陽的エネルギー保存数値積分法としての
AFI法の一般的非線形保存系への適用に関して

（ web公開版：ごめんなさい：内容一部削除(墨塗り) ）

松野哲也

有明高専 創造工学科 人間・福祉工学系 情報システムコース

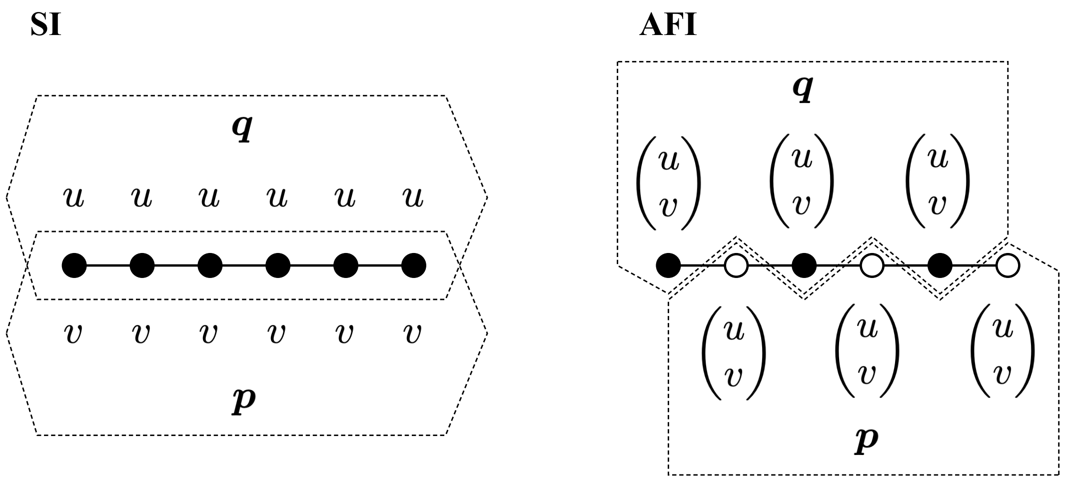
量子化磁束動力学シミュレーション研究グループ研究会2022年2月4日（遠隔）

内容：

- はじめに：Symplectic Integrator(SI)とAffine Integrator(AFI)の比較
- （古典的）波動方程式をSIおよびAFIで解く
- Fermi-Pasta-Ulamの非線形波動方程式をSIおよびAFIで解く
- 時間依存Gross-Pitaevskii(TDGP)方程式をAFIで解く
- まとめ，今後の課題
- （付録：エネルギー保存を実現する数値積分に関する既存研究）
- 参考文献

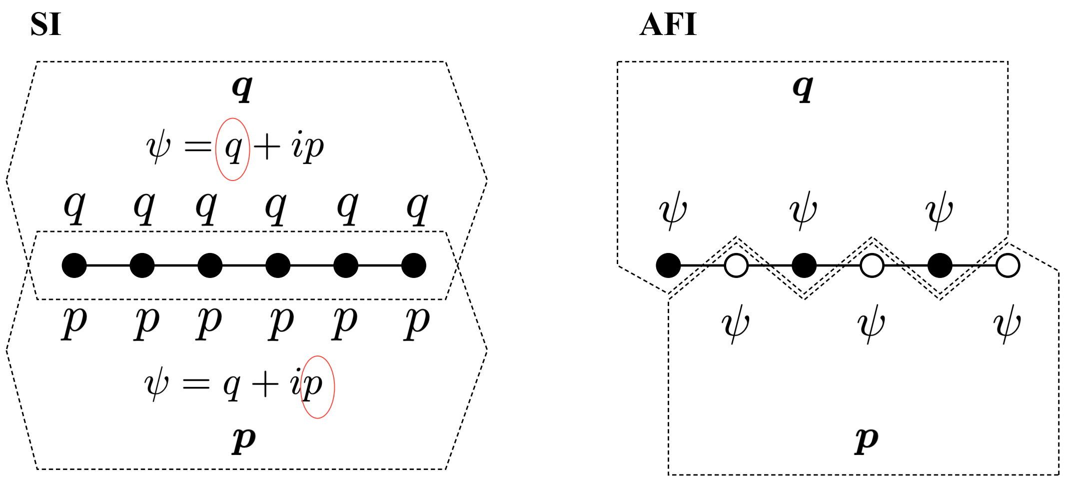
はじめに：Symplectic Integrator(SI)とAffine Integrator(AFI)の比較

（古典的）波動方程式



SIの共役変数対：(q=u, p=v)
AFIの共役変数対：
(q=(u, v), p=(u, v))

TDGL(TDGP)方程式



SIの共役変数対：(q, p)
AFIの共役変数対：
(q=ψ_q, p=ψ_p)

（古典的）波動方程式をSIおよびAFIで解く(1/6)

空間に関する離散化（差分化）

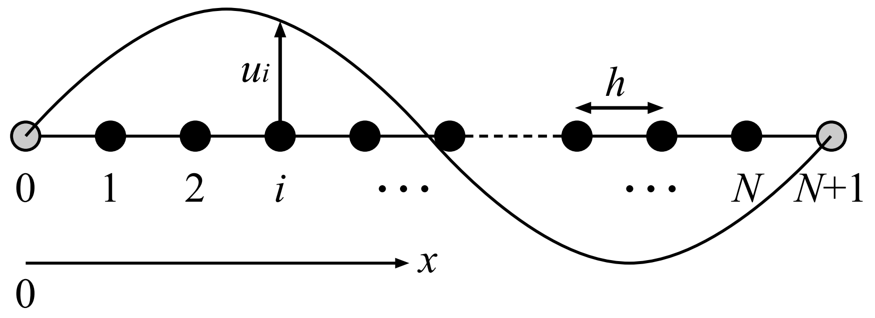
$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

基準位置からの弦の変位：$u(x,t)$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = v$$
$$\frac{\partial v}{\partial t} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

$$\frac{du_i}{dt} = v_i$$
$$\frac{dv_i}{dt} = \frac{c^2}{h^2}(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i)$$

ここでは1次元の弦の振動を
記述する波動方程式を考える



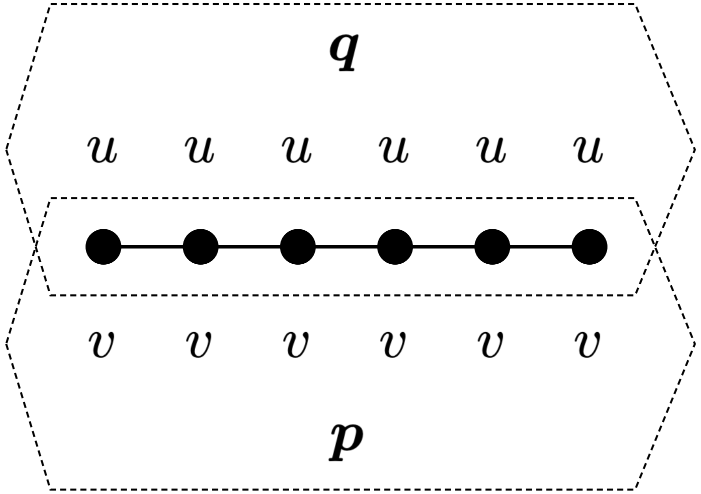
空間の離散化によって
偏微分方程式（波動方程式）は
常微分方程式に置き換えられる.

空間刻み幅：h
空間位置指定インデックス：i

（古典的）波動方程式をSIおよびAFIで解く(2/6)

Symplectic Integrator(SI)**[1]**で解く

$$\boldsymbol{q} = (u_1, \cdots, u_N)^T, \ \boldsymbol{p} = (v_1, \cdots, v_N)^T$$



$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} O & I \\ -K & O \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix}$$

ハミルトン方程式

$$T_Q(\tau) = \exp\left[\tau\begin{pmatrix} O & I \\ O & O \end{pmatrix}\right], \ T_P(\tau) = \exp\left[\tau\begin{pmatrix} O & O \\ -K & O \end{pmatrix}\right]$$

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{q}(t+\tau) \\ \boldsymbol{p}(t) \end{pmatrix} = T_Q(\tau)\begin{pmatrix} \boldsymbol{q}(t) \\ \boldsymbol{p}(t) \end{pmatrix}, \ \begin{pmatrix} \boldsymbol{q}(t) \\ \boldsymbol{p}(t+\tau) \end{pmatrix} = T_P(\tau)\begin{pmatrix} \boldsymbol{q}(t) \\ \boldsymbol{p}(t) \end{pmatrix}$$

$$T_Q(\tau) = \begin{pmatrix} I & \tau I \\ O & I \end{pmatrix}$$

$$T_P(\tau) = \begin{pmatrix} I & O \\ -\tau K & I \end{pmatrix}$$

SIのための
時間発展演算子の行列表現

$$K = \frac{c^2}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & & & \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & & \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots & \\ \cdots & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & \cdots \\ \cdots & & & & & & \\ \cdots & & & & & & \\ \cdots & \cdots & \cdots & 0 & -1 & 2 & -1 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

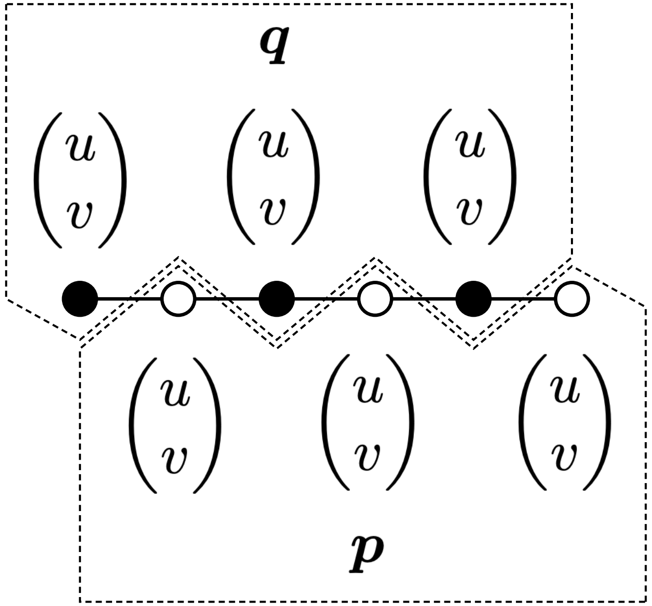
○ 行列式が1 → 位相空間の体積の保存
○ ハミルトニアンは保存しないがノンドリフト
○ 影のハミルトニアンは厳密保存（しかし τ 依存）

（古典的）波動方程式をSIおよびAFIで解く(3/6)

Affine Integrator(AFI)[2]で解く（その(1/3)）

$$
\frac{du_i}{dt} = v_i
$$
$$
\frac{dv_i}{dt} = \frac{c^2}{h^2}(u_{i+1} + u_{i-1} - 2u_i)
$$

$$
\frac{du_i}{dt} = v_i
$$
$$
\frac{dv_i}{dt} = \frac{c^2}{h^2}\sum_j w_{ij} - \frac{2c^2}{h^2}u_i
$$



$$
w_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{もしも格子点 } i \text{ と } j \text{ が隣同士ならば} \\ 0, & \text{もしも格子点 } i \text{ と } j \text{ が隣り合っていない，あるいは } i = j \text{ ならば} \end{cases}
$$

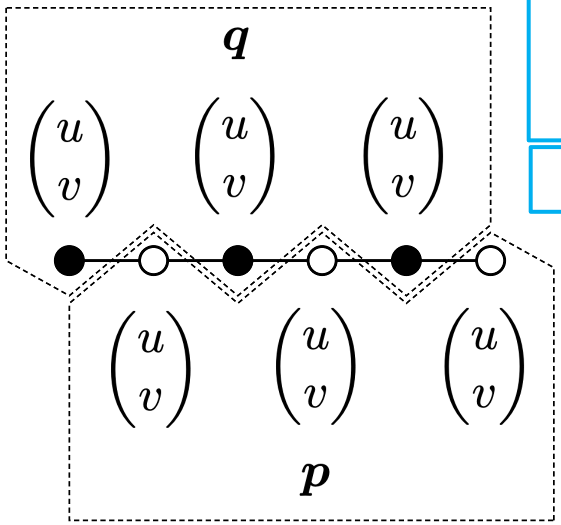
I’m sorry.

（古典的）波動方程式をSIおよびAFIで解く(4/6)

Affine Integrator(AFI)で解く（その(2/3)）

$$\boldsymbol{q}_i = \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix}, i \in Q \,; \qquad \boldsymbol{p}_i = \begin{pmatrix} u_i \\ v_i \end{pmatrix}, i \in P$$

$$T_Q(\tau) = \exp\left[\tau \begin{pmatrix} J\Omega & W \\ O & O \end{pmatrix}\right], \quad T_P(\tau) = \exp\left[\tau \begin{pmatrix} O & O \\ W^T & J\Omega \end{pmatrix}\right]$$



$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J\Omega & W \\ W^T & J\Omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix}$$

ハミルトン**的**方程式

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{q}(t+\tau) \\ \boldsymbol{p}(t) \end{pmatrix} = T_Q(\tau) \begin{pmatrix} \boldsymbol{q}(t) \\ \boldsymbol{p}(t) \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \boldsymbol{q}(t) \\ \boldsymbol{p}(t+\tau) \end{pmatrix} = T_P(\tau) \begin{pmatrix} \boldsymbol{q}(t) \\ \boldsymbol{p}(t) \end{pmatrix}$$

$$J = \mathrm{diag}\left[\cdots, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \cdots\right]$$

$$\Omega = \mathrm{diag}\left[\cdots, \begin{pmatrix} \omega^2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \cdots\right]$$

$T_Q(\tau) =$

$T_P(\tau) =$

I’m sorry

AFIのための
時間発展演算子の行列表現

（古典的）波動方程式をSIおよびAFIで解く(5/6)

Affine Integrator(AFI)で解く（その(3/3)）

I’m sorry.

I’m sorry.

q-格子，p-格子について交互に時間発展させる

ハミルトニアンが保存する

（古典的）波動方程式をSIおよびAFIで解く(6/6)

AFIにおけるエネルギー保存

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\left[v_i^2 + \frac{c^2}{2h^2}(u_{i+1} - u_i)^2\right]$$

$H = (\boldsymbol{q} \;\; \boldsymbol{p})$ I’m sorry. $\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ \boldsymbol{p} \end{pmatrix}$

$\hat{H} =$ I’m sorry.

$$T_Q(\tau)^T \hat{H} T_Q(\tau) = \hat{H},$$

$$T_P(\tau)^T \hat{H} T_P(\tau) = \hat{H}$$

ハミルトニアンが保存する

Fermi-Pasta-Ulamの非線形波動方程式をSIおよびAFIで解く(1/3)

Fermi, Pasta, Ulam 1954: 非線形バネで連結された1次元振動子系のコンピュータシミュレーション[3]
→ 「非線形性がエネルギー等分配をもたらすのではないか？」
　「熱平衡状態への移行プロセス（熱化 thermalization）を非線形力学系でシミュレートできないか？」
　「非可逆性（熱力学第２法則）を非線形力学系で再現できないか？」
　「コンピュータでエルゴード性に関する研究ができないか？」
　．．．統計熱力学へ古典力学からアプローチする野心的な試み
→　結果的に，豊かな非線形力学（ソリトン，可積分系．．）の世界をもたらした．

$$\frac{d^2 u_i}{dt^2} = \frac{c^2}{h^2}\left[(u_{i+1} - u_i) - (u_i - u_{i-1}) + \frac{\alpha}{h}\left((u_{i+1} - u_i)^2 - (u_i - u_{i-1})^2\right)\right]$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial u}{\partial x} + \alpha\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2\right]$$

空間連続極限

Fermi-Pasta-Ulamの非線形波動方程式をSIおよびAFIで解く(2/3)

$$H = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\left[v_i^2 + \frac{c^2}{2h^2}(u_{i+1}-u_i)^2 + \frac{c^2\alpha}{3h^3}(u_i-u_{i-1})^3\right]$$

このハミルトニアンは
保存するか？

$$\frac{d^2u_i}{dt^2} = \frac{c^2}{h^2}\left[(u_{i+1}-u_i)-(u_i-u_{i-1})+\frac{\alpha}{h}((u_{i+1}-u_i)^2-(u_i-u_{i-1})^2)\right]$$

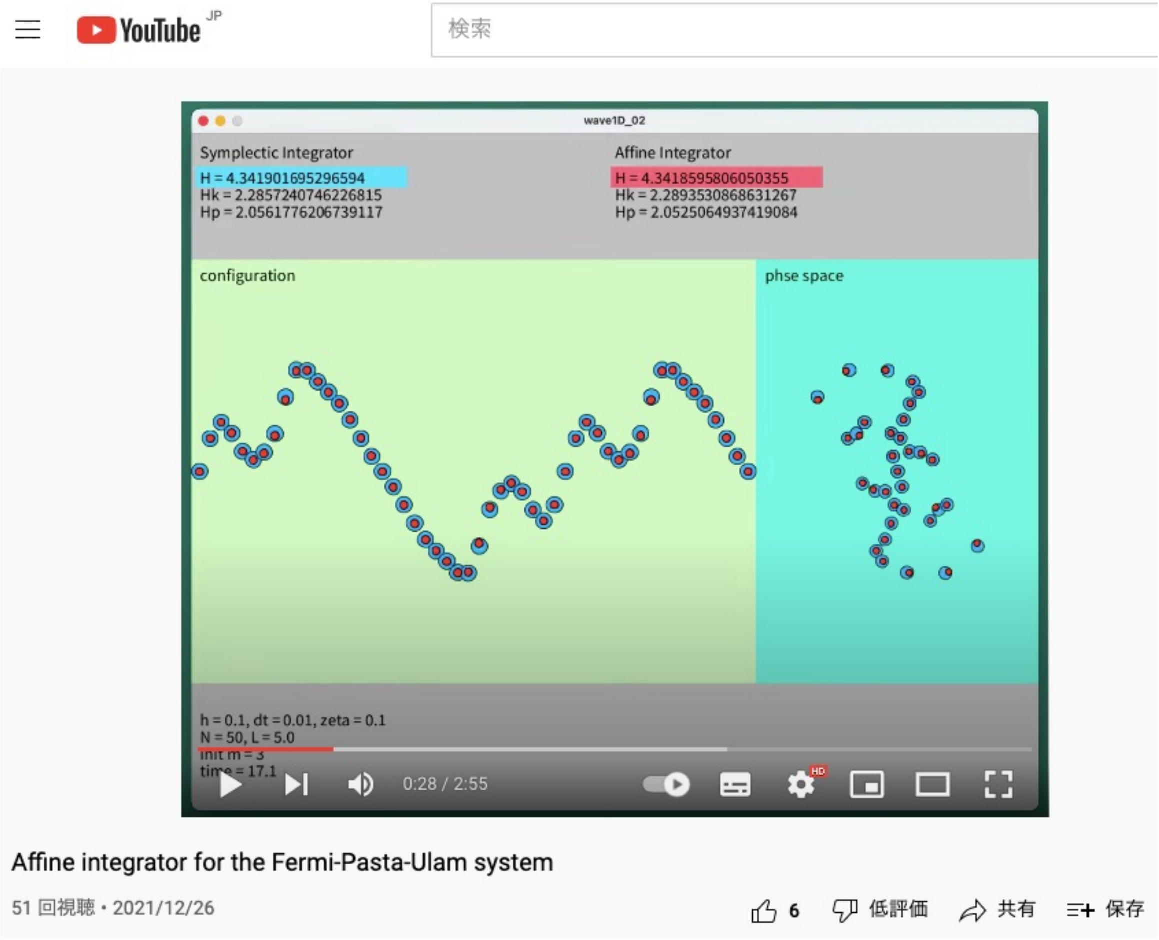
簡単な式変形

I’m sorry.

I’m sorry.

保存する

Fermi-Pasta-Ulamの非線形波動方程式をSIおよびAFIで解く(3/3)



https://youtu.be/sSj8XwTS2qQ

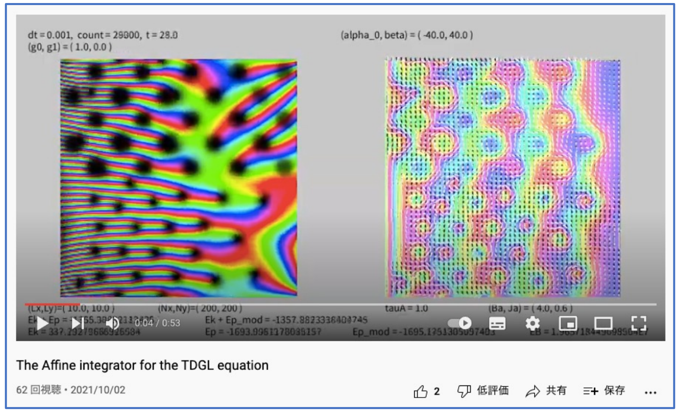
時間依存Gross-Pitaevskii(TDGP)方程式をAFIで解く(1/4)

$$\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\nabla - i\boldsymbol{A})^2 \psi - \alpha\psi - \beta|\psi|^2\psi,$$

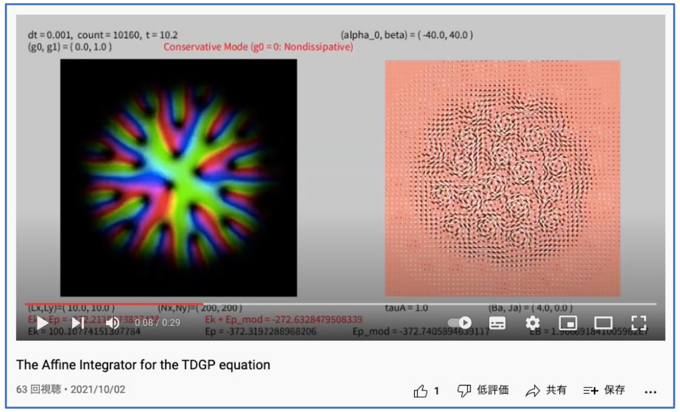
$$\gamma = \gamma_0 - i\gamma_1$$

$(\gamma_0, \gamma_1) = (1, 0)$ TDGL方程式

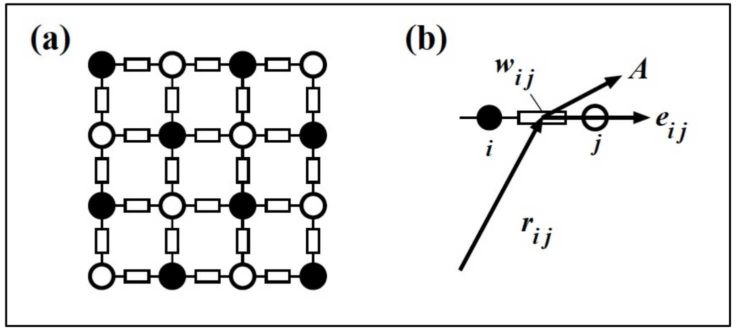
$(\gamma_0, \gamma_1) = (0, 1)$ TDGP方程式



https://youtu.be/BDVNePEE8pg



https://youtu.be/1IW6twBvmvE



時間依存Gross-Pitaevskii(TDGP)方程式をAFIで解く(2/4)

$$\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\nabla - i\mathbf{A})^2 \psi - \alpha\psi - \beta|\psi|^2\psi,$$

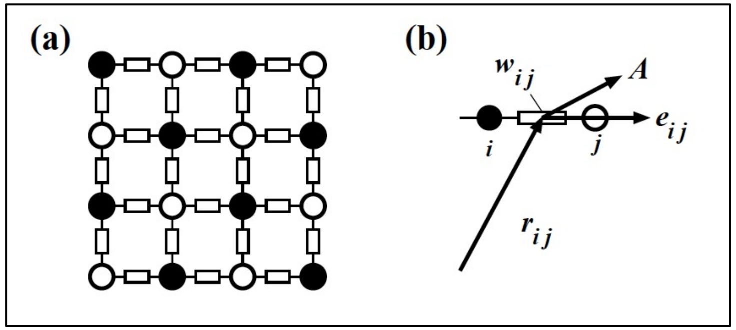
$$\gamma \frac{d}{dt}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \frac{1}{h^2}\left\{ \sum_{i\in Q}\left[\sum_{j\in P} w_{ij}p_j - \left(n_i + \tilde{\alpha}_i h^2\right) q_i\right]\frac{\partial}{\partial q_i} + \sum_{j\in P}\left[\sum_{i\in Q} w_{ji}q_i - \left(n_j + \tilde{\alpha}_j h^2\right) p_j\right]\frac{\partial}{\partial p_j}\right\}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix},$$

$$\tilde{\alpha}_i \equiv \alpha_i + \beta \cdot Avg_i(p), \quad i \in Q,$$
$$\tilde{\alpha}_j \equiv \alpha_j + \beta \cdot Avg_j(q), \quad j \in P.$$

$$Avg_i(\psi) \equiv \frac{1}{n_i}\sum_{j\in K_i} |w_{ij}\psi_j|^2, \quad \psi \equiv q \text{ or } p,$$

$$Avg_i(\psi) \equiv \left|\frac{1}{n_i}\sum_{j\in K_i} w_{ij}\psi_j\right|^2, \quad \psi \equiv q \text{ or } p.$$

バージョン
アップ！



時間依存Gross-Pitaevskii(TDGP)方程式をAFIで解く(3/4)

$$E(q,p) \equiv (q^*, p^*) H(q,p) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix},$$

ハミルトニアン行列でエネルギーが定義される

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \partial E(q,p)/\partial q^* \\ \partial E(q,p)/\partial p^* \end{pmatrix}$$

TDGL/TDGP方程式は
エネルギー勾配に関する微分方程式の形に書ける

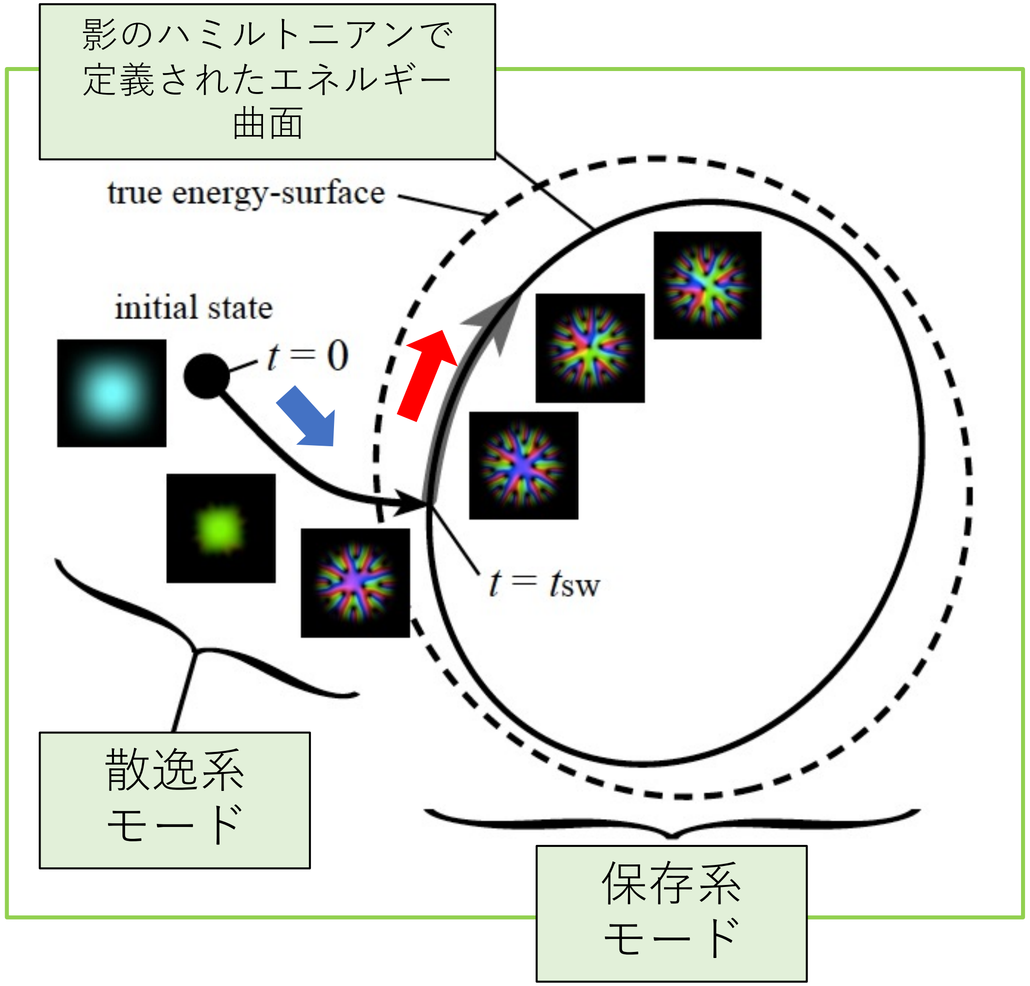
$$\tilde{H}(q,p) \equiv \begin{pmatrix} \tilde{\eta}_Q & -W \\ -W^\dagger & \tilde{\eta}_P \end{pmatrix},$$

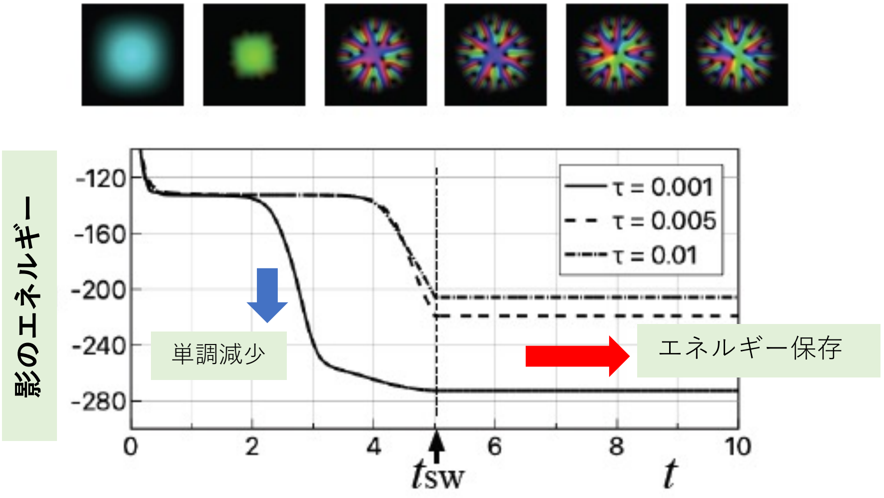
$$\tilde{\eta}_Q \equiv \mathrm{diag}\left\{\cdots, \left[n_i + \left(\alpha_i + \frac{\beta}{2} \cdot Avg_i(p)\right) h^2\right], \cdots\right\}, \quad i \in Q$$

$$\tilde{\eta}_P \equiv \mathrm{diag}\left\{\cdots, \left[n_j + \left(\alpha_j + \frac{\beta}{2} \cdot Avg_j(q)\right) h^2\right], \cdots\right\}, \quad j \in P.$$

AFIは「影のハミルトニアン行列」で定義されるエネルギーを保存する

時間依存Gross-Pitaevskii(TDGP)方程式をAFIで解く(4/4)





I’m sorry.

まとめ，今後の課題

- 線形波動方程式およびFPU非線形波動方程式においてAFIはエネルギーを保存する.
- TDGP方程式においてAFIは「影のエネルギー」を保存する.
- 一般の非線形保存系への陽的エネルギー保存AFIスキームの構築は今後の課題である.

（付録：エネルギー保存を実現する数値積分に関する既存研究）

- Discrete Variational Derivative Method（離散変分導関数法）**[4]**
  → 陰的解法になりがち．←要確認（勉強中(^^;))

- Projection method**[1]**
  → エネルギー曲面の上に毎時間ステップごとに射影する．
  → 「強引」な印象．陰的解法になりがち．

- JWG法（仮称）**[5]**
  → 「ハミルトニアンの「２次化」+ Projection method[1]」でスキームを構成．
  → 補助変数の導入による「２次化」によって**陽的**なProjection methodを実現した．
  → 汎用的（多分どんな非線形でもOK）．

参考文献

- **[1]** E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner, “*Geometric Numerical Integration*” (Springer, New York, 2005) 2nd Ed. （**構造保存（幾何学的）数値積分法に関する教科書．皆が参照する．**）
- **[2]** T. Matsuno, E. S. Otabe, and Y. Mawatari, ”Explicit Integrators Based on a Bipartite Lattice and a Pair of Affine Transformations to Solve Quantum Equations with Gauge Fields,’’ J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 054006 (2020).（**この論文でAFIが提案された．**）
- **[3]** T. P. Weissert, “The Genesis of Simulation in Dynamics -- Pursuing the Fermi-Pasta-Ulam Problem” (Springer-Verlag, New York 1997）.（**とても楽しい”Fermi-Pasta-Ulam”解説本．**）
- **[4]** D. Furihata and T. Matsuo, “Discrete Variational Derivative Method” (CRC Press, London, 2010).（**汎関数を変分することで導かれる偏微分方程式に適した数値積分法を提案**）
- **[5]** C. Jiang, Y. Wang, and Y. Gong, “Explicit high-order energy-preserving methods for general Hamiltonian partial differential equations,” J. Compt. App. Math. **388** (2021) 113298. （**エネルギー保存解法を陽的に構成できたことがアピールポイント**）