量子渦ダイナミクスのための幾何学的数値積分
(web開示用簡略化版)

A Geometric Numerical Integration for Dynamics of Quantum Vortices

松野哲也　有明高専

第65回応用物理学会春季学術講演会　発表資料（web開示用簡略化版）
2018年3月17日（土）早稲田大学　西早稲田キャンパス

目的

- 超伝導体における電磁現象

  → 量子渦の発生・運動・消滅, ピンニング, etc. ...

- 幾何学的数値積分法を構成する

  → 高精度, 高効率

TDGL方程式

- 時間依存ギンツブルグ･ランダウ方程式
  Time Dependent Ginzburg-Landau equation

→　超伝導体（第２種）における電磁現象を正しく記述する，と信じられている.

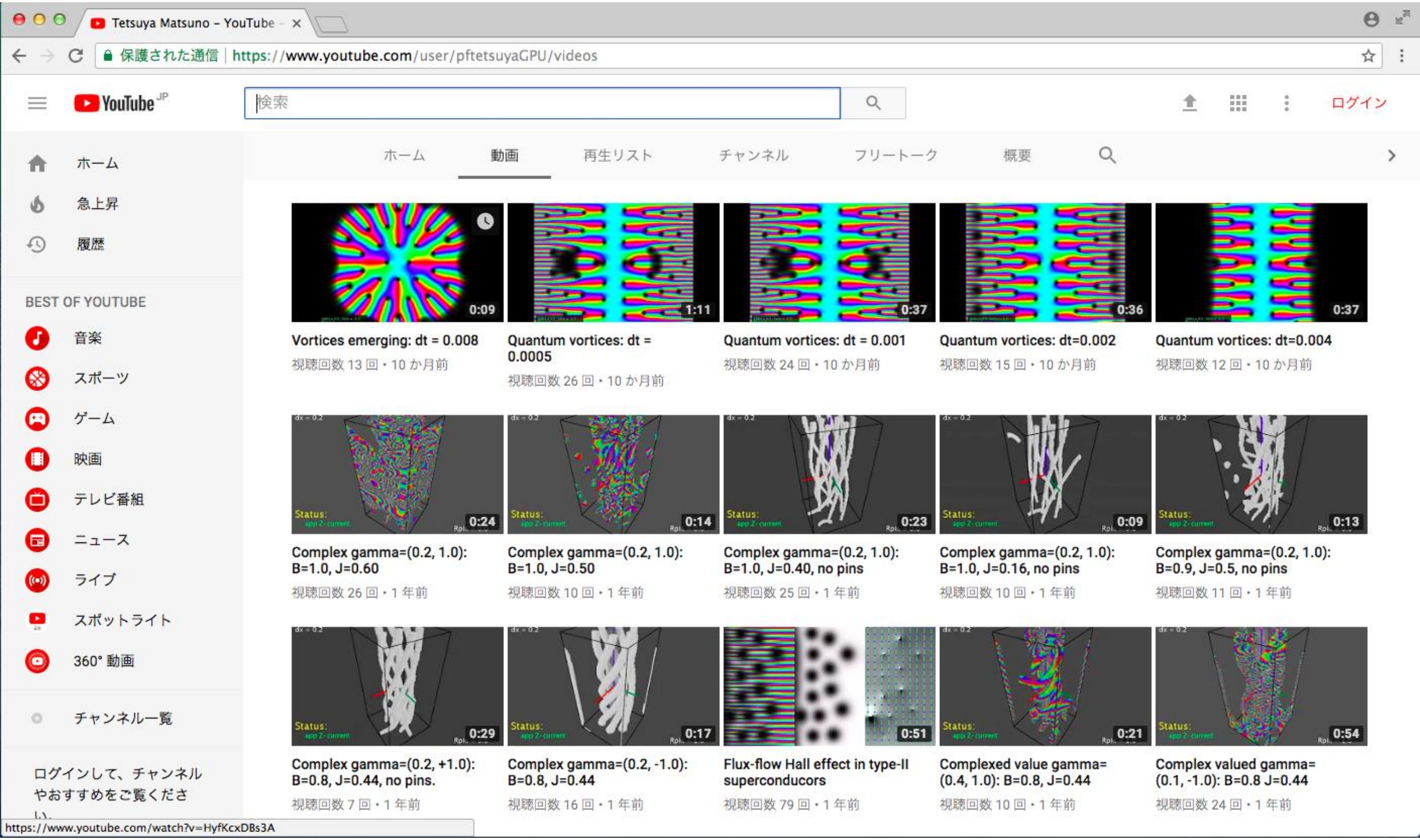
→　ピンニングや新奇超伝導デバイスの動作確認のためのシミュレーション

数値積分スキームの自作

- なぜ自作？
  → TDGL方程式のための独自のスキーム
  （幾何学的数値積分スキーム）
  をつくって，試したい．
  → 実装の柔軟性

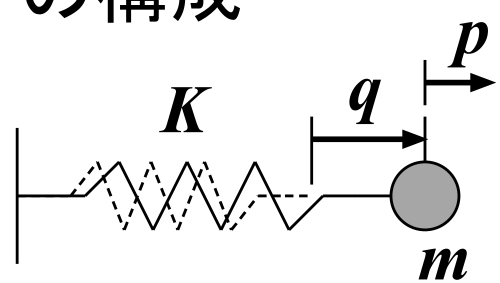
- なぜ幾何学的？
  → 対称性・保存量を意識すると
  何かいいことがありそう（安定性，精度）．

YouTubeで「 pftetsuya 」で検索

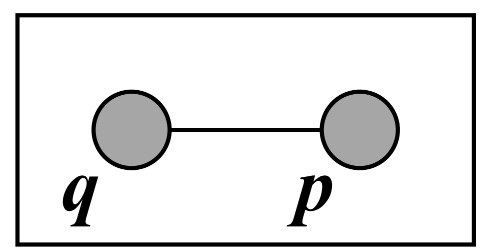


幾何学的数値積分とは？（例題）

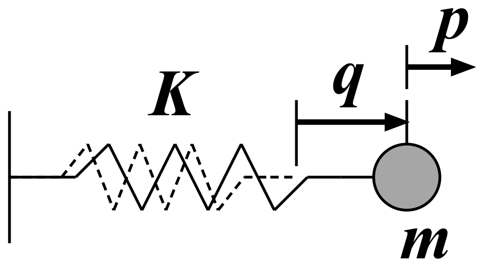
- バネとおもり系
  → symplectic integrator の構成



- 熱伝導系
  → Poisson integrator の構成

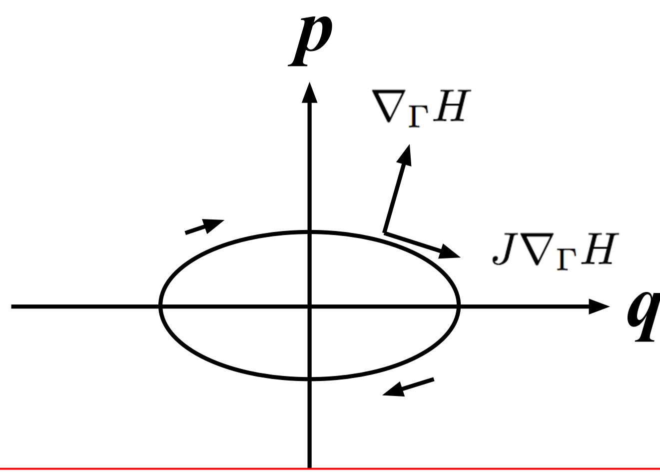


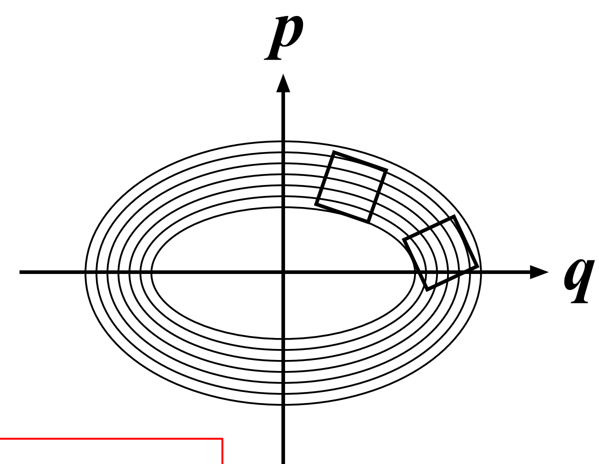
バネとおもり系



$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1/m \\ -K & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{K}{2}q^2$$





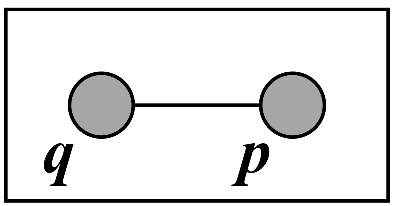
$$\boxed{\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} Kq \\ p/m \end{pmatrix} = J\nabla_\Gamma H}$$

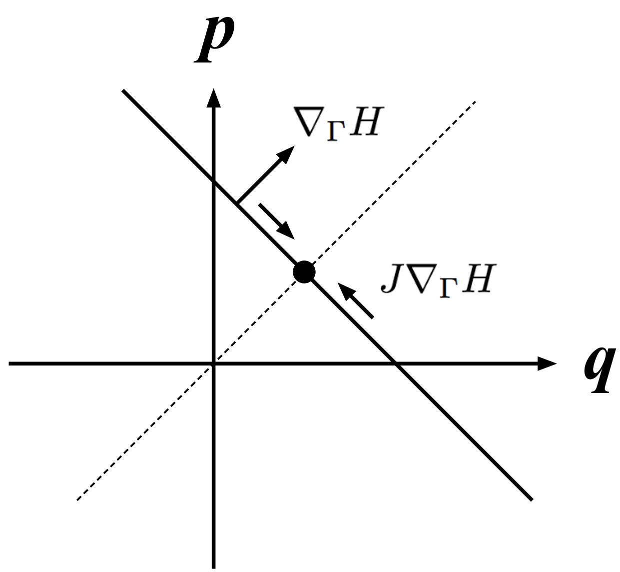
H: ハミルトニアン
J: 構造行列

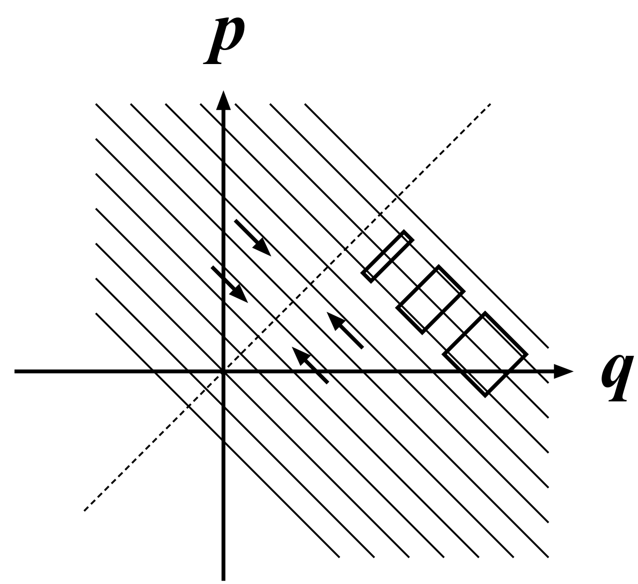
熱伝導系

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

$$\boxed{H = q + p, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & p-q \\ q-p & 0 \end{pmatrix}}$$







$$\boxed{\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & p-q \\ q-p & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = J\nabla_\Gamma H}$$

量子拡散

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = (\nabla - \mathrm{i}g\boldsymbol{A})^2 \psi$$

量子拡散方程式

$\boldsymbol{g}$: ***電荷***
$\boldsymbol{A}$: ゲージ場

TDGL方程式 ＝ 量子拡散方程式 ＋ 非線形項
＋ ゲージ場に関する方程式

超伝導現象

似て非なる. . .

$$\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial \psi}{\partial t} = (\nabla - \mathrm{i}g\boldsymbol{A})^2 \psi$$

シュレディンガー方程式
（自由電子の）

Gross-Pitaevskii方程式 ＝ シュレディンガー方程式 ＋ 非線形項

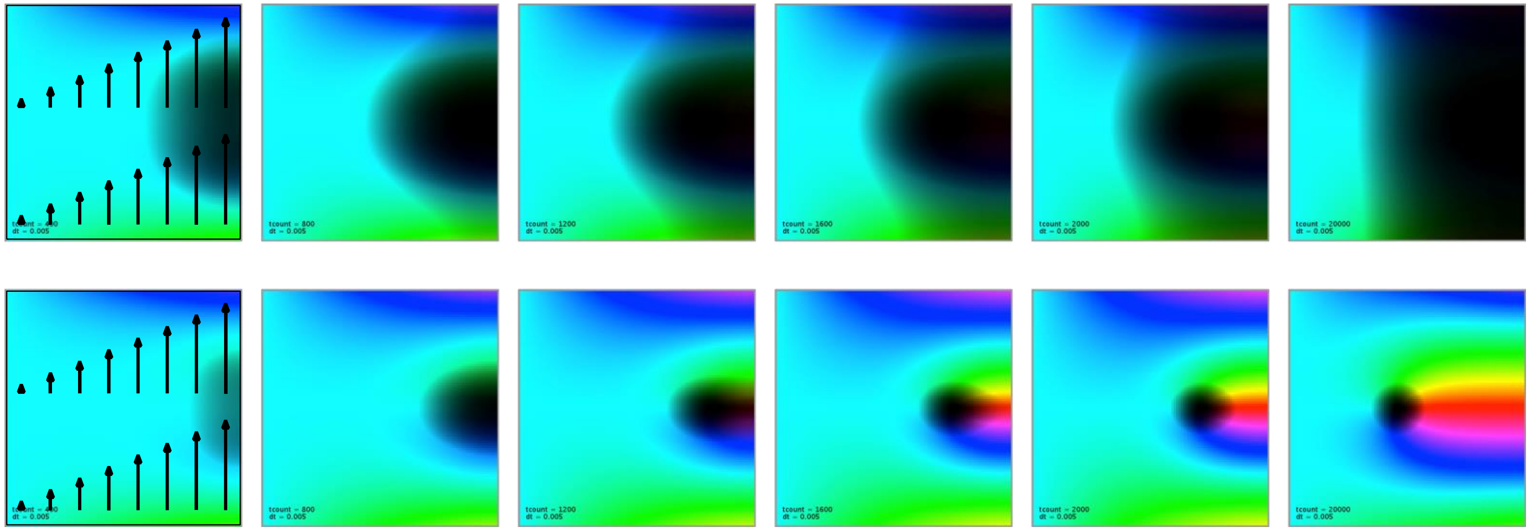
超流動現象

数値シミュレーション例：simplified TDGL 方程式

η = 0

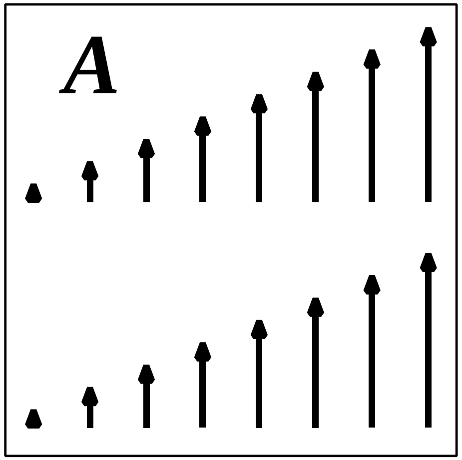
B = 0.1

η = 0.5

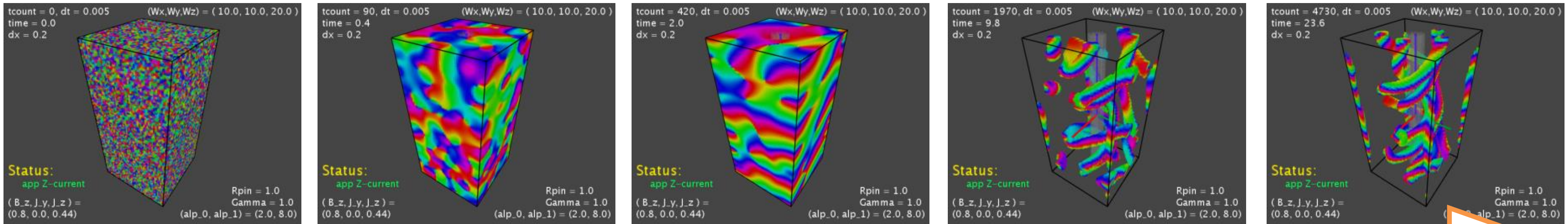


$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = (\nabla - \mathrm{i}g\boldsymbol{A})^2\psi + \eta(1 - |\psi|^2)\psi$$

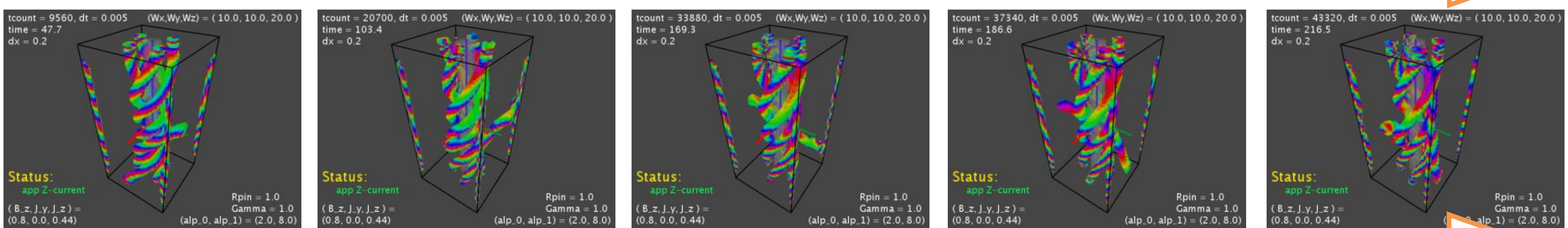
$$\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$$



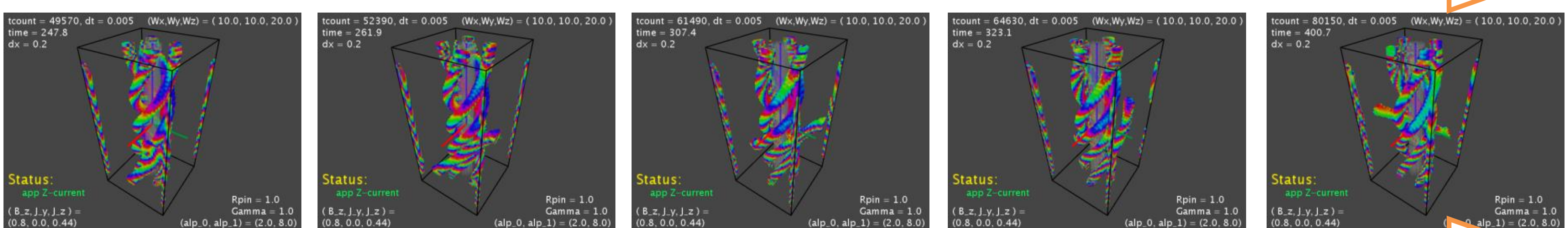
数値シミュレーション例：TDGL方程式（縦磁界効果）



time: 過渡過程



time: 定常状態（周期的運動）

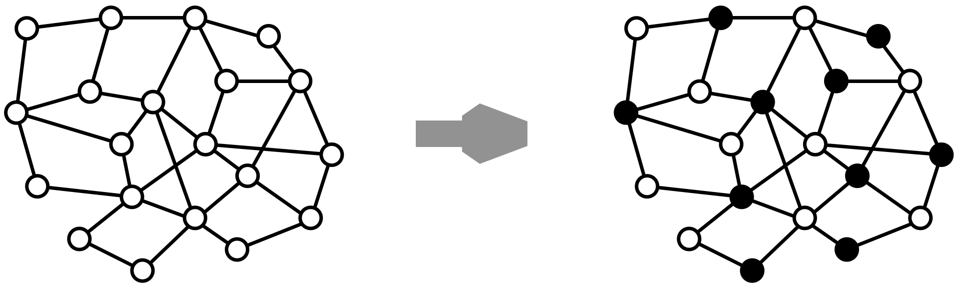


time: 定常状態（周期的運動）

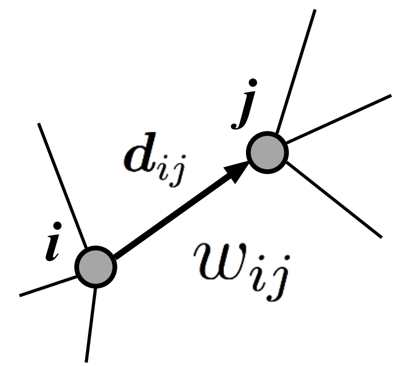
ネットワーク上の量子拡散

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = (\nabla - \mathrm{i}g\boldsymbol{A})^2 \psi$$

「Qグループ（黒丸）とPグループ（白丸）」



結合係数（リンク変数）



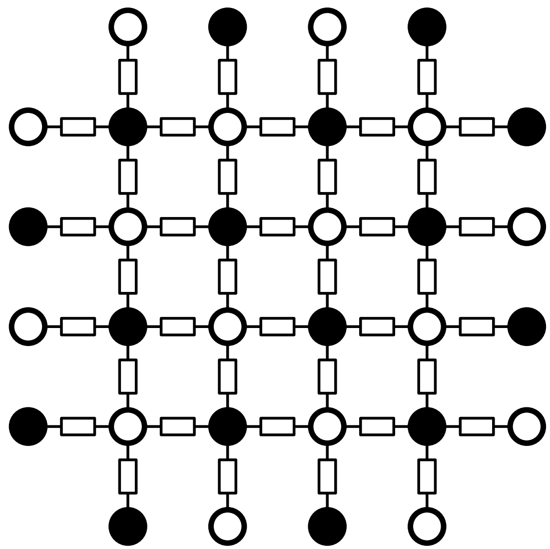
$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} q_i &= -n_i q_i + \sum_{j \in P} w_{ij} p_j, \quad i \in Q \\ \frac{d}{dt} p_i &= -n_i p_i + \sum_{j \in Q} w_{ij} q_j, \quad i \in P \end{aligned}$$

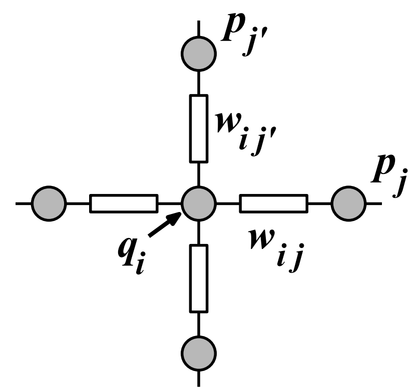
$$w_{ij} = \begin{cases} \exp(\mathrm{i}\theta_{ij}), & \text{site } i \text{ and site } j \text{ are connected} \\ 0, & \text{others} \end{cases}$$

$$\theta_{ij} = -g\boldsymbol{d}_{ij} \cdot \boldsymbol{A}$$

保存量存在条件

正方格子





$$\frac{1}{n_i}\sum_{j\in Q} w_{ji} = 1, \quad \frac{1}{n_i}\sum_{j\in P} w_{ji} = 1$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{A} = 0$$

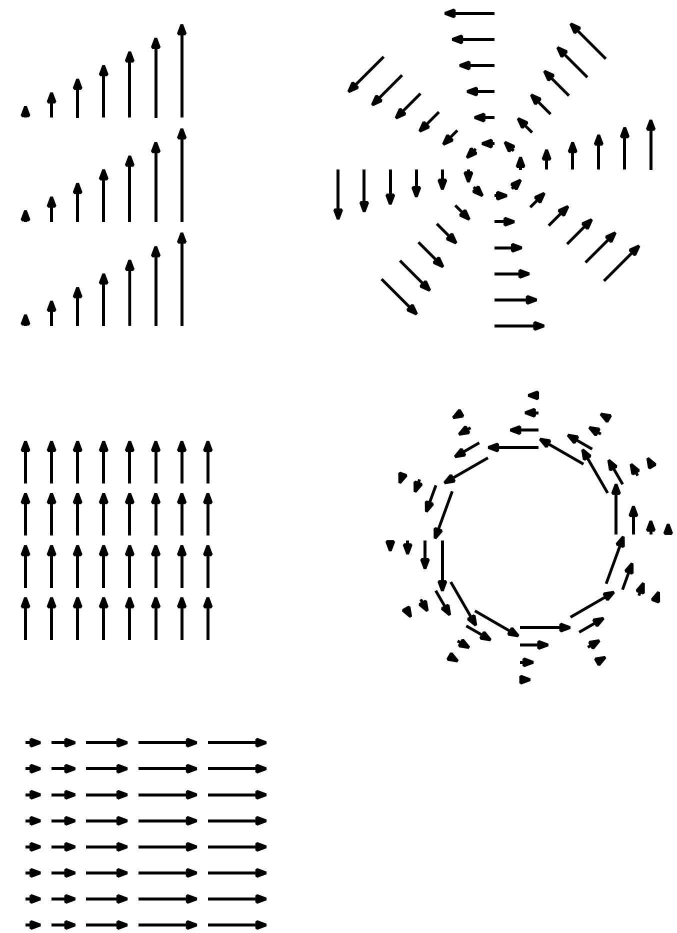
$$H = \sum_i \psi_i$$

ゲージ不変な保存量

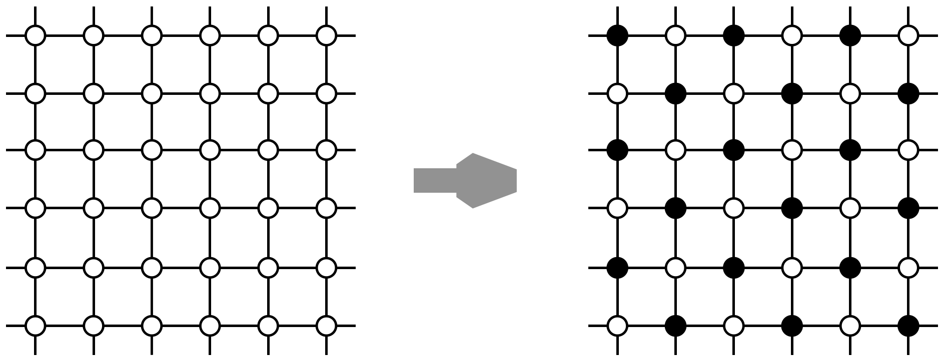
$$\theta_{ij} + \chi_i - \chi_j = 0$$

$$\frac{1}{n_i}\sum_i w_{ij} e^{\mathrm{i}(\chi_i - \chi_j)} = 1$$

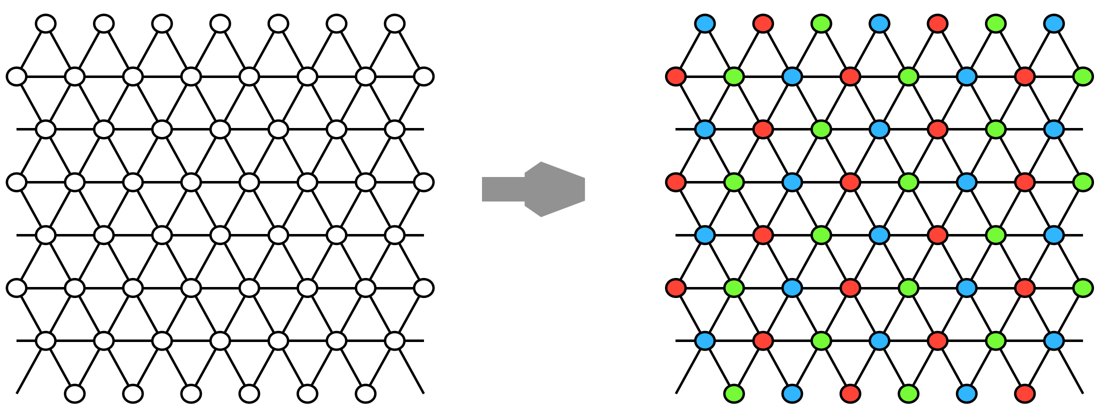
$$\boxed{H = \sum_i \psi_i e^{\mathrm{i}\chi_i}}$$



Tri-partite graph, n-partite graph



bi-partite graph



tri-partite graph

まとめ：新積分スキームについて

- ゲージ場ゼロのときに厳密な保存量存在.
- ゲージ場が存在するとき，$O(h^2)$の精度の保存量.
- 無条件安定.

課題

h: 空間刻み幅,
τ: 時間刻み幅

- 新スキームの実装
- 安定性や精度の検証
- より高精度：$O(\tau^2)$よりも高次のスキームの構成
- より高精度：$O(h^2)$よりも高次の保存量の構成
  ←共変微分の高次近似