

### 3P118

ウェーブレットを用いた流体力学形式の時間依存方程式および境界条件の取り扱い  
(豊橋技術科学大) ○濱田信次、関野秀男

[序]量子多体系のシミュレーションは莫大な計算コストがかかるため、多くの場合実時間 TDDFT などの一体理論形式が使用される。しかし、Orbital を使用する通常の形式ではまだ計算コストが高く、さらに効率の高い現象論的記述を目指すものとしては流体力学形式が一つ候補として考えられる。我々はこれまで multiwavelet および Cayley 形式を用いて時間依存シュレディンガー方程式(TDSE)、時間依存 Hartree-Fock 方程式(TDHF), TDDFT の解法を構築してきた。さらに、この方法を若干拡張して、流体系方程式にも適用できるようにした。

以下は Boyle gas 型の圧力項をもつ 1 次元 Navier-Stokes 方程式の例である。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(v\rho)}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} = -c \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \mu \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} \quad (2)$$

移流方程式部分(1)に対して Cayley 形式を適用して高精度で時間発展させ、(2)については Runge-Kutta など陽的方法で時間発展させることにより、multiwavelet 基底で安定して解けることを検証した。

[理論] 今回、我々は流体力学表現の TDSE に対する wavelet を用いた解法についての検討を行った。TDSE

$$i\Psi_t / \Psi = -\frac{1}{2}(\Psi_{xx} / \Psi) + V = -\frac{1}{2}[(\Psi_x / \Psi)_x + (\Psi_x / \Psi)^2] + V \text{ は対数表現で}$$

$$i(\log \Psi)_t = -\frac{1}{2}[(\log \Psi)_{xx} + ((\log \Psi)_x)^2] + V \text{ となるが、} \log \Psi = \log R(\text{real}) + \log P(\text{imaginal})$$

と分解した後、実部と虚部を比較することにより、以下の流体力学表現が得られる。

$$\rho_t + (v\rho)_x = 0 \quad (3)$$

$$v_t + vv_x = -(Q+V)_x \quad (4)$$

ここで、 $\rho = R^2$ ,  $v = -i(\log P)_x$ ,  $Q = -(1/2)(R_{xx} / R)$  である。

残念ながら、multiwavelet+Cayley 形式では(4)にある程度の大きさの摩擦項(拡散項)  $\mu v_{xx}$  を追加すると安定して解くことができるものの、小さい場合は安定して解くことは難しいことが分かった。(なお、量子力学に自然な形で摩擦を導入できるということは流体力学表現の一つの利点である。)この不安定性は量子ポテンシャル Q の計算で必要とされる空間についての 2 回微分が原因だと考えられる。そこで、multiwavelet と Meyer wavelet を組み合わせて使う方法を試みた。

multiwavelet は実空間で local であるのに対して、Meyer wavelet は波数空間で local となっており、このことが互いの相補的な性質に結びついている。multiwavelet は積演算、平方根演算などに適しており、Meyer wavelet は微分演算などに適している。もし、multiwavelet と Meyer wavelet とが互いに高速変換可能であれば、状況に応じて最適な wavelet を選択し

ながら計算する方法が可能となる。wavelet とはもともと伸縮、移動に対する不変性を持っているので、概念的には伸縮、移動に対する演算子の固有関数で展開すれば異なる種類の wavelet 間の変換行列は対角化できるはずである。しかし現実には種々の制約からそのような理想的な状況にはならないものの、片方が Meyer wavelet の場合には、波数空間で local であるという性質により、この変換行列はかなり sparse にすることができる。今回(3)(4)を解くのに、この方法を適用してみた。すなわち、基本的には Meyer wavelet を使用するが、積演算、平方根演算のみを multiwavelet に変換して実行した。

[計算例] 計算例としては周期的境界条件での自由粒子を取り扱った。

初期状態は  $\Psi(x) = 2 + \exp(-(x-2)^2) \exp(-ix)$  とした。

Fig.1, Fig.2 に  $\rho(x) = |\Psi(x)|^2$  の初期状態および再帰時間後の状態を示す。

当然ながら、それ以外の時刻でもすべて理論どりの電子密度が計算されている。

なお、一般に  $\rho = 0$  の領域では量子 potential の計算が困難になる。これは、流体力学表現では振幅 0 の領域での表現が冗長になっているという純粋に技術的な問題ではあるが、余計な混乱を避けるため、ここでは波動関数に offset 量=2 を加えて、全空間で  $\rho \neq 0$  となる例で計算した。

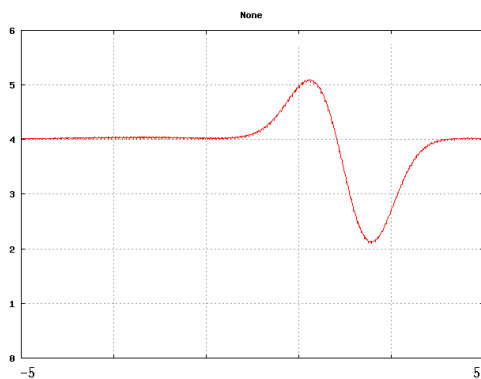


Fig1. 電子密度(初期)

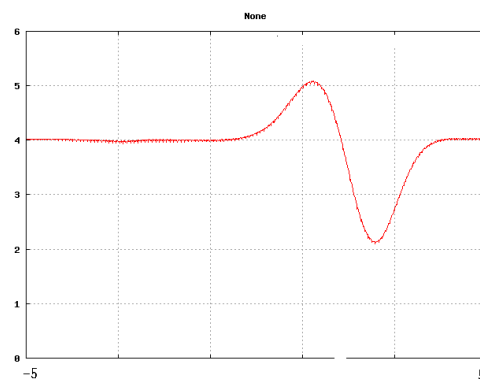


Fig.2 電子密度(再帰時間後)

[今後の予定]

これまでの研究では取り扱いの容易さからもっぱら周期境界条件を取り扱ってきたが、一般境界条件についても現在検討をすすめており、これについては当日発表予定である。また multiwavelet-Meyer wavelet の相互変換の高速化、より定量的な安定性条件の評価、粒子法や量子トラジェクトリー法などの Lagrange 的手法と wavelet 手法との融合、流体摩擦項と現実的な dissipation 機構との対応関係など多くの項目を検討していく予定である。

[参考文献]

B.Alpert, G.Beylkin, D.Gines, and L.Vozovoi J. Comput. Phys. **182** 149(2002)

Daubechies, Ten lectures on wavelets SIAM(1992)

E.Madelung, Z. Phys. **40**,322(1926)

濱田、関野 第一回ウェーブレット変換およびその応用に関するワークショップ(2007)

濱田、関野 第 11 回理論化学討論会(2008)