quad (3.1)$$

調和振動子内での運動を考えるから

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad (3.2)$$

$V(x)$ を時間依存の Schrödinger 方程式に代入すると、

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \psi \quad (3.3)$$

$$i \frac{m}{\hbar} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} x^2 \right] \psi \quad (3.4)$$

この式を数値計算のため無次元化する。 X, τ を無次元量として $X = \alpha x, \tau = \beta t$ とおく。ただし、 α は長さの逆数の次元、 β は時間の逆数の次元を持つ数である。また無次元化された波動関数 $\Psi(X, \tau)$ を

$$\Psi(X, \tau) = \psi \left(\frac{X}{\alpha}, \frac{\tau}{\beta} \right) \quad (3.5)$$

とおく。

$$i \frac{m}{\hbar} \beta \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \left[-\alpha^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} \left(\frac{X}{\alpha} \right)^2 \right] \Psi \quad (3.6)$$

$$i \frac{m \beta}{\hbar \alpha^2} \frac{\partial \Psi}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2 \alpha^4} X^2 \right] \Psi \quad (3.7)$$

$\frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2 \alpha^4} = 1$ とすると

$$\alpha = \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}} \quad (3.8)$$

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi \quad (2.9)$$

$$= (\hat{K} + \hat{U}) \psi \quad (2.10)$$

$$(2.11)$$

これを解くと

$$\psi(t + \Delta t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (\hat{K} + \hat{U}) \Delta t \right\} \psi(t) \quad (2.12)$$

$$= \exp \left\{ (\hat{K}' + \hat{U}') \Delta t \right\} \psi(t) \quad (2.13)$$

1 次の陽的な Symplectic 解法を適用すると

$$\psi(t + \Delta t) = \exp(\Delta t \hat{K}') \exp(\Delta t \hat{U}') \psi(t) \quad (2.14)$$

ハミルトニアン H は常に運動エネルギー K とポテンシャル U の和である。 $\exp(\Delta t \hat{K})$ と $\exp(\Delta t \hat{U})$ が演算可能ならば時間依存の Schrödinger 方程式に対して陽的な Symplectic 解法を適用できることがわかる。

2.5 影のハミルトニアンと誤差

Symplectic 解法においてエネルギーがどのように保存されているのかを考える。

そのために、時間発展の 1 ステップでハミルトニアン H がどのように変化するかを考察する。

$$\exp(\Delta t \hat{H}) = \exp \left\{ \Delta t (\hat{K} + \hat{U}) \right\} \quad (2.15)$$

$$= \prod_{i=1}^{r_m} \exp(k_i \Delta t \hat{K}) \exp(u_i \Delta t \hat{U}) + O(\Delta t^{m+1}) \quad (2.16)$$

$$(2.17)$$

指数関数の有限積は別の指数関数にまとめられるので

$$\hat{H}_m = \prod_{i=1}^{r_m} \exp(k_i \hat{K}) \exp(u_i \hat{U}) \quad (2.18)$$

とおける。 \hat{H}_m を影のハミルトニアンと呼ぶ。

よって

$$\exp(\Delta t \hat{H}) = \exp(\Delta t \hat{H}_m) + O(\Delta t^{m+1}) \quad (2.19)$$

\hat{H}_m から求められるハミルトニアン H_m は

$$H_m = H + O(\Delta t^{m+1}) \quad (2.20)$$

またこのとき、 $\frac{m\beta}{\hbar\alpha^2} = 1$ とすると、

$$\frac{m\beta}{\hbar\alpha^2} = \frac{\beta}{\omega} = 1 \quad (3.9)$$

ゆえに、

$$\beta = \omega \quad (3.10)$$

よって無次元化した時間依存 Schrödinger 方程式は

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial\tau} = \frac{1}{2} \left[-\frac{\partial^2}{\partial X^2} + X^2 \right] \Psi \quad (3.11)$$

となる。

3.2 Symplectic 解法

ここで前節の結果を用いて、無次元化したシュレディンガー方程式に対する陽的な Symplectic 解法を構成する。

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial\tau} = \frac{1}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial X^2} + X^2 \right) \Psi \quad (3.12)$$

$$\Psi(\tau + \Delta\tau) = \exp \left\{ -\frac{i}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial X^2} + X^2 \right) \Delta\tau \right\} \Psi(\tau) \quad (3.13)$$

ここで $\hat{K} = \frac{i}{2} \frac{\partial^2}{\partial X^2}$, $\hat{U} = -\frac{i}{2} X^2$ とおくと

$$\Psi(\tau + \Delta\tau) = \exp \left\{ (\hat{K} + \hat{U}) \Delta\tau \right\} \Psi(\tau) \quad (3.14)$$

1 次の陽的な Symplectic 解法を適用すると

$$\Psi(\tau + \Delta\tau) = \exp(\Delta\tau \hat{K}) \exp(\Delta\tau \hat{U}) \Psi(\tau) \quad (3.15)$$

まず、 $\exp(\Delta\tau \hat{U})$ を考える。

$$\exp(\Delta\tau \hat{U}) \Psi(\tau) = \exp\left(-\frac{i}{2} X^2 \Delta\tau\right) \Psi(\tau) \quad (3.16)$$

$$= \Psi_U \quad (3.17)$$

$$\Psi(\tau + \Delta\tau) = \exp(\Delta\tau \hat{K}) \Psi_U \quad (3.18)$$

次に $\exp(\Delta\tau \hat{K})$ を考える。この演算を考える際は、次の方程式を考えればよい。

$$i\frac{\partial f}{\partial\tau} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial X^2} \quad (3.19)$$

両辺をフーリエ変換して

$$i \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tau} = -\frac{1}{2}(ik)^2 \tilde{f} \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tau} = -\frac{1}{2}ik^2 \tilde{f} \quad (3.21)$$

$$\tilde{f}(\tau + \Delta\tau) = \exp\left(-\frac{1}{2}ik^2 \Delta\tau\right) \tilde{f}(\tau) \quad (3.22)$$

両辺を逆フーリエ変換して

$$f(\tau + \Delta\tau) = F^{-1} \left[\exp\left(-\frac{1}{2}ik^2 \Delta\tau\right) \tilde{f}(\tau) \right] \quad (3.23)$$

$$f(\tau + \Delta\tau) = F^{-1} \left[\exp\left(-\frac{1}{2}ik^2 \Delta\tau\right) F[f(\tau)] \right] \quad (3.24)$$

よって

$$\exp(\Delta\tau \hat{K}) \Psi_U = F^{-1} \left[\exp\left(-\frac{1}{2}ik^2 \Delta\tau\right) F[\Psi_U] \right] \quad (3.25)$$

以上をまとめると

$$\Psi(\tau + \Delta\tau) = \exp(\Delta\tau \hat{K}) \exp(\Delta\tau \hat{U}) \Psi(\tau) \quad (3.26)$$

$$= \exp(\Delta\tau \hat{K}) \exp\left(-\frac{i}{2}X^2 \Delta\tau\right) \Psi(\tau) \quad (3.27)$$

$$= \exp(\Delta\tau \hat{K}) \Psi_U \quad (3.28)$$

$$= F^{-1} \left[\exp\left(-\frac{1}{2}ik^2 \Delta\tau\right) F[\Psi_U] \right] \quad (3.29)$$

3.3 数値計算

無次元化した Schrödinger 方程式に以下の条件を設定する。

- 空間 : $-25 \leq X \leq 25 (L = 50)$ を $N = 1024$ 分割する。
ただし、 L は十分大きいとため $\Psi(-\frac{L}{2}, \tau) = 0$, $\Psi(\frac{L}{2}, \tau) = 0$ という周期的境界条件を課したと考えてよい。
- 時間 : $0 \leq \tau \leq 10$ に対して時間刻みを $\Delta\tau = 0.01$ にとる。
- 初期波形 :

$$\Psi(X, \tau = 0) = \left(\frac{\sigma^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left\{-\frac{(X+5)^2}{2\sigma^2}\right\} \quad (3.30)$$

この条件下で、 σ を変化させ数値計算を行った。

3.4 数値計算結果

数値計算結果

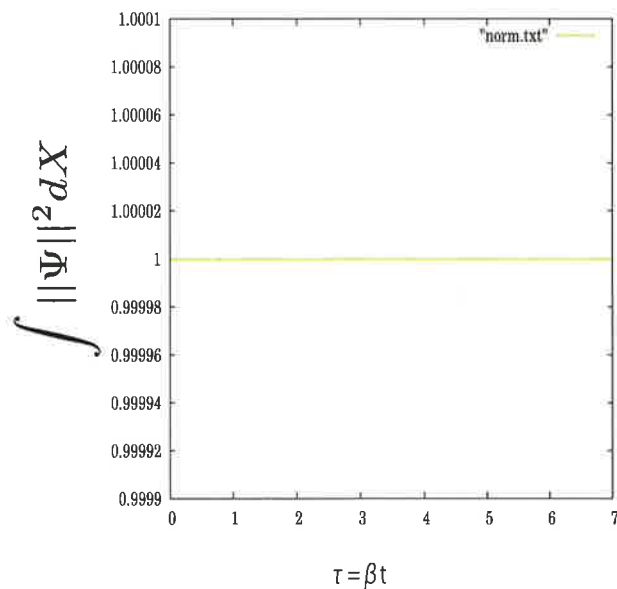


図1 保存量 $\int ||\Psi||^2 dX$ の時間変化

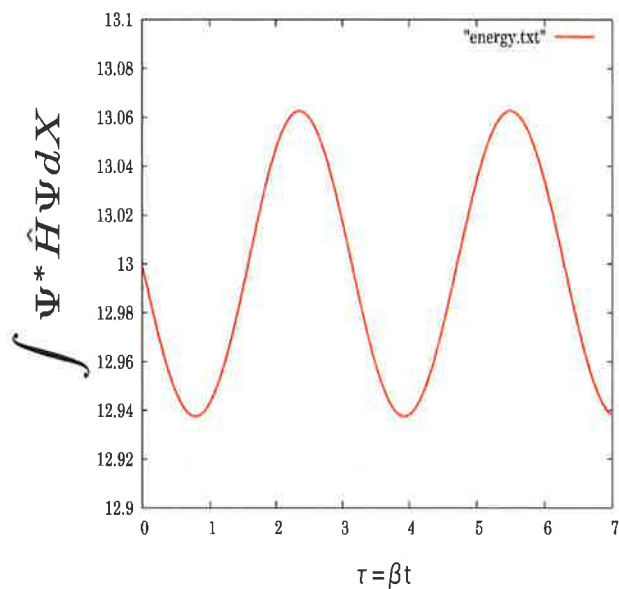


図2 保存量 $\int \Psi^* \hat{H} \Psi dX$ の時間変化

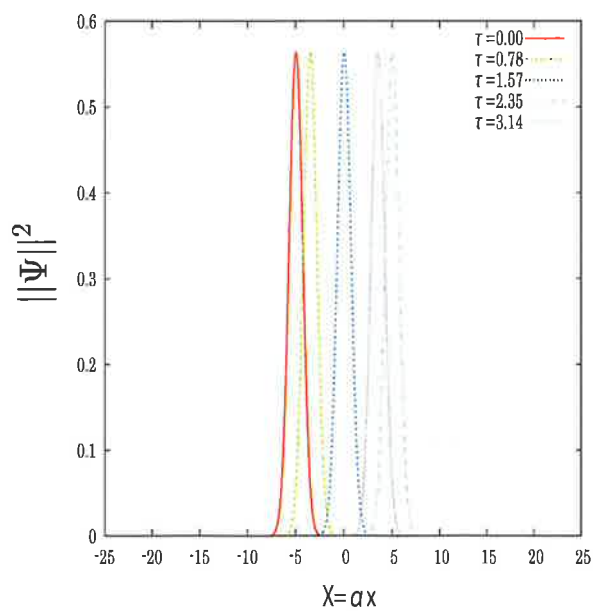


図3 $\sigma = 1$ のときの波束の時間変化 1

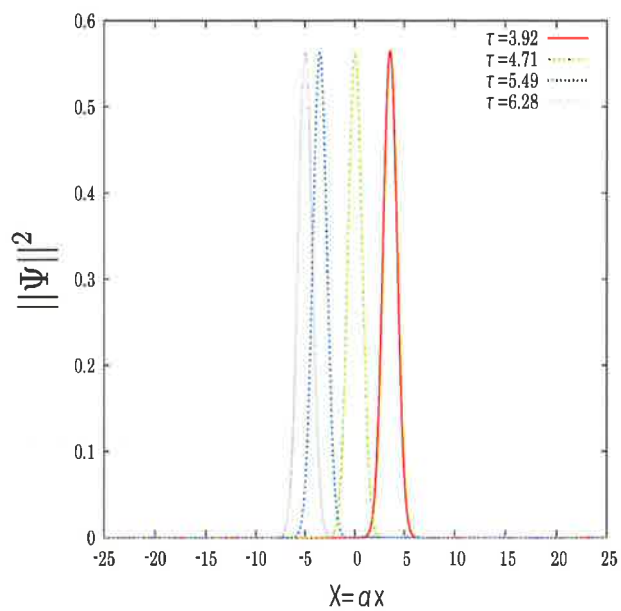


図4 $\sigma = 1$ のときの波束の時間変化 2

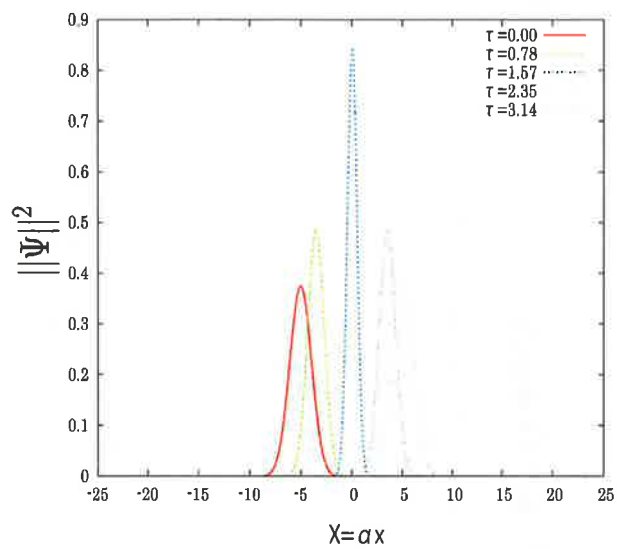


図5 $\sigma = 1.5$ のときの波束の時間変化 1

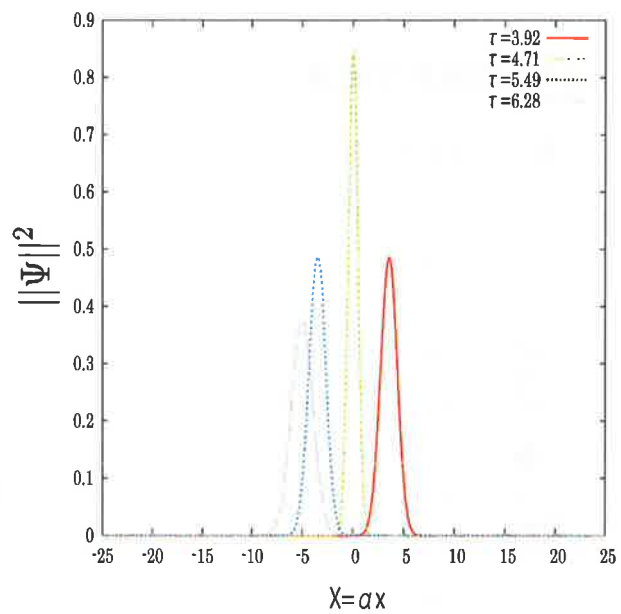


図6 $\sigma = 1.5$ のときの波束の時間変化 2

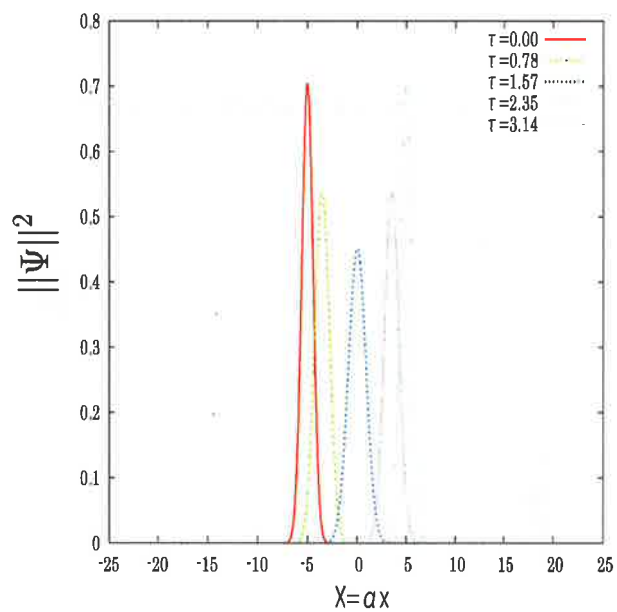


図7 $\sigma = 0.8$ のときの波束の時間変化 1

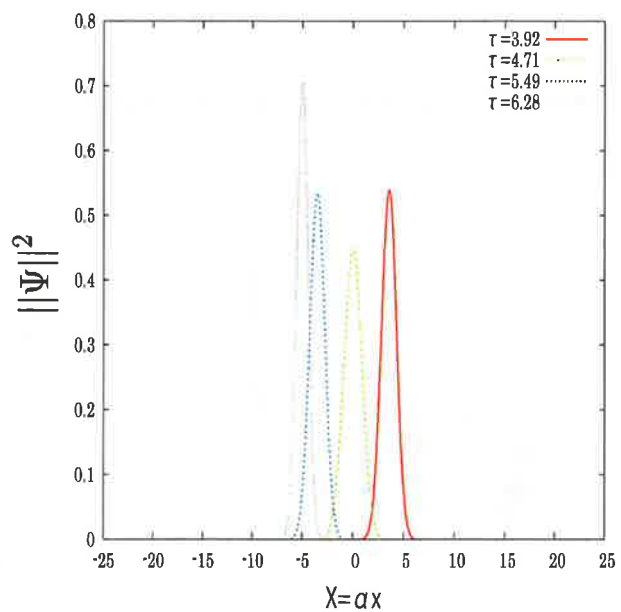


図8 $\sigma = 0.8$ のときの波束の時間変化 2

4 結言

4.1 波束の挙動について

まず調和振動子内にガウス波束を入れたときの挙動について述べる。調和振動子内にガウス波束を入れたときには波束は古典的な調和振動子と同様に周期 $\frac{2\pi}{\omega}$ で振動する。古典力学と異なる点は σ の値に応じて幅を変化させながら振動することである。 $\sigma = 1$ のときは波束は形を変えずに運動する。 $\sigma < 1$ のときは振動中心に近づくにつれて波幅を大きくし、振動中心から離れるにしたがって波幅が小さくなるように運動する。また $\sigma > 1$ のときは $\sigma < 1$ とは逆に、振動中心に近づくにつれて波幅を小さくし、振動中心から離れるにしたがって波幅が大きくなるように運動する。

4.2 Symplectic 解法について

1 次の陽的な Symplectic 解法を用いて数値計算をすることができた。 $\int \|\Psi\|^2 dX$ は高精度で保存されていた。また、エネルギーの期待値 $\int \Psi^* \hat{H} \Psi dX$ の値は 13 付近を中心に振動していて単調に増大したり減少したりすることはなかった。誤差を小さくし、精度を高めるためにはより高次の Symplectic 解法を用いればよいと考えられる。

参考文献

- [1] 非線形波動方程式に対するシンプレクティック数値解法・佐々 成正

謝辞

この場をお借りして夏の学校の発表までアドバイスやご指導をくださった先輩方に感謝を述べて終わりたいと思います。お忙しい中丁寧に指導くださりありがとうございました。