

# Symplectic Integrator から Affine Integrator へ

— 構造保存な陽的数値解法に着目する —  
\* web公開版 (ごめんなさい:一部墨塗り(^^;))

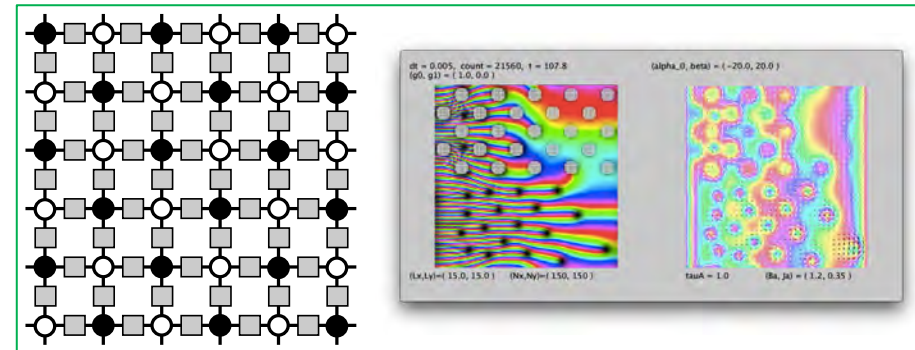
量子化磁束動力学シミュレーション研究グループ  
夏 (→秋) のセミナー2021 (in 由布院 & リモート)

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  
松野哲也

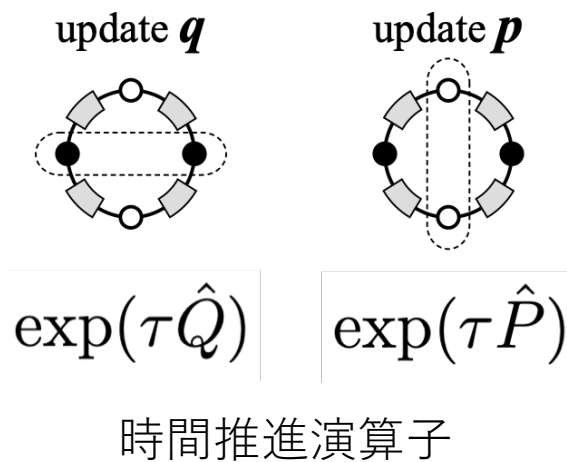
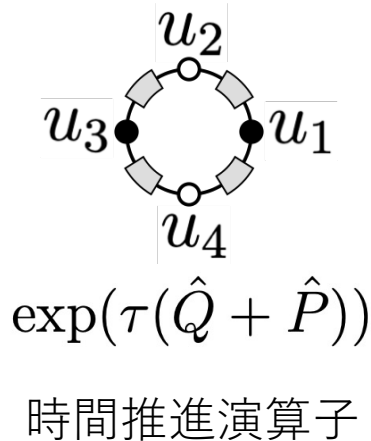
# 目次

- 1 : AFI (Affine integrator) とは
- 2 : AFIの導出方法について (\*配布資料)
- 3 : TDBdG方程式への適用
- 4 : Symplectic integrator (SI) とは  
→ AFIへの出発点として
- 5 : Maxwell方程式の実装について
- 6 : Schrödinger方程式の実装について  
→ AFIとSIの2通りの実装.
- 7 : 非線形の場合でも構造保存するAFI実装について
- 8 : まとめ → 課題

# 1 : Affine Integrator (AFI) とは



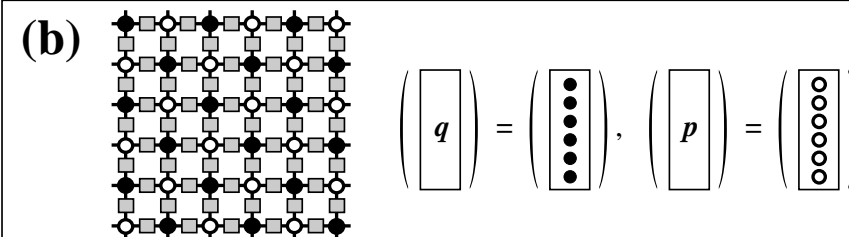
- (a) アフィン変換
- (b) カノニカル共役ペアの構成
- (c) 時間推進演算子の行列表現



(a) 
$$\begin{pmatrix} q' \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A \\ 0 \dots 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} q' \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & b \\ 0 \dots 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} q' \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & \begin{matrix} 0 \\ \diagdown b \\ 0 \end{matrix} \\ O & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$



(c) 
$$\begin{pmatrix} q' \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_q & B_q \\ O & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

Affine変換対

$$\begin{pmatrix} q \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & O \\ B_p & A_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

# Lie-Trotter-Suzuki分解

分解されたそれぞれの時間推進演算子に対して正確な行列表現を得ることができる。

$$\exp(\tau(\hat{Q} + \hat{P}))$$

時間推進演算子

1次

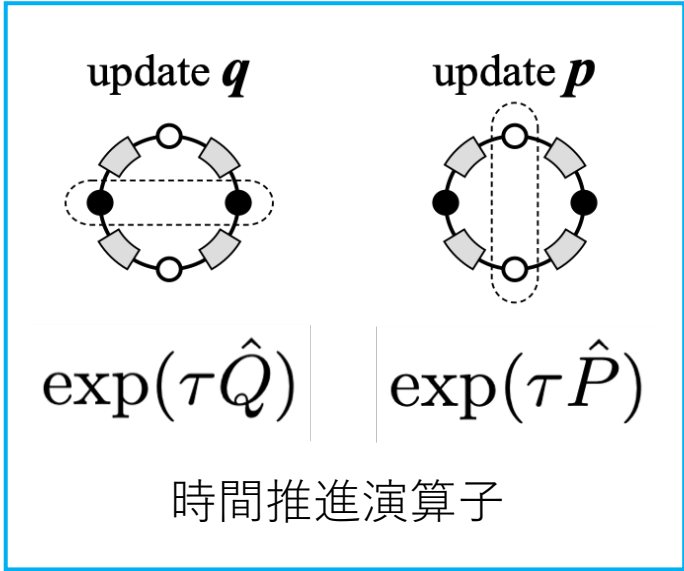
$$\exp(\tau\hat{Q}) \exp(\tau\hat{P})$$

2次

$$\exp((\tau/2)\hat{Q}) \exp(\tau\hat{P}) \exp((\tau/2)\hat{Q})$$

4次

...



最近（2020年），  
Barthel と Zhang によって  
最適なLie-Trotter-Suzuki分解が  
提案された。

# 各種数値積分法の比較 (誤差および安定性の観点から)

$$\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( \frac{\partial}{\partial x} - iA_x \right)^2 \psi$$

$$\gamma = 1, A_x = 0$$

散逸系

- Euler法
- 修正Euler法
- DuFort-Frankel法
- Runge-Kutta法 (4次)
- AFI-2
- AFI-2-optimized LTS
- AFI-4-Suzuki
- AFI-4-optimized LTS
- AFI-6-optimized LTS

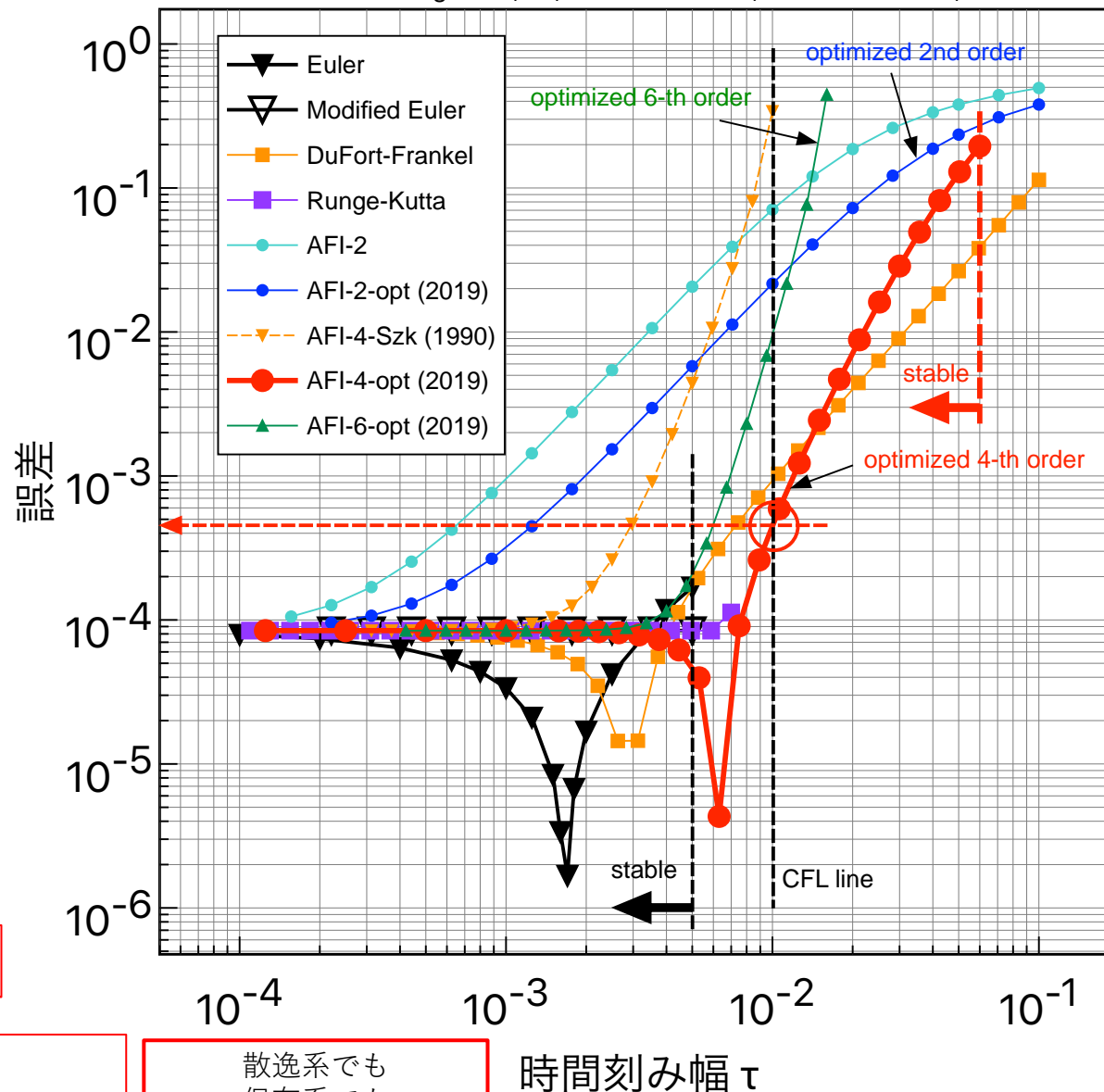
最適化LTS分解  
が提案されてい  
て幸いです。

AFI-4-optimized LTS が最も高精度

※ 計算量, 安定領域の広さ, 記憶領域の観点から,  
AFI-4-optimized LTS はRunge-Kutta (4次) よりも優れている。

散逸系でも  
保存系でも

Affine Integrator (AFI): 誤差の  $\tau$  依存性 (空間刻み幅  $h = 0.1$ )



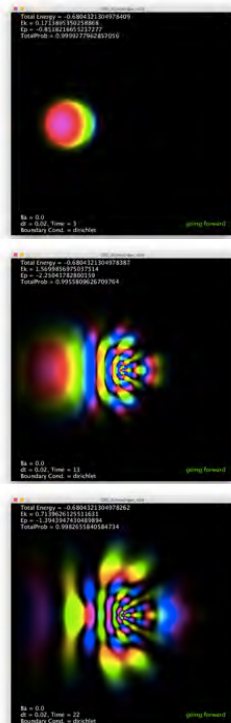
# AFIは保存系においてエネルギーを厳密に保存する (→ TDBdG方程式系 (保存系) でもエネルギー厳密保存)

## 線形シュレディンガー方程式

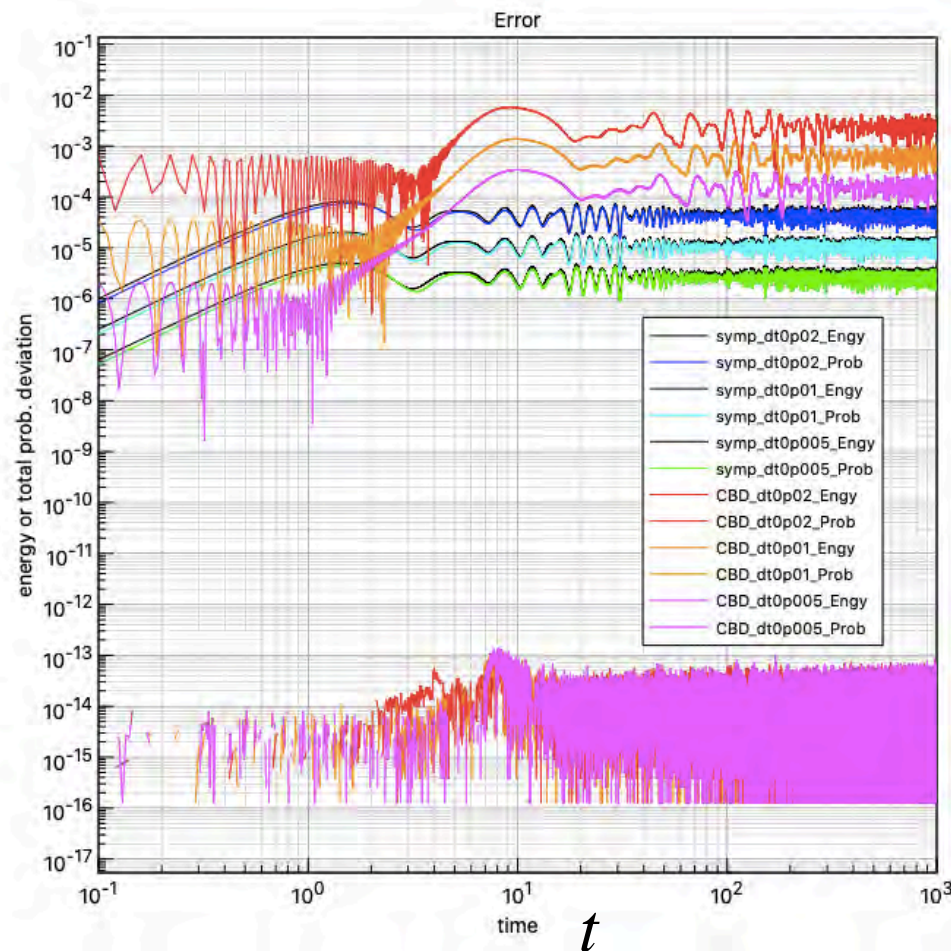
TDGL方程式において時定数 $\gamma$ を純虚数とし、非線形パラメータ $\beta$ をゼロとおけば(線形)シュレディンガー方程式となる

波束を「 $1/r$ ポテンシャルに落とす」シミュレーション

相対性理論の本を気分転換として読んでいたら、不変量が(行列を挟んだ)内積の形で書いてあるのを見つけました。それで証明方法を思いつきました(^.^).



倍精度の丸め誤差  
(マシンイプシロン)



Affine Integrator

Total Prob: AFI

Total Energy & Prob: SI

Symplectic integrator

Total Energy: AFI

Affine Integrator



おかげさまで、  
もう少しで  
1000ダウンロード(^^)

The screenshot shows the article page for "Explicit Integrators Based on a Bipartite Lattice and a Pair of Affine Transformations to Solve Quantum Equations with Gauge Fields" in the Journal of the Physical Society of Japan, Volume 89, Number 5, 2020. The page features the JPS logo, navigation tabs, and article information. Key elements highlighted with red circles include the article title, the author list (Tetsuya Matsuno<sup>1</sup>, Edmund Soji Otabe<sup>2</sup>, and Yasunori Mawatari<sup>3</sup>), and the total download count (987 total downloads). A yellow box highlights the DOI link: <https://journals.jps.jp/doi/abs/10.7566/JPSJ.89.054006>.

ISSN: (Online) 1347-4073  
(Print) 0031-9015

Citation Search DOI/ISSN/ISBN Advanced Search  
J. Phys. Soc. Jpn. Volume Issue Page/ID Go

JPS Journals JPSJ News and Comments JPS Hot Topics JPS Conf. Proc. PTEP

Home > Journal of the Physical Society of Japan > Volume 89, Number 5 > Explicit Integrators Based on a Bipartite Lattice and a Pair of Affine...

J. Phys. Soc. Jpn. 89, 054006 (2020) [13 Pages] « Previous Article | Next Article **987 total downloads**

FULL PAPERS  
Editors' Choice

**Explicit Integrators Based on a Bipartite Lattice and a Pair of Affine Transformations to Solve Quantum Equations with Gauge Fields**

Abstract Full Text References (24)

Full text: PDF (2883 kB)

Share: f t +

**Tetsuya Matsuno<sup>1</sup>, Edmund Soji Otabe<sup>2</sup>, and Yasunori Mawatari<sup>3</sup>**  
+ Affiliations

Received December 11, 2019; Accepted March 26, 2020; Published April 27, 2020

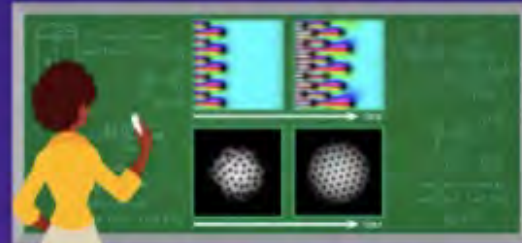
An explicit integrator is proposed to solve the time-dependent Ginzburg-Landau equation and the time-dependent Gross-Pitaevskii equation. The explicit integrator is based on the affine transformations that act on the wave function of the quantum system. Numerical integration with high accuracy is achieved.

<https://journals.jps.jp/doi/abs/10.7566/JPSJ.89.054006>

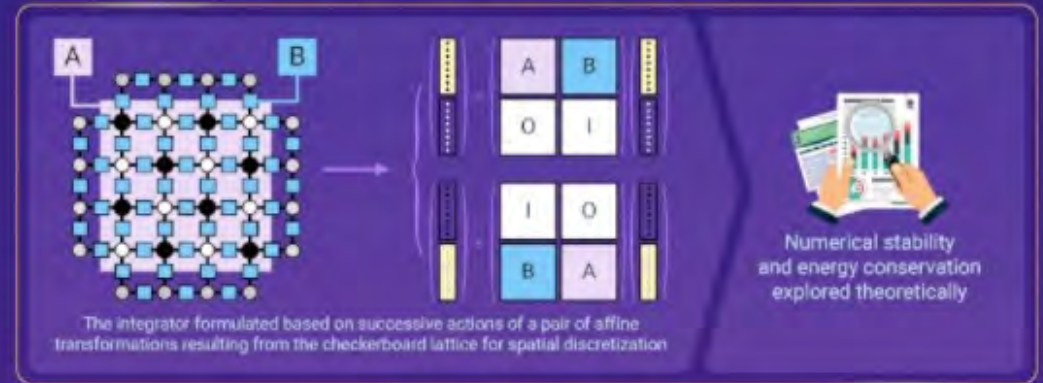
おかげさまで、  
AFI論文2020の  
インフォグラフィックを  
作っていただきました(^^).

## Solving Quantum Equations with Gauge Fields: How Explicit Integrators Based on a Bipartite Lattice and Affine Transformations Can Help

An explicit integrator is proposed to solve the time-dependent Ginzburg–Landau and Gross–Pitaevskii equations, which describes quantum dynamics with gauge fields



Explicit integrators have the advantage of being easily implemented for high-speed calculation by parallelizing the integration processes



### The explicit integrator

✓ Has low computational complexity per unit time step

Has low consumption of storage for variables in the governing equation for nonlinear quantum systems

Shows high stability and efficiency

### The proposed integration algorithm...

✓ Is suitable for numerical simulations of macroscopic quantum dynamics with gauge field and nonlinearity

✓ Can accelerate studies of quantum engineering based on computer simulations

✓ Finds applications in designing power transport cables of superconductors, quantum sensors, and information processors



## 2 : AFIの導出方法について (\*配布資料)

- ブロック行列の逆行列の公式
- 行列の指数関数をラプラス変換で求める公式

↑ これら2つの公式を使うとAFIの導出は容易

\* AFI論文2020における導出はわかりにくかった(^^;).

# 3 : TDBdG方程式への適用

2021年もAFI関連話題を  
日本物理学会秋季大会でポス  
ター発表しました。

- 今回もリモートポスター発表ですが、  
質疑応答義務時間帯が設けられていました：  
リアルタイムのディスカッションが可能でした。
- 「構造保存が陽的解法で実現できるって凄い」  
とのコメントをいただきました。  
その時点では、  
非線形だと構造保存できてなくて、  
「今後の課題です」と先方に伝えました。  
しかし、  
現時点では構造保存が実現できています！  
(ただし、TDGL(TDGP)タイプの非線形限定)

**時間依存ボゴリューボフドジャン方程式のためのエネルギー保存数値積分法**  
Energy-conservation numerical integrator for the time-dependent Bogoliubov-de Gennes equation

○ 松野 哲也<sup>A</sup>, 東 陽一<sup>B</sup>, 馬渡康徳<sup>B</sup>, 小田部 荘司<sup>C</sup>  
有明高専<sup>A</sup>, 産総研<sup>B</sup>, 九工大<sup>C</sup>  
Tetsuya Matsuno<sup>A</sup>, Yoichi Higashi<sup>B</sup>, Yasunori Mawatari<sup>B</sup>, Edmund Soji Otabe<sup>A</sup>  
<sup>A</sup>NIT Ariake college, <sup>B</sup>AIST, <sup>C</sup>Kyushu Inst. Tech.

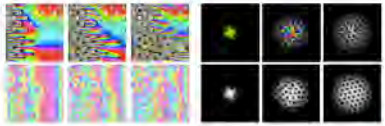
**背景**

第2種超伝導体における電磁現象と超伝導工学

- 臨界電流密度
- 量子化磁束とピン(不純物, 欠陥)の相互作用
- トポジカル超伝導

超伝導体の物理

- 回転超伝導体における量子渦
- 乱流における量子渦



$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = (\hat{A}_Q + \hat{A}_P) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

Q: 「黒丸」格子点指定  
インデックス集合  
P: 「白丸」格子点指定  
インデックス集合

$$\hat{A}_Q = \sum_{i \in Q} \left[ -U_i q_i + \sum_{j \in P(i)} (-q_j + w_{ij} p_j) / \hbar v_j^2 \right] \frac{\partial}{\partial q_i}$$

$$\hat{A}_P = \sum_{i \in P} \left[ -U_i p_i + \sum_{j \in Q(i)} (-p_j + w_{ij} q_j) / \hbar v_j^2 \right] \frac{\partial}{\partial p_i}$$

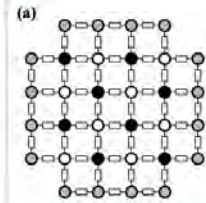
$$U_i = \alpha_i + \beta_i |\bar{\psi}_i|^2$$

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

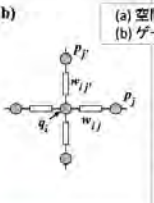
超伝導体内の量子化磁束や回転超伝導体内の量子渦の力学を記述できる非線形複素偏微分方程式。すなわち時間依存ギンツブルグ-ランダウ (TDGL) 方程式や時間依存グロス-ピタエフスキー (TDGP) 方程式を効率よく数値的に解くことは重要である。

最近我々はゲージ場存在下での複素偏微分方程式を解くための高安定な陽的数値積分法 (Affine Integrator: AFI) を提案した[1]。AFIは、空間離散化格子を2部グラフと見做すことによって高次元複素ベクトルを導出し、それらにアフィン変換を逐次的に作用させて時間発展させていく形の陽的数値積分法である。

(a) 空間に関する離散化のための格子



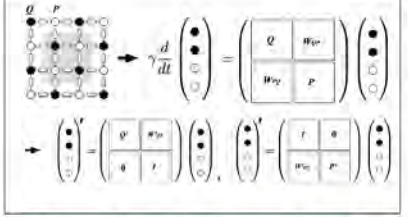
(b) ゲージ場(磁場, 回転速度場)をリンク変数(格子点間で定義される)により導入



**AFI: Affine Integrator の構成**

(1) 「チェッカーボード」格子の導入にともなう  
Affine変換対による離散時間発展: AFIの場合は、共役変数ペアは(a)の「黒丸」と「白丸」上で定義される従属変数ψ。

(2) 指数関数時間発展演算子のLie-Trotter-Suzuki 分解



参考文献 [1] T. Matsuno, E. S. Otabe, and Y. Mawatari; J. Phys. Soc. Jpn. 89 (2020) 054006.  
<https://josh.t.u-a.ac.jp/article/1.012.html>

## 目的

AFIが時間依存ボゴリューボフ・ドジャン方程式に対しても(複素ベクトル場に対しても)有効であることを示す。  
すなわち、このときもエネルギー厳密保存数値積分法であることを示す。

## 時間依存ボゴリューボフ・ドジャン (Time-dependent Bogoliubov-de Gennes) 方程式:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(\nabla - ig\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) - \mu & \Delta \\ \Delta^* & (\nabla + ig\mathbf{A})^2 - V(\mathbf{r}) + \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$$

- $(u(\mathbf{r}, t), v(\mathbf{r}, t))$ : 波動関数(超伝導状態における低エネルギー励起: ボゴリューボフ準粒子のための波動関数)
- $\Delta$ : オーダーパラメータ(超伝導電子の波動関数) (\*は複素共役)
- $\mathbf{A}$ : ベクトルポテンシャル,  $g$ : 電荷,  $V(\mathbf{r})$ : ポテンシャル,  $\mu$ : 化学ポテンシャル(フェルミ準位)

## 理論解析: エネルギーが厳密保存(時間に関して区分的に)すること

- 簡単な空間離散化格子(波動関数の標準化点が2つ, ベクトルポテンシャルの標準化点が1つ)を利用する。(2次元や3次元のチェッカボード格子への一般化は容易である。)
- 任意の時間刻み幅  $\tau$  に対して  $H(t+\tau) = H(t)$  であることを示す。

$$i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = G \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad G = \begin{pmatrix} S_q & -W \\ -W^\dagger & S_p \end{pmatrix} \quad \mathbf{q} = (q_u, q_v)^T, \quad \mathbf{p} = (p_u, p_v)^T$$

$$S_q = \begin{pmatrix} 1 + \alpha_q & \Delta_q \\ \Delta_q^* & -1 - \alpha_q \end{pmatrix}, \quad S_p = \begin{pmatrix} 1 + \alpha_p & \Delta_p \\ \Delta_p^* & -1 - \alpha_p \end{pmatrix}, \quad W = \begin{pmatrix} w_u & 0 \\ 0 & -w_v \end{pmatrix}$$

$$\alpha_q \rightarrow V(\mathbf{r}) - \mu, \quad \alpha_p \rightarrow -V(\mathbf{r}) + \mu \quad w_u = \exp(-ihg\mathbf{A}), \quad w_v = \exp(ihg\mathbf{A})$$

$$\begin{pmatrix} q(t+\tau) \\ p(t+\tau) \end{pmatrix} = A_Q(c_1\tau)A_P(d_1\tau) \cdots A_Q(c_k\tau)A_P(d_k\tau) \cdots \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix}$$

- 時間に関する離散化
- Lie-Trotter-Suzuki分解

$$A_Q(\tau) = \begin{pmatrix} e^{-i\tau S_q} & S_q^{-1}(I - e^{-i\tau S_q})W \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad A_P(\tau) = \begin{pmatrix} I & 0 \\ S_p^{-1}(I - e^{-i\tau S_p})W^\dagger & e^{-i\tau S_p} \end{pmatrix}$$

全エネルギー:  $H = (q^\dagger \ p^\dagger)G \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$

全エネルギー保存:  $H(t+\tau) = H(t)$

全エネルギー保存が成り立つとき  $A_Q^\dagger G A_Q = G, A_P^\dagger G A_P = G$  である。なぜならば、

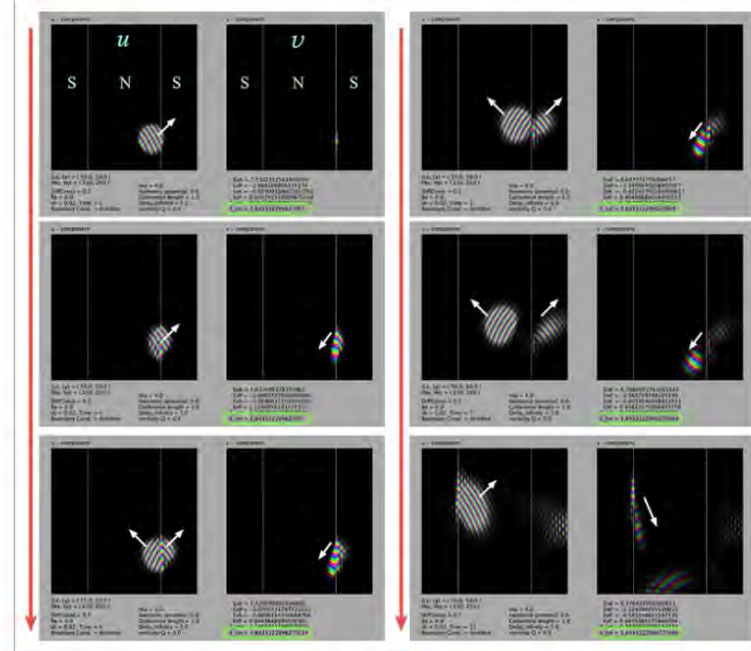
$$\begin{aligned} (q^\dagger(t+\tau) \ p^\dagger(t))G \begin{pmatrix} q(t+\tau) \\ p(t) \end{pmatrix} &= (q^\dagger(t) \ p^\dagger(t))A_Q^\dagger G A_Q \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} \\ (q^\dagger(t) \ p^\dagger(t+\tau))G \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t+\tau) \end{pmatrix} &= (q^\dagger(t) \ p^\dagger(t))A_P^\dagger G A_P \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

であるからである。

## 数値計算結果

超伝導(S)-常伝導(N)-超伝導(S)領域において、  
適当な電子波束を運動させてエネルギー保存性を確認した。

→ 緑色囲みは全エネルギーを示す。  
丸め誤差レベルでエネルギーが保存されていることが確認できる。理論通りである。



## 補足

関連動画サイト ● URL: <https://www.youtube.com/user/pfetsuvaGPU/videos>

● 電子波束が常伝導領域(N)から超伝導領域(S)に侵入する際に、超伝導領域(S)ではクーパー対を組む必要があるのが新たにホール(正孔)が生じ、それが常伝導領域(N)へ反射する。そのホールは電子の侵入方向を逆向きに辿る。この物理現象(アンドレーエフ反射)が数値的に再現された。

● 上記例はゲージ場(磁場)無しの場合であるが、磁場存在下でもエネルギーが厳密(数値的に丸め誤差レベル)保存することが確認された。

## 今後の課題

複素ベクトル場の時間発展  
数値シミュレーション →

- 2成分超伝導系
- 時間依存量子電磁力学
- 時間依存量子色力学

$$\begin{aligned} \gamma_1 \frac{\partial}{\partial t} \psi_1 &= \frac{\hbar^2}{2m_1} (\nabla - ig\mathbf{A})^2 \psi_1 - \alpha_1 \psi_1 - \beta_1 |\psi_1|^2 \psi_1 - \eta \psi_2, \\ \gamma_2 \frac{\partial}{\partial t} \psi_2 &= \frac{\hbar^2}{2m_2} (\nabla - ig\mathbf{A})^2 \psi_2 - \alpha_2 \psi_2 - \beta_2 |\psi_2|^2 \psi_2 - \eta^* \psi_1, \\ \tau_A \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} &= g \text{Im} \left[ \sum_{j=1,2} \psi_j^* (\nabla - ig\mathbf{A}) \psi_j \right] - \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \end{aligned}$$

## 4 : Symplectic integrator (SI) とは

### Symplectic integrator の特徴

- 位相空間の体積を厳密に保存 → 構造保存
- Geometric integrator の一種
- 保存系と相性が良い

### Symplectic integrator の長所

- 保存量がドリフトしない.
- シミュレーションのための記憶領域が最小.  
(従属変数の数 × シミュレーション領域 1 面分のみ)

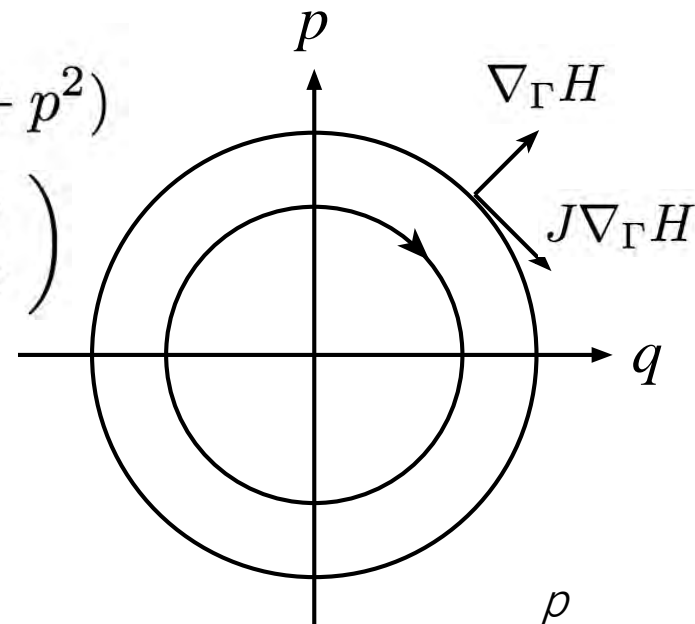


# ハミルトン方程式

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = J\nabla_{\Gamma}H$$

$$H = \frac{1}{2}(q^2 + p^2)$$

$$\nabla_{\Gamma}H = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

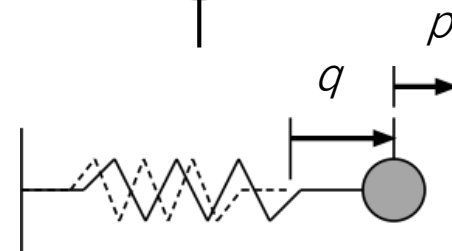


簡単な例：単振動

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

$$\mathbf{u} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$



カノニカル変数：  $q, p$

変数  $q$  と  $p$  は互いにカノニカル共役

反対称行列



# 時間に関する離散化

symplectic integrator の考え方を用いる

$$\begin{pmatrix} \mathbf{q}(t + \tau) \\ \mathbf{p}(t + \tau) \end{pmatrix} = \exp(\tau J) \begin{pmatrix} \mathbf{q}(t) \\ \mathbf{p}(t) \end{pmatrix} \quad J = J_q + J_p$$

$$J = \begin{pmatrix} 0 & G \\ -G^T & 0 \end{pmatrix} \quad J_q = \begin{pmatrix} 0 & G \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad J_p = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -G^T & 0 \end{pmatrix}$$

$$\exp(\tau J) = \exp\left(\frac{\tau}{2} J_q\right) \exp(\tau J_p) \exp\left(\frac{\tau}{2} J_q\right) + O(\tau^3)$$

$$\exp\left(\frac{\tau}{2} J_q\right) \exp(\tau J_p) \exp\left(\frac{\tau}{2} J_q\right) = \left(I + \frac{\tau}{2} J_q\right) (I + \tau J_p) \left(I + \frac{\tau}{2} J_q\right)$$

$$J_q^2 = 0, \quad J_p^2 = 0 \quad \leftarrow \text{冪ゼロ}$$

# Symplectic integrator と他の数値積分法

$$\exp(\tau J) = \exp[\tau(A + B)] = \dots \quad J = A + B$$

1次近似

$$\exp[\tau(A + B)] = \exp(\tau A) \exp(\tau B) + O(\tau^2)$$

2次近似

$$\exp[\tau(A + B)] = \exp\left(\frac{\tau}{2}A\right) \exp(\tau B) \exp\left(\frac{\tau}{2}A\right) + O(\tau^3)$$

$$A^2 = 0, \quad B^2 = 0$$

1次近似

$$\exp[\tau(A + B)] = (I + \tau A)(I + \tau B) + O(\tau^2)$$

2次近似

$$\exp[\tau(A + B)] = \left(I + \frac{\tau}{2}A\right) (I + \tau B) \left(I + \frac{\tau}{2}A\right) + O(\tau^3)$$

$$\exp(\tau J) = \underline{I + \tau J} + \frac{\tau^2}{2} J^2 + \frac{\tau^3}{3!} J^3 + \frac{\tau^4}{4!} J^4 + \dots$$

オイラー法  
修正オイラー法  
ルンゲクッタ法

# Symplectic integrator は構造保存

## 真のハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2} (q^2 + p^2)$$

SIは構造保存：

- 位相空間の体積を（厳密に）保存する
- 影のハミルトニアンを（厳密に）保存する

## Note ! :

- SIの影のハミルトニアンには時間刻み幅  $\tau$  が含まれる。  
→ 2つの欠点：
- ・ 時間刻み幅を積分している途中で変化させると影のハミルトニアンの保存が保障できなくなる。
  - ・ 等エネルギー曲線が「楕円」から「双曲線」に変化するときに不安定化する。

## 影のハミルトニアン (Shadow Hamiltonian)

$$\tilde{H}_1 = \frac{1}{2} (q^2 - \tau qp + p^2)$$
$$\tilde{H}_2 = \frac{1}{2} \left[ \left( 1 - \frac{\tau^2}{4} \right) q^2 + p^2 \right]$$

H. Kobayashi, "Anomaly in symplectic integrator,"  
Phys. Lett. A 371 (2007) 360--362 .

\* 1次近似の場合と2次近似の場合

# 5 : Maxwell方程式の実装について

Maxwell方程式（真空中）：

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{E} &= \frac{\rho}{\epsilon_0} \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \\ \nabla \times \mathbf{B} &= \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \end{aligned}$$

$$\mu_0 \epsilon_0 = 1/c^2$$

$\mathbf{E}$ と $\mathbf{B}$ をカノニカル共役変数ペアとする  
ハミルトン方程式に見える。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= c^2 \nabla \times \mathbf{B} - \frac{\mathbf{J}}{\epsilon_0} \\ \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} &= -\nabla \times \mathbf{E} \end{aligned}$$

いずれの場合も  
SIが有効

$\mathbf{A}$ と $\mathbf{E}$ をカノニカル共役変数ペアとする  
ハミルトン方程式に見える。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} &= -\mathbf{E} \\ \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} &= \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} - \mu_0 \mathbf{J} \end{aligned}$$

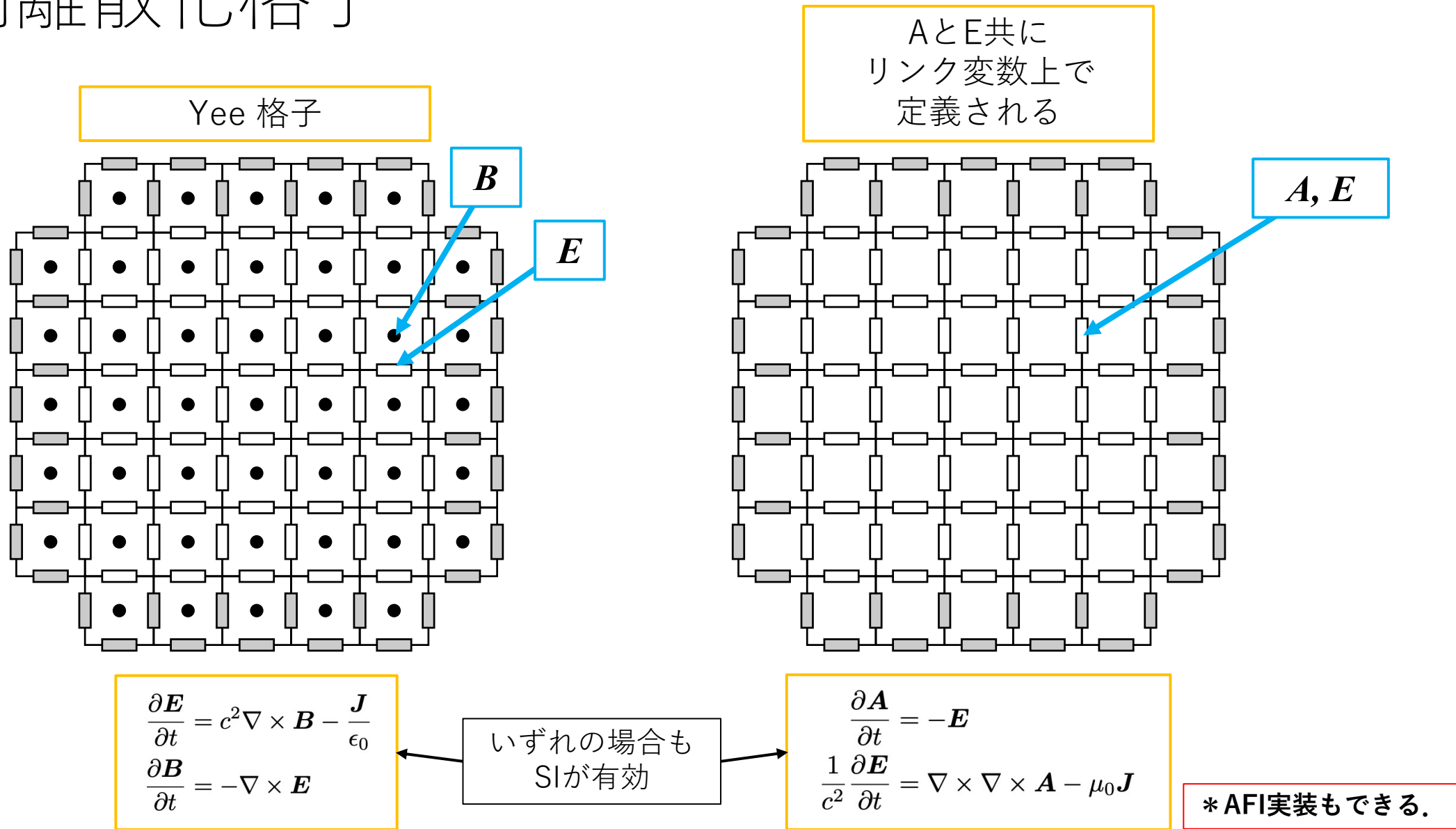
Weylゲージ： $\phi \equiv 0$

スカラーポテンシャル： $\phi$   
ベクトルポテンシャル： $\mathbf{A}$

Schrödinger方程式は  
 $\phi$ と $\mathbf{A}$ を含む。

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\nabla \phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \\ \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A} \end{aligned}$$

# 空間離散化格子



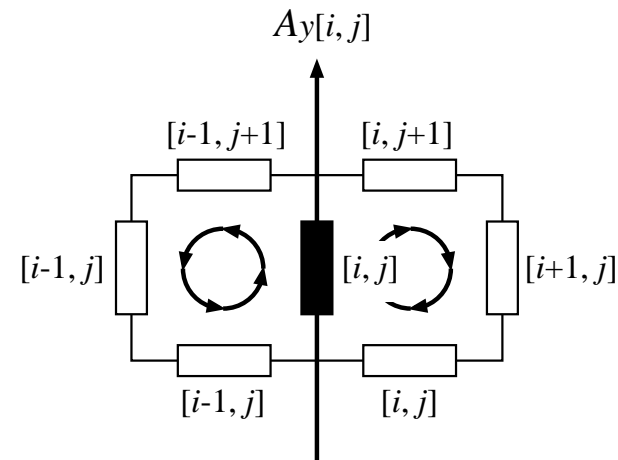
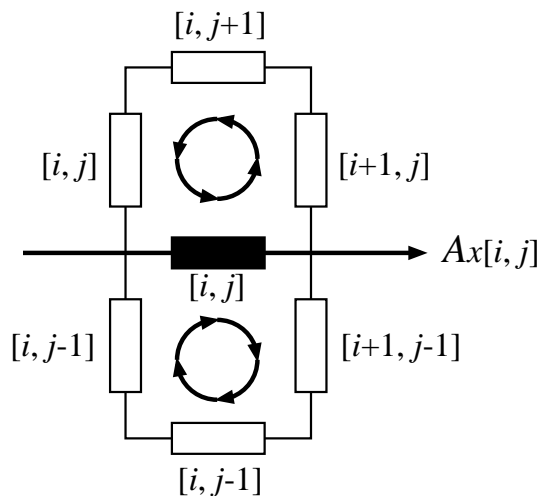


細かい話：  
rot rot の実装

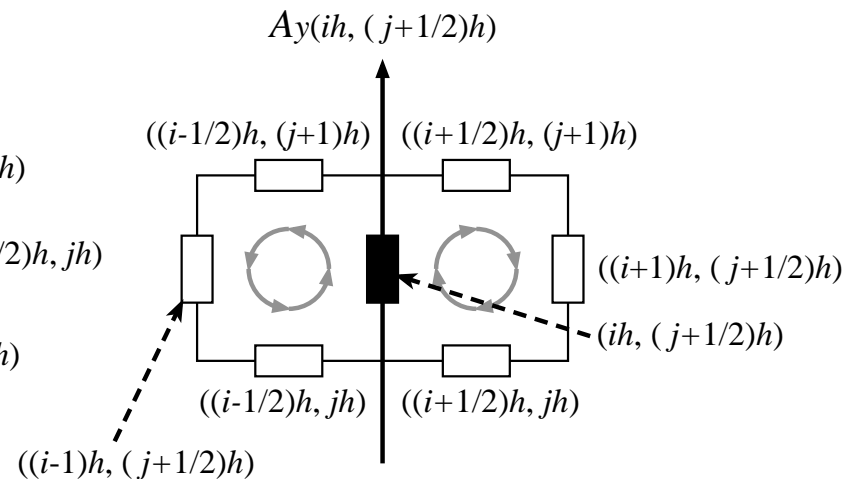
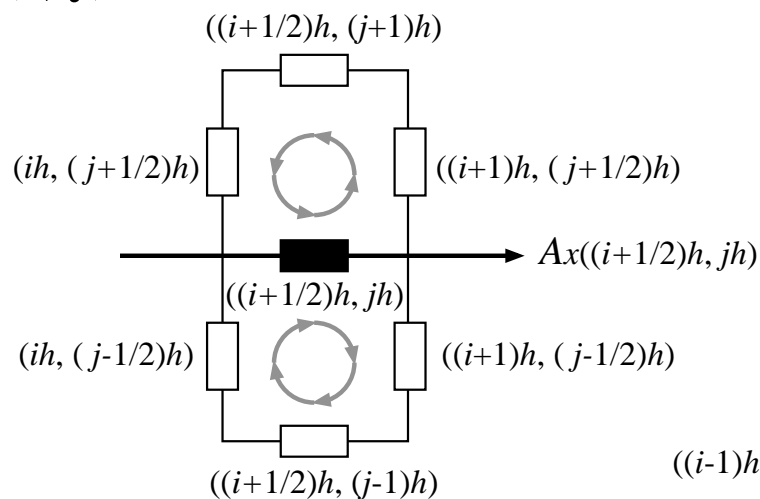
$$\nabla \times \nabla \times A$$

「8の字差分」：  
リンク変数を「8の字掛け算」する。

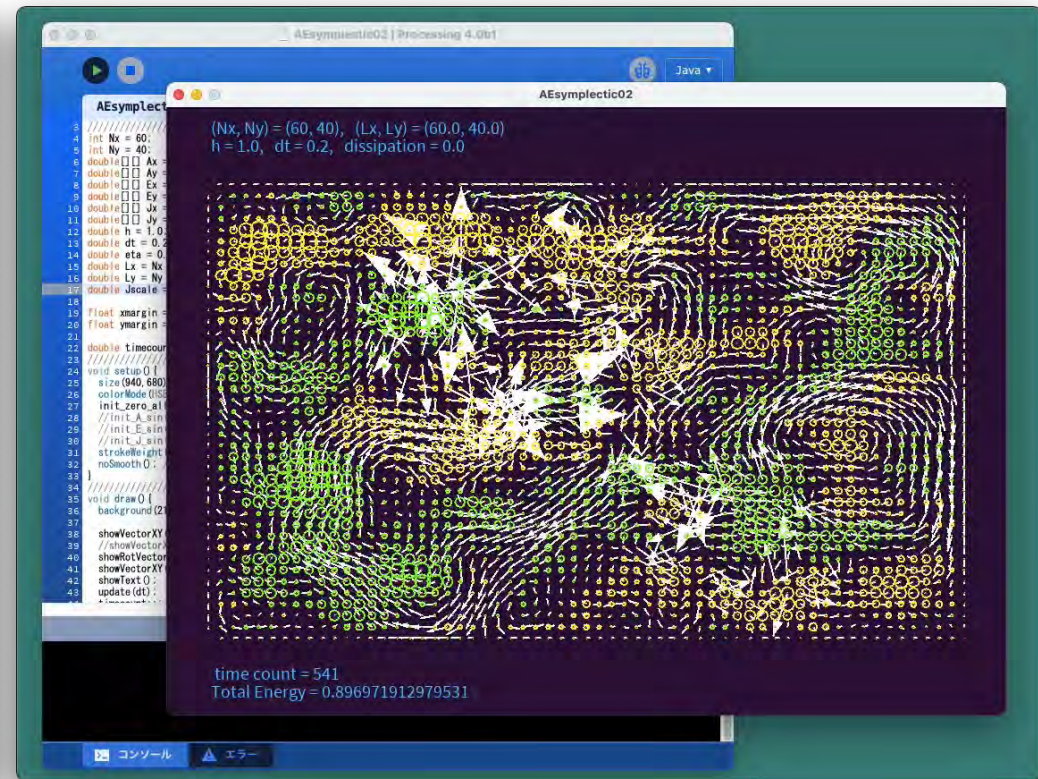
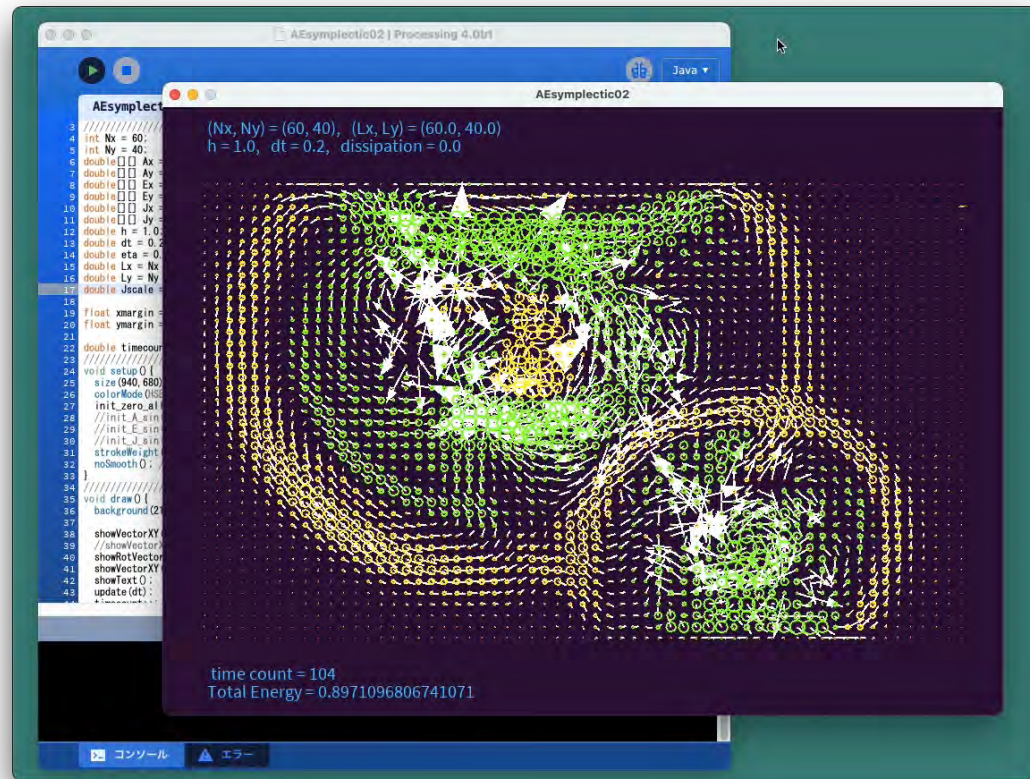
[index, index]



(x, y)



# A-E方程式ベースのSIによる数値シミュレーション例



\* AFI実装もできる。

# Aに関する緩和方程式

Maxwell方程式（真空中）：

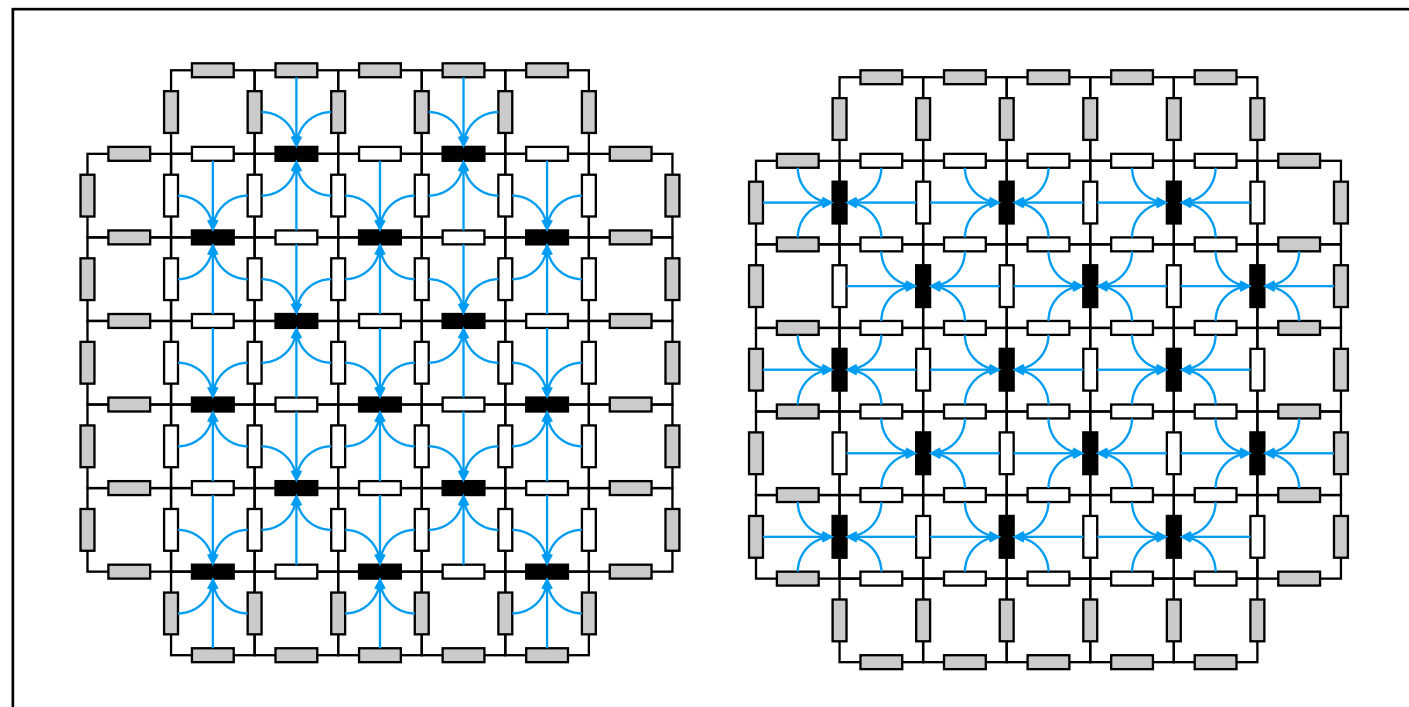
$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$$

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} \ll 1 \quad \begin{aligned} \mathbf{J} &= \sigma \mathbf{E} \\ \mathbf{J} &= g \text{Im}[\bar{\psi}(\nabla - g\mathbf{A})\psi] \end{aligned}$$



$$\tau \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\nabla \times \nabla \times \mathbf{A} + \mu_0 \mathbf{J}$$

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

AFIが有効

## 6 : Schrödinger方程式の実装について

(改めて) AFI とは

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_q & W_q \\ W_p & A_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

常微分方程式

時間に関する  
離散化

$$\exp \left[ \tau \begin{pmatrix} A_q & W_q \\ O & O \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} \exp(\tau A_q) & A_q^{-1}(\exp(\tau A_q) - I)W_q \\ O & I \end{pmatrix}$$
$$\exp \left[ \tau \begin{pmatrix} O & O \\ W_p & A_p \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} I & O \\ A_p^{-1}(\exp(\tau A_p) - I)W_p & \exp(\tau A_p) \end{pmatrix}$$

## Schrödinger方程式

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2} (\nabla - ig\mathbf{A})^2 \psi + V\psi$$

偏微分方程式

空間に関する  
離散化

$$i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_q & W \\ W^\dagger & A_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

(多次元) 常微分方程式

時間に関する  
離散化

$$A_q^\dagger = A_q \quad A_p^\dagger = A_p \quad WW^\dagger = I$$

$$\exp \left[ -i\tau \begin{pmatrix} A_q & W \\ O & O \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} \exp(-i\tau A_q) & A_q^{-1}(\exp(-i\tau A_q) - I)W \\ O & I \end{pmatrix} \equiv T_q(\tau)$$

$$\exp \left[ -i\tau \begin{pmatrix} O & O \\ W^\dagger & A_p \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} I & O \\ A_p^{-1}(\exp(-i\tau A_p) - I)W^\dagger & \exp(-i\tau A_p) \end{pmatrix} \equiv T_p(\tau)$$



## Schrödinger方程式におけるエネルギー保存

$$E(t) = (q^*(t) \ p^*(t)) \begin{pmatrix} A_q & W \\ W^\dagger & A_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} q(t + \tau) \\ p(t) \end{pmatrix} = T_q(\tau) \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} q(t) \\ p(t + \tau) \end{pmatrix} = T_p(\tau) \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix}$$

ハミルトニアン行列

$$H \equiv \begin{pmatrix} A_q & W \\ W^\dagger & A_p \end{pmatrix}$$

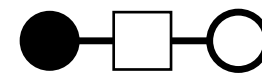
エネルギーが厳密に保存される！

$$T_q(\tau)^\dagger H T_q(\tau) = H \quad T_p(\tau)^\dagger H T_p(\tau) = H$$

$$E(t + \tau) = E(t)$$

\* AFI論文2020ですでに示した。

## 2 格子点モデル (\*研究のためのツール)



線形シュレディンガー方程式

$$i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_q & w \\ w^* & \alpha_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad \alpha_q, \alpha_p \in \mathbf{R}, w \in \mathbf{C}$$

$$T_q(\theta) \equiv \begin{pmatrix} e^{i\theta} & \frac{w}{\alpha_q}(e^{i\theta} - 1) \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = T_q(\theta) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

$$T_p(\phi) \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{w^*}{\alpha_p}(e^{i\phi} - 1) & e^{i\phi} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = T_p(\phi) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

## エネルギー

$$\begin{aligned} E(q, p) &= (q^* \ p^*) \begin{pmatrix} \alpha_q & w \\ w^* & \alpha_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \\ &= \alpha_q |q|^2 + \alpha_p |p|^2 + wq^*p + w^*qp^* \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = T_q(\theta) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = T_p(\phi) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

$$H \equiv \begin{pmatrix} \alpha_q & w \\ w^* & \alpha_p \end{pmatrix}$$

$$E(q', p') = E(q, p) \iff T_q^\dagger H T_q = H, \quad T_p^\dagger H T_p = H$$

## \* Grayら(1996)の方法：波動関数を実部と虚部に分割

$$\psi = q + ip$$

S. K. Gray and D. E. Manolopoulos, "Symplectic integrators tailored to the time-dependent Schrodinger equation," J. Chem. Phys. **104** (1996) 7099--7112.

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} O & W \\ -W & O \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad W = W^T$$

$$T_q(\tau) \equiv \begin{pmatrix} I & \tau W \\ O & I \end{pmatrix} \quad T_p(\tau) \equiv \begin{pmatrix} I & 0 \\ -\tau W & I \end{pmatrix}$$

Symplectic  
integrator

ゲージ場が入るとここが回転行列になる

## 7 : 非線形の場合でも構造保存するAFI実装について

非線形シュレディンガー方程式  
(TD Gross-Pitaevskii 方程式)

$$i \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{1}{2}(\nabla - ig\mathbf{A})^2 \psi + \alpha \psi + \beta |\psi|^2 \psi$$

$$i \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_q + \beta |q|^2 & w \\ w^* & \alpha_p + \beta |p|^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad \alpha_q, \alpha_p, \beta \in \mathbf{R}, w \in \mathbf{C}$$

$$H(q, p) \equiv \begin{pmatrix} \alpha_q + \frac{\beta}{2} |q|^2 & w \\ w^* & \alpha_p + \frac{\beta}{2} |p|^2 \end{pmatrix}$$

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

本来はこれ：真のハミルトニアン

$$= \alpha_q |q|^2 + \alpha_p |p|^2 + w q^* p + w^* q p^* + \frac{\beta}{2} |q|^4 + \frac{\beta}{2} |p|^4$$

I'm sorry.

I'm sorry.

**Note!** 時間刻み幅が含まれていない

- 時間刻み幅を可変にしても構造保存する！
- 無条件安定性を意味する！

影のハミルトニアン



時間推進行列  
(線形的非線形変換?!)

I'm sorry.

$$\tilde{E}(q', p') = \tilde{E}(q, p) \iff \tilde{T}_q^\dagger \tilde{H}(q', p') \tilde{T}_q = \tilde{H}(q, p), \tilde{T}_p^\dagger \tilde{H}(q', p') \tilde{T}_p = \tilde{H}(q, p)$$

2021年9月末ごろ発見。  
10月1日に数値的に確認。  
論文投稿準備中。

2次元系ではこのように実装すれば  
影のハミルトニアンが一定に保たれる。

I'm sorry.

AFI論文2020では、  
これ

$$\frac{w(e^{i\theta} - 1)}{\alpha_q + \beta |(w_{\text{east}} \psi_{\text{east}} + w_{\text{west}} \psi_{\text{west}} + w_{\text{south}} \psi_{\text{south}} + w_{\text{north}} \psi_{\text{north}}) / 4|^2}$$

2次元系ではこのように実装すれば影のハミルトニアンが一定に保たれる。

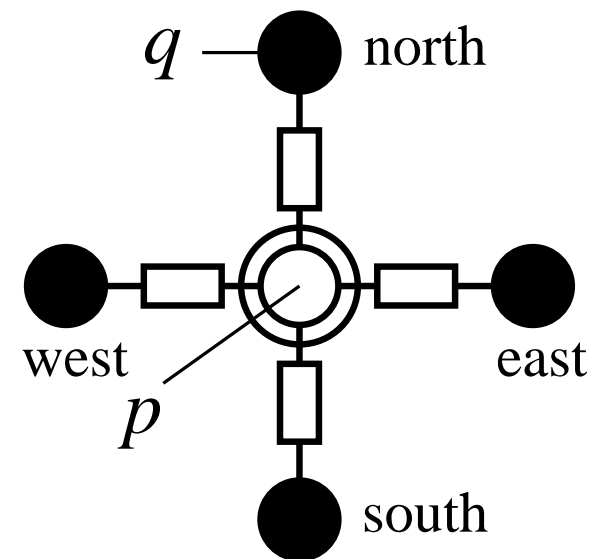
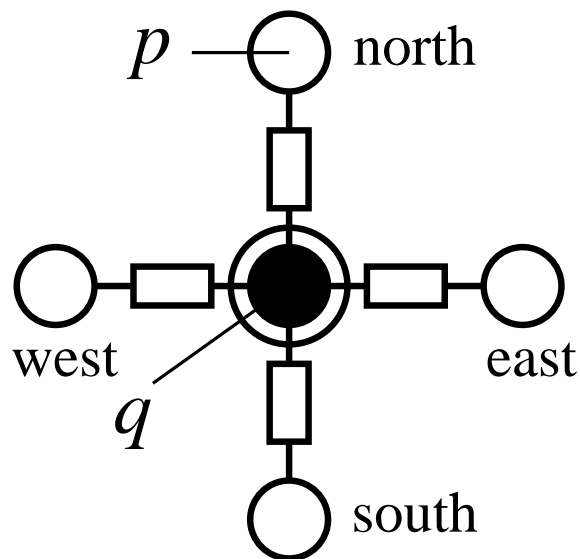
I'm sorry.

AFI論文2020では、これ。

$$\frac{w(e^{i\theta} - 1)}{\alpha_q + \beta |(w_{\text{east}}\psi_{\text{east}} + w_{\text{west}}\psi_{\text{west}} + w_{\text{south}}\psi_{\text{south}} + w_{\text{north}}\psi_{\text{north}})/4|^2}$$

本来は separability を成り立たせるための方便だった。

結果的に「線形的非線形変換」が構成され、なおかつ影のハミルトニアンで規定される影のエネルギー曲面上に制約される変換群が構成された。

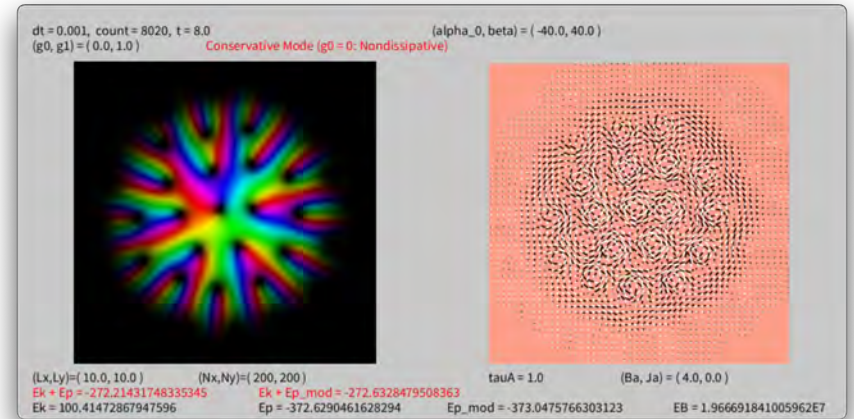


# TDGP方程式ベースのデモンストレーション(1/2)

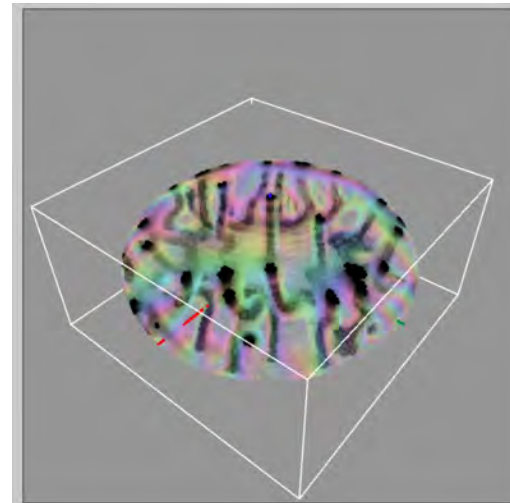
まずは時定数の実部に小さな値をセット.

ある程度エネルギーが低下して量子渦が発生したら,  
時定数の実部を完全にゼロにする.

時定数が純虚数になると影のエネルギーは厳密に保存される  
(数値的にはマシンイプシロンオーダーの変動).

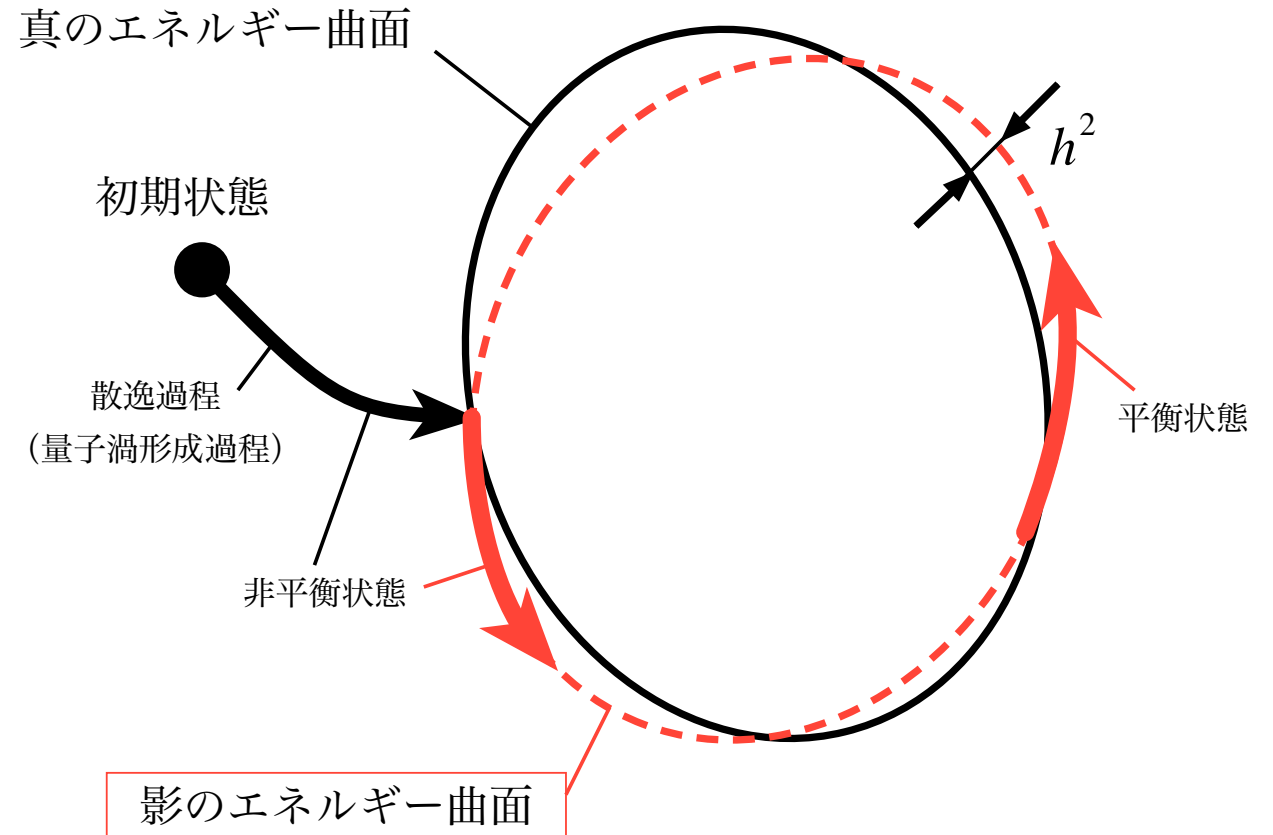
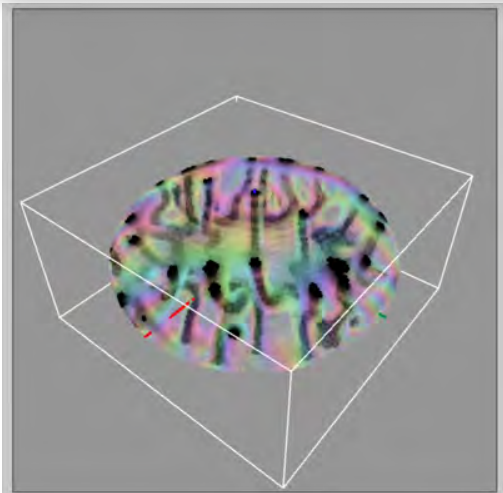
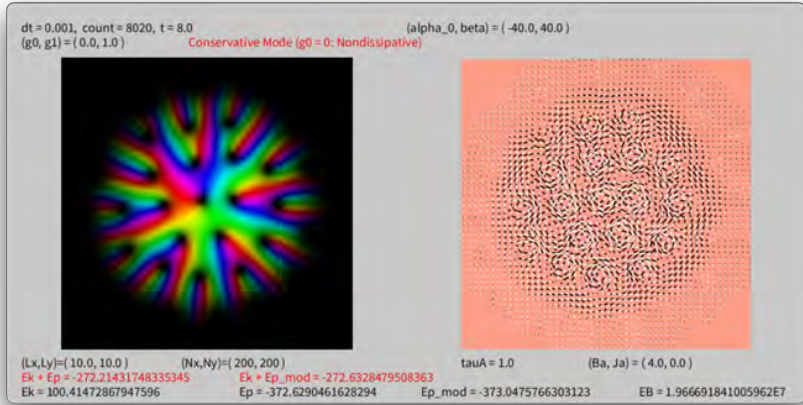


<https://www.youtube.com/watch?v=1IW6twBvmvE>



<https://www.youtube.com/watch?v=ePjuYCKy3Ns>

# TDGP方程式ベースのデモンストレーション(2/2)



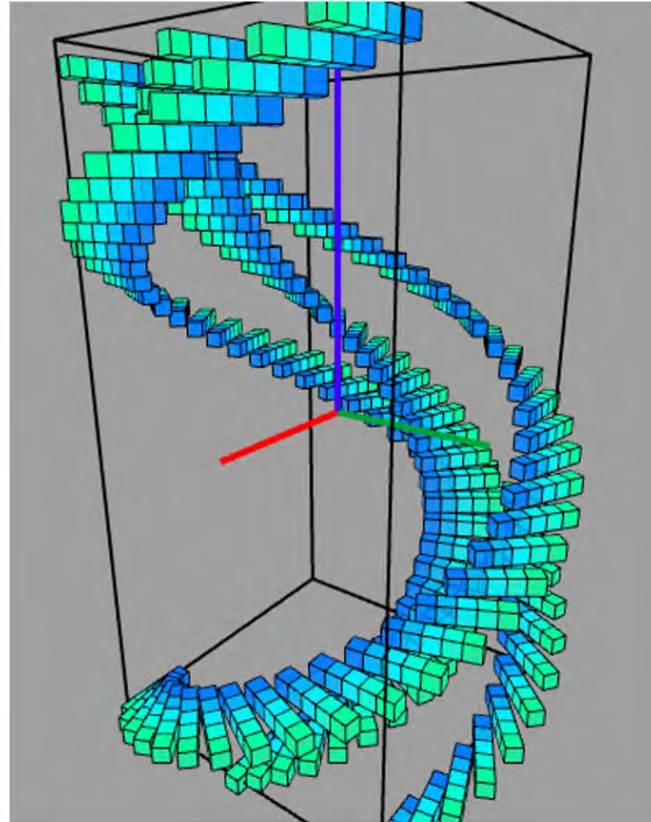
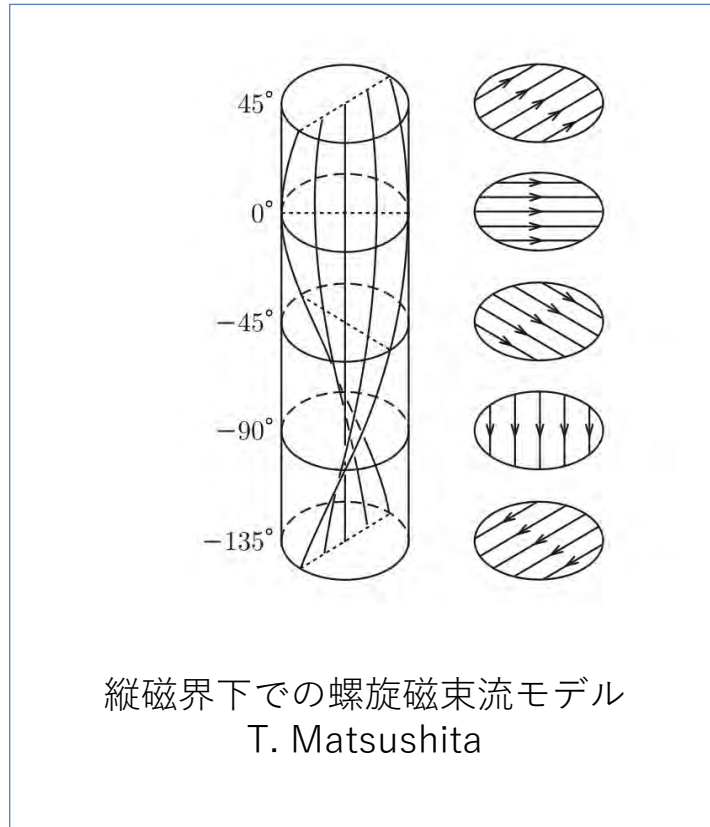
ダイナミクスと統計熱力学をスムーズにつなぐ発想だった Fermi-Pasta-Ulam 的研究が可能か？

## 8 : まとめ → 課題

- ベクトル場の時間発展方程式 (TDBdG方程式) へAFIを適用できた.
    - 実は古典波動方程式にAFIを適用する方法が最近わかったので実行する.  
ベクトル場へのAFI適用 (TDBdG方程式の話) が参考になった(^^).
    - Maxwell方程式へAFIを適用する (\*小田部先生との科研費プロジェクトのはず(^^)).
  - TDGPタイプの非線形方程式で構造保存AFIが実装できた(^^)!
    - 一般の非線形の場合の構造保存AFIの実装方法を確立する.
    - ダイナミクスと統計熱力学をつなぐ数値的研究 (Fermi-Pasta-Ulam的な) を行う.  
(時間反転実験して不可逆性と非線形性との関係を調べてみる, など)
    - 散逸系 (拡散方程式, TDGL方程式) の時間発展方程式における  
「構造保存」 : エネルギーの単調減少性に関する理論的解析を行う.
- \* ライバル? : 離散変分導関数法 (“Discrete Variational Derivative Method,” D. Furihata and T. Matsuo, CRC Press, 2010)



# One more thing : 縦磁場(1/2)



<https://www.youtube.com/watch?v=lc6e28cIF4Y>

# One more thing : 縦磁場(2/2)

- 非線形の部分を修正したAFIで数値実験  
(\* 動画 2つ)
- これまで得られた結果と変わりなかった.
- Maxwell方程式の数値積分の部分も含めて  
完全なAFIを完成させたい.

