

Affine Integrator (AFI) の考え方

有明高専 松野哲也

(量子化磁束動力学シミュレーション研究グループ 夏のセミナー 2020 資料 Ver.3)

1 はじめに：本資料の目的

この資料では、TDGL 方程式を効率的に数値的に解くために新たに提案された陽的数値積分法 Affine Integrator (AFI) の基本的な考え方をわかりやすく解説します。

「AFI 論文」: Tetsuya Matsuno, Edmund Soji Otabe, and Yasunori 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)

は喜ばしいことに JPSJ Papers of Editors' Choice として受賞しました。共著者の小田部先生、馬渡様との共同研究成果ですが、量子化磁束動力学シミュレーション研究グループにおける皆様とのディスカッションは研究を進める上で大きな助けとなりました。この場を借りて、小田部先生、馬渡様をはじめとする研究グループの皆様へ感謝の意を伝えさせていただきます。なお、この AFI 論文は来年 (2021) の 5 月ぐらいまでは JPSJ のサイト

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

から無登録で無料でダウンロードできるはずですが、本資料が上記論文を読んでいただいて実装を試みていただく際のご参考としていただければ幸いです。

ちなみに、次節以降からは「である調」です。

1.1 本資料の構成

第 1 章でウォーミングアップとして symplectic integrator (SI) の解説を行う。実は AFI は SI の考え方を大いに参考にしている。調和振動子を例題として説明する。第 2 章では、散逸のある調和振動子を例題として、SI の考え方で数値積分スキームを構成する。第 3 章では、散逸項 (空気抵抗) のある調和振動子モデルに対して SI の考え方で数値積分スキームを構成する。第 4 章では TDGL 方程式を意識した簡単なモデルを例題として AFI のエッセンスを示す。第 5 章では、ベクトルポテンシャルを導入する。ゲージ場を含む方程式 (TDGL 方程式, 回転系の TDGP 方程式) に対する AFI の適用につながる基本的考え方が示される。第 6 章では、Lie-Trotter-Suzuki (LTS) 分解に関する簡単な解説を行う。実は、最近発表された「最適化された LTS 分解」に関する論文のおかげで AFI の 4 次のオーダーのスキームを Runge-Kutta (4 次) に対して「完全勝利」する形で組み合わせることができたことを解説する。第 7 章では AFI に関していくつかの補足説明を行う。

の separability のおかげで exact な表現を容易に得ることができた。具体的に言うと、separability に由来する冪ゼロ性のおかげで指数関数演算子のテイラー展開による無限級数が有限項で打ち切られるわけである。

指数関数演算子の行列表現は次の通りである：

$$\exp\left(\tau p \frac{\partial}{\partial q}\right) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \tau \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (11)$$

$$\exp\left(\tau(-Kq) \frac{\partial}{\partial p}\right) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\tau K & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (12)$$

これら2つの表現行列の行列式はいずれも1である。すなわち、時間発展において位相空間の体積要素は厳密に保存される。このことは、SIにおいて保存量

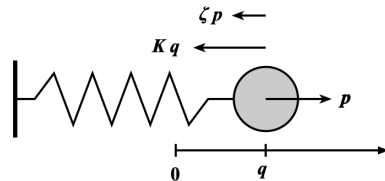
$$E = \frac{p^2}{2} + \frac{K}{2}q^2 \quad (13)$$

の振る舞いが良好（ノンドリフト特性）である。と関係していることが知られている。

ノンドリフト特性とは、 E は保存せず多少ゆらいでしまうが、一方向への単調な増加あるいは減少の傾向（ドリフト）が無いという良い性質のことである。保存系における長時間のシミュレーションにおいて望まれる性質である。

3 散逸がある場合のSI的数値積分法の構成

例として、散逸（空気抵抗）がある調和振動子を考える：

$$\begin{cases} \frac{dq}{dt} = p \\ \frac{dp}{dt} = -\zeta p - Kq \end{cases} \quad (14)$$


上記運動方程式は次のように書き直すことができる：

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \left(p \frac{\partial}{\partial q} + (-\zeta p - Kq) \frac{\partial}{\partial p} \right) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (15)$$

このとき指数関数演算子の正確な表現は次の通りである：

$$\exp\left(\tau p \frac{\partial}{\partial q}\right) q = q + \tau p \quad (16)$$

$$\exp\left(\tau p \frac{\partial}{\partial q}\right) p = p \quad (17)$$

$$\exp\left(\tau(-\zeta p - Kq) \frac{\partial}{\partial p}\right) q = q \quad (18)$$

$$\exp\left(\tau(-\zeta p - Kq) \frac{\partial}{\partial p}\right) p = e^{-\zeta\tau} p - \frac{K}{\zeta}(1 - e^{-\zeta\tau})q \quad (19)$$

散逸項がある場合は、保存系では成り立っていた separability が式 (15) 右辺の $\partial/\partial p$ の係数において成り立っていない。したがって指数関数に対応する無限級数が有限項で打ち切られない。しかしながら、この場合は式 (19) のような形で簡潔に表現することができる。また、指数関数演算子の正確な行列表現は次のように与えられる：

$$\exp\left(\tau p \frac{\partial}{\partial q}\right) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \tau \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (20)$$

$$\exp\left(\tau(-\zeta p - Kq) \frac{\partial}{\partial p}\right) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -K(1 - e^{-\zeta\tau})/\zeta & e^{-\zeta\tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (21)$$

ここで、

$$\hat{Q} \equiv p \frac{\partial}{\partial q}, \quad \hat{P} \equiv -\zeta p - Kq \frac{\partial}{\partial p} \quad (22)$$

とにおいて、指数関数演算子 $\exp(\tau(\hat{Q} + \hat{P}))$ に対して前章の保存系の場合と同様 LTS 分解 [1] を適用する：

$$\exp(\tau(\hat{Q} + \hat{P})) = \exp(\tau\hat{Q}) \exp(\tau\hat{P}) + O(\tau^2) \quad (23)$$

$$\exp(\tau(\hat{Q} + \hat{P})) = \exp((\tau/2)\hat{Q}) \exp(\tau\hat{P}) \exp((\tau/2)\hat{Q}) + O(\tau^3) \quad (24)$$

数値積分スキームとしては、保存系の場合と同様に、分解された指数関数演算子を交互に状態ベクトルに適用することになる。

ところで、この例の場合の散逸系の SI 的構成は exponential integrator[2] の特殊ケースと言えるかもしれないが、EI の本質は線形部分と非線形部分を分けて分解し、非線形部分を「外力」として畳み込み積分の近似の次数を上げていく考え方に基づく。

ところで、この例の場合、極限 $\zeta \rightarrow 0$ で、散逸系の SI 的構成は（保存系の）SI と一致する。

4 Affine Integrator(AFI)

ここで AFI を説明するために取り扱う簡単な例題は、偏微分方程式 (Time-Dependent Ginzburg-Landau: TDGL 方程式)

$$\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\nabla - i\mathbf{A})^2 \psi - \alpha \psi - \beta |\psi|^2 \psi \quad (25)$$

を空間に関して離散化して得られる連立常微分方程式をイメージして作った。具体的には次の微分方程式系を考えることにする：

$$\begin{cases} \frac{dq}{dt} = -\alpha q - \beta |q|^2 q + K_q(p - q) \\ \frac{dp}{dt} = -\alpha p - \beta |p|^2 p + K_p(q - p) \end{cases} \quad (26) \quad \begin{array}{c} \mathbf{q} \quad \mathbf{p} \\ \bullet \text{---} \circ \end{array}$$

ここで、 q と p の標本化点は物理的に近い距離にある、と考え $q \simeq p$ であるとするこ
とによって、上記微分方程式を次のように近似する：

$$\begin{cases} \frac{dq}{dt} = -\alpha q - \beta|p|^2 q + K_q(p - q) \\ \frac{dp}{dt} = -\alpha p - \beta|q|^2 p + K_p(q - p) \end{cases} \quad (27)$$

ここで、非線形項を次のように近似した：

$$-\beta|q|^2 q \longrightarrow -\beta|p|^2 q, \quad -\beta|p|^2 p \longrightarrow -\beta|q|^2 p \quad (28)$$

このような置き換え（近似）によって方程式 (27) は次のように表現できる：

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \left((-\zeta_q q + K_q p) \frac{\partial}{\partial q} + (-\zeta_p p + K_p q) \frac{\partial}{\partial p} \right) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (29)$$

ここで、

$$\zeta_q = K_q + \alpha + \beta|p|^2, \quad \zeta_p = K_p + \alpha + \beta|q|^2 \quad (30)$$

とおいた。

非線形項を式 (28) の様に近似したことによって、指数関数演算子の正確な（近似を
含まない）表現を容易に得ることができる：

$$\exp \left(\tau (-\zeta_q q + K_q p) \frac{\partial}{\partial q} \right) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-\zeta_q \tau} & K_q(1 - e^{-\zeta_q \tau})/\zeta_q \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (31)$$

$$\exp \left(\tau (-\zeta_p p + K_p q) \frac{\partial}{\partial p} \right) \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ K_p(1 - e^{-\zeta_p \tau})/\zeta_p & e^{-\zeta_p \tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (32)$$

以上で説明した数値積分スキーム構成の際のポイントは、

1. 空間微分項を「散逸項＋外力項」と解釈する。
2. 変数 q と p を空間的に隣り合った点からの標本値であると考えて、非線形項に部
分的に $q \simeq p$ であるとする近似を適用して非線形項を「線形化」する。

である。これらの考え方に基づいて SI 的に数値積分スキームを構成したものが AFI
(Affine Integrator) である。この数値積分スキームの名称は時間推進演算子の行列表現
がアフィン変換のそれであることに由来する。

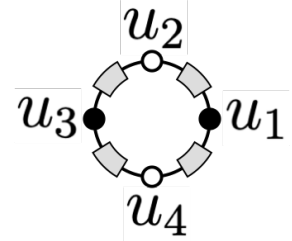
次章ではベクトルポテンシャルをリンク変数として導入する。実はベクトルポテン
シャルの導入によってこの例題における「バネ定数」 K_q と K_p が複素数になるだけで
ある、と考えることもできる。

5 ベクトルポテンシャルの導入

空間に関して離散化された TDGL 方程式をイメージした簡単な例題を取り扱う。ここではベクトルポテンシャルをリンク変数として導入する。リンク変数 $w_{ij} = \exp(i\theta_{ij})$ は従属変数 u の標本化点 i と標本化点 j の間において定義される。関係式 $w_{ij} = \bar{w}_{ji}$ であることに注意しておく。記号の上のバーは複素共役を表す。この関係式は $\theta_{ij} = -\theta_{ji}$ に由来する。つまりベクトルポテンシャルはベクトル量であり、空間における方向性（空間反転で符号反転）がリンク変数に反映されている。

ここで取り扱う基礎方程式として従属変数 u_1, u_2, u_3, u_4 が従う次の連立常微分方程式系を考える：

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{du_1}{dt} = -(2 + \alpha_1 + \beta_1|\tilde{u}_1|^2)u_1 + w_{12}u_2 + w_{14}u_4 \\ \frac{du_3}{dt} = -(2 + \alpha_3 + \beta_3|\tilde{u}_3|^2)u_3 + w_{32}u_2 + w_{34}u_4 \\ \frac{du_2}{dt} = -(2 + \alpha_2 + \beta_2|\tilde{u}_2|^2)u_2 + w_{21}u_1 + w_{23}u_3 \\ \frac{du_4}{dt} = -(2 + \alpha_4 + \beta_4|\tilde{u}_4|^2)u_4 + w_{41}u_1 + w_{43}u_3 \end{array} \right. \quad (33)$$



ただし、

$$\begin{aligned} \tilde{u}_1 &= (w_{12}u_2 + w_{14}u_4)/2, \\ \tilde{u}_3 &= (w_{32}u_2 + w_{34}u_4)/2, \\ \tilde{u}_2 &= (w_{21}u_1 + w_{23}u_3)/2, \\ \tilde{u}_4 &= (w_{41}u_1 + w_{43}u_3)/2 \end{aligned}$$

とおいた。

ここで式 (33) における w_{ij} および -2 を係数とする項は空間に関する 2 回微分（ラブラシアン）の差分近似（ここでは空間刻み幅を 1 とした）に由来する。詳細は第 7.4 節を参照されたい。また、推定値 \tilde{u}_i については第 7.5 節を参照されたい。

非線形項において、部分的に u_i そのものではなく、その値の推定値 \tilde{u}_i を用いる理由は非線形項を「線形化」するためである。同様な近似は前の章でも用いた。

ここで、

$$\zeta_i = n_i + \alpha_i + \beta_i|\tilde{u}_i|^2, \quad i = 1, \dots, N \quad (34)$$

とおく ($n_i = 2, i = 1, \dots, N; N = 4$)。すると基礎方程式 (33) は

$$\frac{du_i}{dt} = -\zeta_i u_i + \sum_{j \in J_i} w_{ij} u_j, \quad i = 1, \dots, N \quad (35)$$

と表される。ここで J_i は標本化点 i に隣接する標本化点のインデックスの集合である。したがって方程式 (33) は次のように表される：

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_3 \\ u_2 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\zeta_1 & 0 & w_{12} & w_{14} \\ 0 & -\zeta_3 & w_{32} & w_{34} \\ \bar{w}_{12} & \bar{w}_{32} & -\zeta_2 & 0 \\ \bar{w}_{14} & \bar{w}_{34} & 0 & -\zeta_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_3 \\ u_2 \\ u_4 \end{pmatrix} \quad (36)$$

ここで、「黒丸」上の標本化値と「白丸」上の標本化値をそれぞれベクトル \mathbf{q} と \mathbf{p} の成分として定義する。また関連パラメータをベクトル ζ_Q と ζ_P の成分として定義する：

$$\mathbf{q} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{p} = \begin{pmatrix} u_2 \\ u_4 \end{pmatrix}, \quad \zeta_Q = \begin{pmatrix} \zeta_1 \\ \zeta_3 \end{pmatrix}, \quad \zeta_P = \begin{pmatrix} \zeta_2 \\ \zeta_4 \end{pmatrix} \quad (37)$$

また、各種パラメータ、リンク変数に関して次のように行列を定義する：

$$D(-\zeta_Q) = \begin{pmatrix} -\zeta_1 & 0 \\ 0 & -\zeta_3 \end{pmatrix}, \quad D(-\zeta_P) = \begin{pmatrix} -\zeta_2 & 0 \\ 0 & -\zeta_4 \end{pmatrix}, \quad W = \begin{pmatrix} w_{12} & w_{14} \\ w_{32} & w_{34} \end{pmatrix} \quad (38)$$

すると方程式 (33) は次のようにも表される：

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D(-\zeta_Q) & W \\ W^\dagger & D(-\zeta_P) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (39)$$

ここで、 W^\dagger は \bar{W}^T (複素共役&転置) を意味する。これまでと同様にして、方程式 (39) は次のように表すこともできる：

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} &= \left((D(-\zeta_q)\mathbf{q} + W\mathbf{p}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} + (D(-\zeta_p)\mathbf{p} + W^\dagger\mathbf{q}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \\ &= (\hat{Q} + \hat{P}) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (40)$$

前章までと同様にして、指数関数演算子 $\exp(\tau\hat{Q})$ と $\exp(\tau\hat{P})$ の正確な行列表現を得ることができる：

$$\exp(\tau\hat{Q}) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D(\mathbf{a}_Q) & D(\mathbf{b}_Q)W \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (41)$$

$$\exp(\tau\hat{P}) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ D(\mathbf{b}_P)W^\dagger & D(\mathbf{a}_P) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (42)$$

ここで、

$$D(\mathbf{a}_Q) = \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_3 \end{pmatrix}, \quad D(\mathbf{a}_P) = \begin{pmatrix} a_2 & 0 \\ 0 & a_4 \end{pmatrix}, \quad D(\mathbf{b}_Q) = \begin{pmatrix} b_1 & 0 \\ 0 & b_3 \end{pmatrix}, \quad D(\mathbf{b}_P) = \begin{pmatrix} b_2 & 0 \\ 0 & b_4 \end{pmatrix} \quad (43)$$

および

$$a_i = \exp(-\zeta_i \tau), \quad b_i = (1 - a_i)/\zeta_i, \quad i = 1, \dots, N \quad (44)$$

とおいた。方程式 (41) および (42) の右辺に現れた行列は、アフィン変換と等価であることがわかる。

これまでと同様にして、演算子 \hat{Q} と演算子 \hat{P} に関する指数関数演算子を状態ベクトル $(\mathbf{q}, \mathbf{p})^T$ に交互に作用させていき状態を時間発展させていくことになる。

ここでは、標本化のための格子点の総数が 4 つの場合を取り扱ったが、一般的な標本化格子のための AFI の構成方法は同様である。

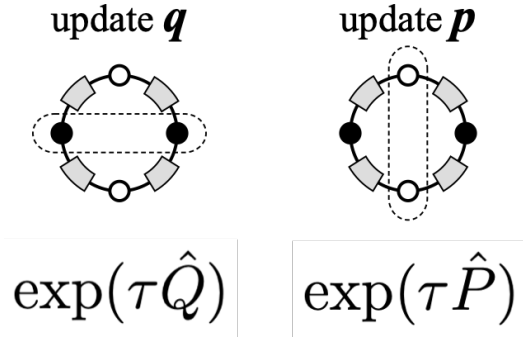


図 1 に 2 次元標本化格子の構造、およびそれに基づく 2 次元シミュレーションの例を示す。なお、「黒丸」と「白丸」を入れ替えて「z 方向」に積み上げて 3 次元格子を構成することによって 3 次元シミュレーションを実現することは容易である。

3 次元シミュレーションを含むシミュレーション動画については私の YouTube チャンネル：

<https://www.youtube.com/user/pftetsuyaGPU/videos>

を参照してください。たくさんの動画があります。比較的最近の動画は AFI を利用しています。

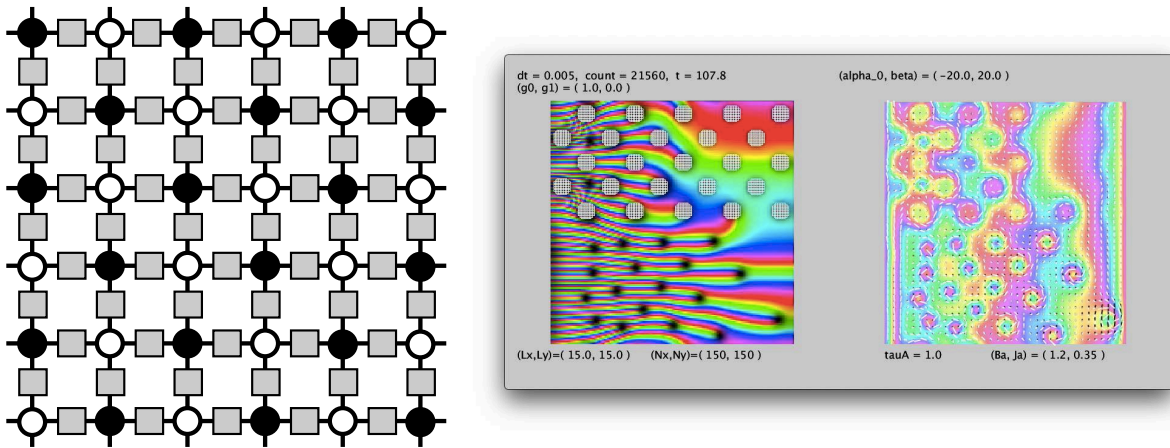


図 1: TDGL 方程式に基づくシミュレーションの例。左図：150 x 150 の 2 次元格子点において AFI を構成した。右図：左半面には巨視的波動関数（オーダーパラメータ）、右半面には磁場強度、電流場、電解場を示す。パラメータ α および β に空間依存性を持たせて常伝導ピンを実現した。なお、ここではベクトルポテンシャルの時間発展方程式と連立した方程式系を数値的に解いた。ベクトルポテンシャルについてはオイラー法を用いた。ベクトルポテンシャルの時間発展の時定数は巨視的波動関数（オーダーパラメータ）のその 10 倍程度の設定してあるので、ここではオイラー法が AFI の「足をひっぱる」ことはない。将来的にはベクトルポテンシャルの時間発展方程式にも AFI を適用したい（実は今回当たった科研費のテーマ）。

6 Lie-Trotter-Suzuki 分解について

ここでは、指数関数演算子

$$\exp(\tau(\hat{Q} + \hat{P})) \quad (45)$$

の Lie-Trotter-Suzuki(LTS) 分解について考える。一般に、演算子 \hat{Q} と \hat{P} は非可換である。実際、前章までに出てきた演算子 \hat{Q} と \hat{P} は非可換である。したがって、一般的な分解においては

$$\exp(\tau(\hat{Q} + \hat{P})) = \exp(\tau\hat{Q}) \exp(\tau\hat{P}) + O(\tau^2) \quad (46)$$

のように、微小量（時間刻み幅） τ の n 次のオーダーの誤差が含まれる。AFI 論文におけるシミュレーションは 2 次のオーダーの分解として

$$\exp(\tau(\hat{Q} + \hat{P})) = \exp((1/2)\tau\hat{Q}) \exp(\tau\hat{P}) \exp((1/2)\tau\hat{Q}) + O(\tau^3) \quad (47)$$

が用いられた。しかし近年、2 次のオーダーやさらに高次のオーダーの最適な LTS 分解が提案された [3]。

ここでは 1 次元量子拡散方程式

$$\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial x} - iA_x \right)^2 \psi \quad (48)$$

に基づく数値シミュレーションにおける計算精度と LTS 分解の次数に関して考察する。複素時定数 γ の実部はゼロ以上であるとする。方程式 (48) は 1 次元 TDGL 方程式

$$\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial x} - iA_x \right)^2 \psi - \alpha \psi - \beta |\psi|^2 \psi \quad (49)$$

において $\alpha = \beta = 0$ とおいたものである。このとき、AFI の安定性は LTS 分解を行った時の係数の符号で定まる。すなわち、このとき LTS 分解係数が全て正ならば無条件安定となる。もしも負の係数が含まれると無条件ではなくなり、条件付き安定となる。

もしも $\alpha \neq 0$ あるいは $\beta \neq 0$ のときは、AFI の安定性はこれらのパラメータおよび LTS 分解係数のパラメータの値に依存する。

6.1 2 次のオーダーの LTS 分解

先に示した 2 次のオーダーの分解式 (47) :

$$\exp(\tau(A + B)) = \exp((1/2)\tau A) \exp(\tau B) \exp((1/2)\tau A) + O(\tau^3) \quad (\text{記号を変えて再掲}) \quad (50)$$

は、よく用いられるが [1]、最近さらに良い精度の（最適化された）2 次の分解式が見出された [3] :

$$\begin{aligned} \exp(\tau(A + B)) &= \exp(a_1\tau A) \exp(b_1\tau B) \exp(a_2\tau A) \exp(b_1\tau B) \exp(a_1\tau A) + O(\tau^3), \\ a_1 &= \frac{1}{6}(3 - \sqrt{3}), \quad a_2 = 1 - 2a_1, \quad b_1 = \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (51)$$

ちなみに、LTS 分解における係数は2次までは、いずれの展開においても全て正である。TDGL 方程式において $\beta = 0$ のときには、条件

$$\frac{n}{2} + \alpha h^2 \geq 0 \quad (52)$$

が成り立つ時 AFI は無条件安定であることが解析的に示されている (AFI 論文参照)。ここで、 n は隣接標本化点の数、 h は空間刻み幅である。また、 $\beta > 0$ のときには、

$$\frac{n}{2} + (\alpha + \beta |\psi_{\max}(t)|^2) h^2 \geq 0, \text{ for all } t \quad (53)$$

であるときに (条件付き) 安定であることが示されている。ここで、 $|\psi_{\max}|$ は時刻 t におけるオーダーパラメータの最大絶対値 (シミュレーション領域にわたった) である。

安定性条件を表している式 (52) および (53) は、AFI の安定性が高いことを示唆している。ここで、安定性条件式 (52) および (53) は2次の LTS 分解のとき、すなわち LTS 分解係数が全て正であることが想定されている条件式であることに注意しておく。

6.2 4 次のオーダーの LTS 分解

最適化された4次精度の Lie-Trotter-Suzuki 分解 [3] は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} \exp(\tau(A + B)) &= \exp(a_1\tau A) \exp(b_1\tau B) \exp(a_2\tau A) \exp(b_2\tau B) \exp(a_3\tau A) \exp(b_3\tau B) \times \\ &\quad \exp(a_3\tau A) \exp(b_2\tau B) \exp(a_2\tau A) \exp(b_1\tau B) \exp(a_1\tau A) + O(\tau^5), \\ a_1 &= 0.095848502741203681182, \\ a_2 &= -0.078111158921637922695, \\ a_3 &= \frac{1}{2} - (a_1 + a_2), \quad b_1 = 0.42652466131587616168, \\ b_2 &= -0.12039526945509726545, \quad b_3 = 1 - 2(b_1 + b_2) \end{aligned}$$

4 次精度の展開においては、2 次の場合とは異なり、負の値の係数が存在する。この負の係数の存在によって、無条件安定ではなくなってしまう。しかしながら、1 次元の量子拡散方程式において数値的に安定性を確認したところ、AFI-4 の安定限界は CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) 限界線 ($\tau = h^2$) の5倍程度広い。したがって、実用上問題は生じない。

また、この分解を用いるとき、(4 次の) Runge-Kutta 法よりも計算精度が高いことを確認し、先の日本物理学会秋季大会において発表した。図 2 に結果を示す。

4 次の AFI (AFI4) と (4 次の) Runge-Kutta 法 (RK4) における 1 タイムステップあたりの計算量を比較したところほぼ同等であることがわかった (AFI 論文参照)。AFI は RK よりも数倍大きな時間刻み幅でも安定であり 1 パーセント以内の誤差で数値積分できることが図 2 から読み取れる。

また、必要とされる記憶領域については、AFI4 は従属変数に関してシミュレーション領域 1 面分であることに對し、RK4 は 2 面以上を必要とする。

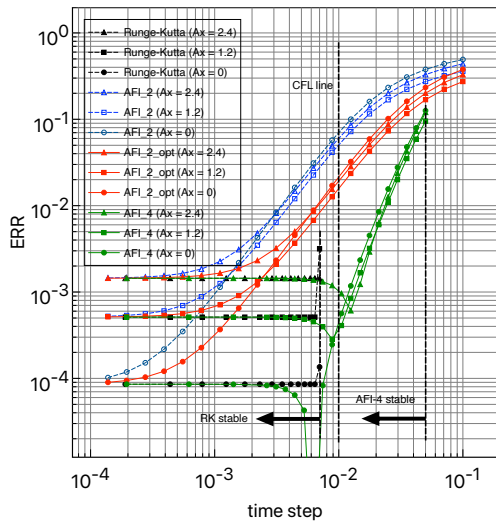


図 2: 誤差の時間刻み幅依存性. $L = 10$, $N = 100$, $h = 0.1$, $\gamma = 1$, $T = 10$. 横軸は時間刻み幅 τ , 縦軸は誤差 $ERR_{h,\tau}$.

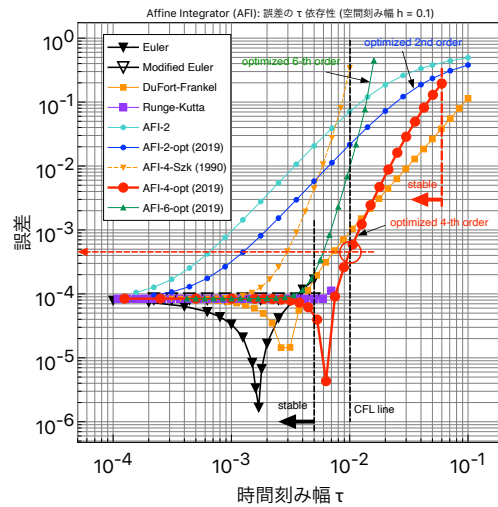


図 3: 誤差の時間刻み幅依存性. 最適化 LTS 分解 [3] と以前の LTS 分解の比較および他の数値積分スキームとの比較.

6.3 最適化 LTS 分解と以前の LTS 分解の比較

最適化 LTS 分解 [3] と以前の LTS 分解の比較および他の数値積分スキームとの比較を図 3 に示す. 最適化された 4 次の LTS 分解を用いたときには, 誤差の観点および安定性において AFI は Runge-Kutta(RK) 法を凌駕することがわかる. なぜか, 最適化された 6 次の LTS 分解のときの誤差は 4 次の LTS 分解のときのそれよりも大きくなってしまふ.

実は, RK 法よりも「強敵」は DuFort-Frankel(DF) 法であることがわかる. DF 法は無条件安定な (時間刻み幅に関する) 2 次解法であり, 誤差も小さく, AFI-4-opt の安定限界上では DF 法の方が優れている. しかしながら, CFL 限界内においては AFI4-opt の勝利である.

7 補足

ここでは, AFI に関して今後の課題や数学的補足も含めたいいくつかの話題を述べる.

7.1 安定性について

AFI の安定性がパラメータ α , β にどのように依存するか, 特に 4 次の AFI における安定性に対する非線形の効果を系統的に (数値的におよび解析的に) 調べることは今後の課題の 1 つである.

7.2 線形保存系における全エネルギーの厳密保存

AFIは線形シュレディンガー方程式の場合、全エネルギーを厳密に（数値的に言う
と丸め誤差レベルで）保存する（AFI論文参照）。線形系の場合は「エネルギー計量
行列」は時間的に一定であり、全エネルギーはこの行列を挟んでの状態ベクトル同士
の内積で表すことができるので、このことに気がついた後は証明は容易であった。一
方、SIでは全エネルギーを厳密には保存されず多少ゆらぐ（図4参照）。

ちなみに、TDGL方程式あるいは非線形（ $\beta > 0$ ）シュレディンガー方程式の場合
は、全エネルギーは保存しない。この場合、上記「エネルギー計量行列」が時間に依
存してしまうからである。非線形保存系の場合に全エネルギーが厳密に保存されるよ
うにAFIを修正できるかどうかは、現段階では明らかではない。今後の課題である。

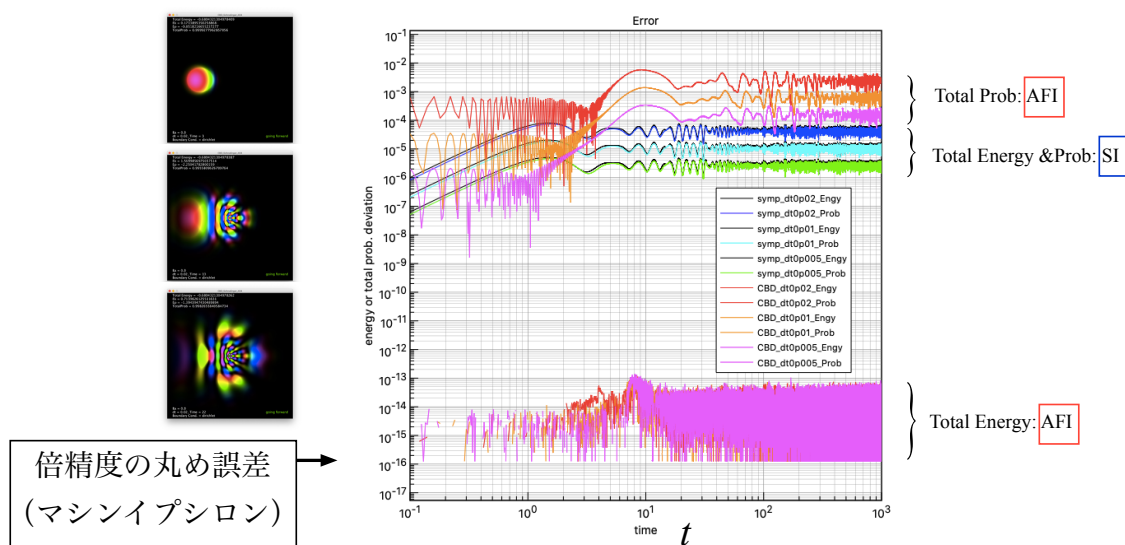


図4: 線形シュレディンガー方程式に基づく数値シミュレーション。保存量:全エネルギー及び全確率の時間発展における誤差。時刻ゼロにおける値からの相対誤差を示す。ピンク色、橙色、赤色はAffine integrator(AFI)における誤差。黒色、緑色、水色、青色はsymplectic integrator(SI)における誤差。AFIにおけるエネルギーは厳密に保存するので誤差は倍精度の丸め誤差レベルである。確率はSIよりも2桁ほど悪い。一瞥う、SIにおいては、エネルギーも確率における誤差も同程度である。

図5にAFIによる保存量誤差の時間依存性を示す。保存量誤差のLTS次数依存性および磁場依存性がわかる。図4の時と同様、線形シュレディンガー方程式に基づく数値シミュレーション結果である。全エネルギーの厳密保存は、全ての次数のLTSのとき、および磁場があっても成り立っていることが数値的に確認された。全確率においては、LTS次数が6次の方が4次るときよりも誤差が大きくなってしまふことは謎である。同様な現象（6次の方が4次るときよりも悪い）は線形量子拡散方程式を用いた解析解との比較による誤差評価のとき（図3参照）にも見られた。

図6にSIによるエネルギー保存誤差の時間依存性を示す。エネルギー保存誤差のLTS次数依存性がわかる。LTS分解の次数が大きいくほどエネルギー保存誤差が小さく

なっていることがわかる。SI の場合は、エネルギー保存誤差の LTS 分解次数依存性は単調である。

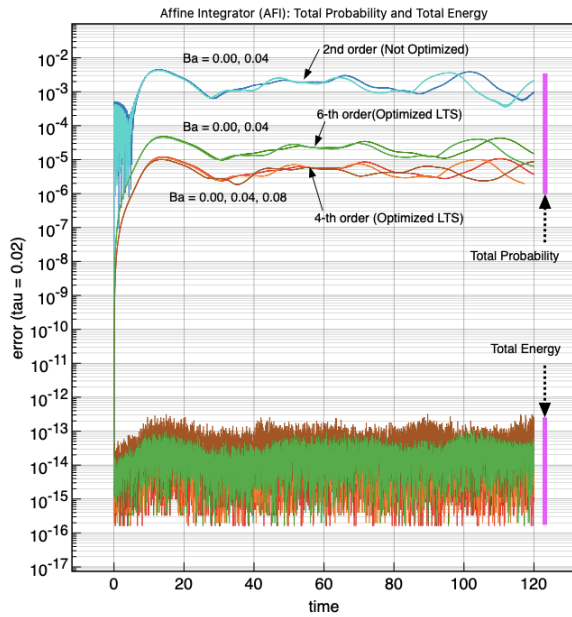


図 5: AFI による線形シュレディンガー方程式に基づく数値シミュレーション。磁場があるときでも全エネルギーは厳密に保存される。

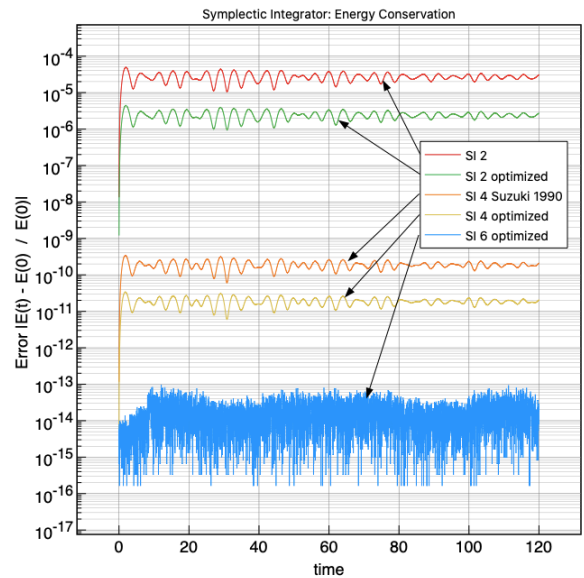


図 6: Symplectic integrator (SI) による線形シュレディンガー方程式に基づく数値シミュレーション (磁場ゼロ)。SI の場合は LTS 分解の次数を上げるほどエネルギー保存誤差が単調に低下する。

7.3 多成分系への拡張

AFI をスカラー量の時間発展に適用することを行ってきた。将来的には例えば、2成分超伝導系すなわちオーダーパラメータがベクトル量の TDGL 的方程式に AFI を適用したい。

図 7 に Babaev らの研究結果を示す。2成分超伝導体においては、トポロジカルに異なる様々な励起状態が生じる可能性があるらしい。

arXiv:1807.02509v1 [cond-mat.supr-con] 6 Jul 2018

Kelvin knots in superconducting state

Filipp N. Rybakov,¹ Julien Garaud,² and Egor Babaev¹

¹Department of Physics, KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, SE-10691 Sweden

²Institut Denis-Poisson, CNRS/UMR 7013,

Université de Tours - Université d'Orléans, Parc de Grandmont, 37200 Tours, France

(Dated: July 9, 2018)

Two-component superconductors are described by a doublet $\Psi = (\psi_1, \psi_2)^T$, of complex fields $\psi_a = |\psi_a|e^{i\phi_a}$ (with $a = 1, 2$), whose squared moduli $|\psi_a|^2$ represent the density of individual superconducting components. Each of the components is coupled, via the gauge derivative $D = \nabla + iq_a A$, to the vector potential A of the magnetic field $B = \nabla \times A$. Such a system is described by the Ginzburg-Landau free energy $E = \int d^3r$, whose density reads as:

$$E = \frac{B^2}{2} + \sum_{a=1,2} \frac{\mu_a}{2} |D\psi_a|^2 + \sum_{a,b=1,2} \frac{\mu_{ab}}{2} J_a \cdot J_b \quad (2a)$$

$$+ \nu (\Psi^\dagger \Psi - 1)^2 + V[\Psi, \Psi] \quad (2b)$$

where $J_a = \text{Im}(\psi_a^* D\psi_a) = |\psi_a|^2 (\nabla\phi_a + q_a A)$.

The terms $\mu_{12} = \mu_{21}$ of the current coupling matrix $\hat{\mu}$, describe the intercomponent drag [20, 24, 26–28]. The total current, is the sum of the supercurrents in individual components, which have a similar structure as in (1). The first term in (2b) is responsible for the condensation of superconducting electrons such that, in the ground state, $\Psi^\dagger \Psi \neq 0$. Many two-component superconducting states spontaneously break $U(1) \times U(1)$, $U(1) \times Z_2$ or $U(1)$ symmetries (see e.g. [18, 19, 21–23]). The cur-

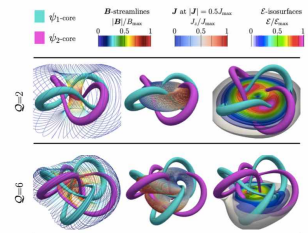


Figure 1 | Detailed structure of two stable vortex knots with different morphologies. Cyan and magenta values denote the position of the cores of the (fractional) vortices defined as the lines where the direction of a given component, ψ_a , is 0π or π , respectively. The color bar on the bottom indicates the direction of the magnetic field B in units of B_0 . The graph on the first column shows the structure of the vortex cores, a projection of magnetic field streamlines which circulate within the knot (colored according to the magnitude of B), showing their structure of the magnetic field. The second column displays the total current structure J for selected locations where $|J|_{\text{max}} = 0.5$. The last two columns show the energy density of the vortex knots solutions.

arXiv: 1807.02509v1 | cond-mat.supr-con | 6 Jul 2018

図 7: 2成分超伝導体に関する数値的研究。E. Babaev らの論文より。

7.4 ゲージ場で修正された空間における微分の差分近似について

ゲージ場で修正された空間に関する微分の差分化について説明する。ここでは簡単のため1次元空間で考える(右図参照)。標本化点 i で標本化された従属変数の値 ψ_i は次式で定義されているとする：

$$\psi_i = \psi(x) \quad (54)$$

ここで、 x は連続空間における座標である。空間刻み幅を h とおく。したがって、

$$\psi_{i+1} = \psi(x+h), \quad \psi_{i-1} = \psi(x-h) \quad (55)$$

である。

また、リンク変数は従属変数の標本化点と標本化点の間の点(2分点)上で定義されているものとする。すなわち

$$w_x^i = \exp\left(-ihA_x\left(x + \frac{h}{2}\right)\right), \quad w_x^{i-1} = \exp\left(-ihA_x\left(x - \frac{h}{2}\right)\right) \quad (56)$$

である。

まずはゲージ場で修正された空間1階微分

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} - iA_x\right)\psi \quad (57)$$

の差分化(差分近似)は、

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} - iA_x\right)\psi = (w_x^i \psi_{i+1} - \psi_i)/h + O(h) \quad (58)$$

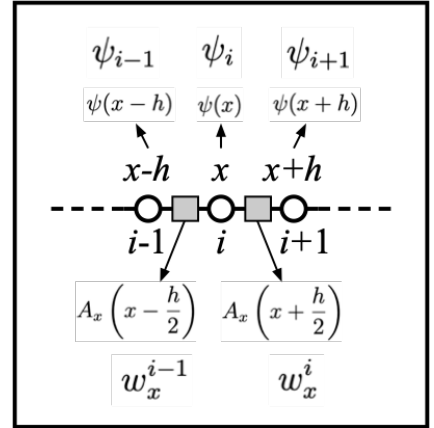
となることの証明を与える。定義より式(58)は

$$\begin{aligned} (w_x^i \psi_{i+1} - \psi_i)/h &= \left\{ \exp\left(-ihA_x\left(x + \frac{h}{2}\right)\right) \psi(x+h) - \psi(x) \right\} / h \\ &= \left\{ (1 - ihA_x(x)) \left(\psi(x) + h \frac{\partial \psi}{\partial x}(x) \right) - \psi(x) \right\} / h + O(h) \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial x} - iA_x(x) \right) \psi(x) + O(h) \end{aligned} \quad (59)$$

と変形できる。なお、この式変形においてテーラー展開

$$f(x+h) = f(x) + h \frac{df}{dx}(x) + \frac{h^2}{2} \frac{d^2 f}{dx^2}(x) + \dots \quad (60)$$

を用い、高次の項は無視した。



次に、ゲージ場で修正された空間2階微分

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} - iA_x\right)^2 \psi \quad (61)$$

の差分化（差分近似）は、

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} - iA_x\right)^2 \psi = (w_x^i \psi_{i+1} + \bar{w}_x^{i-1} \psi_{i-1} - 2\psi_i)/h^2 + O(h) \quad (62)$$

となることの証明を与える。定義より式(62)は

$$\begin{aligned} & (w_x^i \psi_{i+1} + \bar{w}_x^{i-1} \psi_{i-1} - 2\psi_i)/h^2 \\ &= \left\{ \exp\left(-ihA_x\left(x + \frac{h}{2}\right)\right) \psi(x+h) + \exp\left(ihA_x\left(x - \frac{h}{2}\right)\right) \psi(x-h) - 2\psi(x) \right\} / h^2 \\ &= \left\{ \left[1 - ih\left(A_x(x) + \frac{h}{2} \frac{\partial A_x}{\partial x}(x)\right) - \frac{h^2}{2} A_x^2(x) \right] \left(\psi(x) + h \frac{\partial \psi}{\partial x}(x) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x) \right) \right. \\ &\quad \left. + \left[1 + ih\left(A_x(x) - \frac{h}{2} \frac{\partial A_x}{\partial x}(x)\right) - \frac{h^2}{2} A_x^2(x) \right] \left(\psi(x) - h \frac{\partial \psi}{\partial x}(x) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x) \right) - 2\psi(x) \right\} / h^2 \\ &= \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x) - i\psi(x) \frac{\partial A_x}{\partial x}(x) - i2A_x(x) \frac{\partial \psi}{\partial x}(x) - A_x^2(x) \psi(x) + O(h) \\ &= \left(\frac{\partial}{\partial x} - iA_x(x)\right)^2 \psi(x) + O(h) \end{aligned} \quad (63)$$

と変形できる。

7.5 従属変数 ψ_i の推定値 $\tilde{\psi}_i$ について

従属変数 ψ_i の推定値

$$\tilde{\psi}_i = \frac{1}{2}(w_x^i \psi_{i+1} + \bar{w}_x^{i-1} \psi_{i-1}) \quad (64)$$

が真の値 (ψ_i) の近似となっていることを証明する。式(59)および式(63)は

$$\begin{aligned} & \exp\left(-ihA_x\left(x + \frac{h}{2}\right)\right) \psi(x+h) \\ &= \psi(x) + h\left(\frac{\partial}{\partial x} - iA_x(x)\right) \psi(x) + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} - iA_x(x)\right)^2 \psi(x) + O(h^3) \end{aligned} \quad (65)$$

$$\begin{aligned} & \exp\left(+ihA_x\left(x - \frac{h}{2}\right)\right) \psi(x-h) \\ &= \psi(x) - h\left(\frac{\partial}{\partial x} - iA_x(x)\right) \psi(x) + \frac{h^2}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x} - iA_x(x)\right)^2 \psi(x) + O(h^3) \end{aligned} \quad (66)$$

であることを意味する。式(65)と(66)を片々足し合わせて2で割ると

$$\frac{1}{2}(w_x^i \psi_{i+1} + \bar{w}_x^{i-1} \psi_{i-1}) = \psi_i + O(h^2) \quad (67)$$

であることが直ちに分かる。すなわち、推定値 $\tilde{\psi}_i$ は真の値 ψ_i と h^2 のオーダーだけ異なることがわかった。

7.6 アフィン変換について

アフィン変換は「線形変換+平行移動」である。AFIでは、これを高次元複素ベクトル空間で考える。

d 次元空間におけるベクトル q からベクトル q' へのアフィン変換は1次変換と平行移動をひとまとめにした変換として定義される：

$$q' = Aq + b \quad (68)$$

ここで、 A は1次変換を表す $d \times d$ 行列、 b は平行移動を表す d 次元列ベクトルである。式(68)は d 次元空間における変換であるが、空間の次元を1つ増やした $d+1$ 次元空間を導入することにより、 d 次元アフィン変換は $d+1$ 次元空間における1次変換に帰着できる（図8(a)参照）。あるいはそれと等価な $2d$ 次元1次変換を考えることもできる（図8(a)参照）。

AFIでは、空間離散化に関する標準化格子の黒丸点上の標準化点を成分とするベクトルを q 、白丸点上の標準化点を成分とするベクトルを p とし（図8(b)参照）、これら2つの d 次元ベクトルに関するアフィン変換を $2d$ 次元空間における1次変換として構成している（図8(c)参照）。ベクトル q および p の変換のための「平行移動ベクトル」：

$$b_q = B_q p, \quad b_p = B_p q \quad (69)$$

はそれぞれ「カノニカル共役」なもう一方の変数から定まることになる。行列 B_q および B_p はそれぞれもう一方からのカノニカル共役（隣接格子点）からの影響を表す行列であり、格子間相互作用の複素重みパラメータとしてリンク変数を含む。

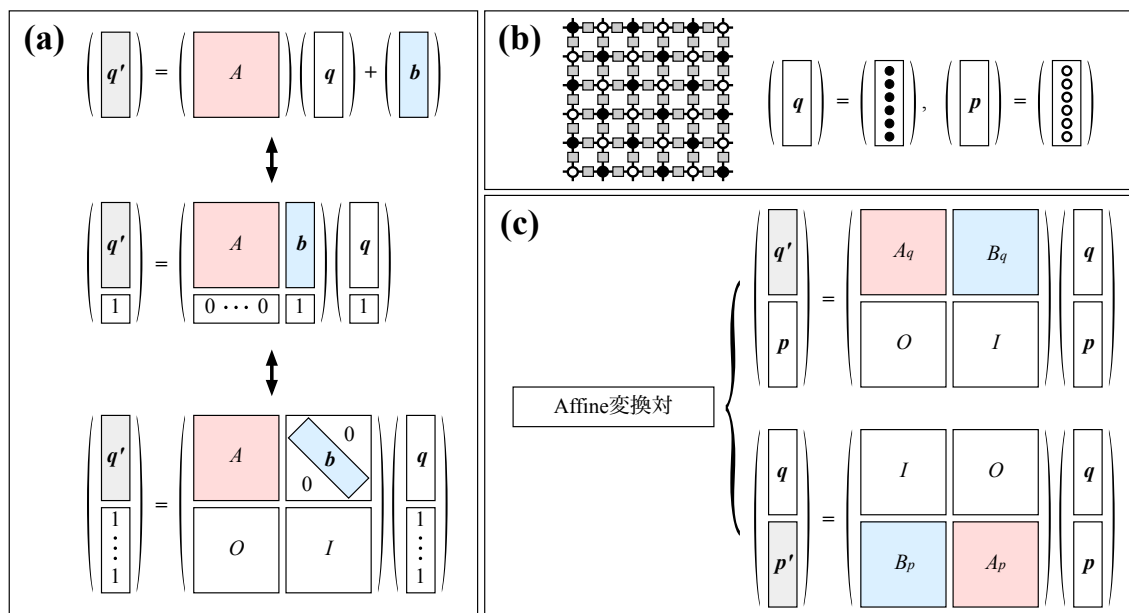


図 8: アフィン変換。 (a): アフィン変換および等価な1次変換, (b): AFIにおける「カノニカル共役」な変数の構成, (c): AFIにおけるアフィン変換対の構成。

7.7 3部グラフへの拡張

AFIは標本化点格子が2部グラフ (bi-partite graph) の場合だけではなく、3部グラフの場合にも適用可能である。実装は今後の課題である。図9に概略イメージを示す。さらに一般的には、k部グラフ (k-partite graph) への拡張も可能であると思われる。

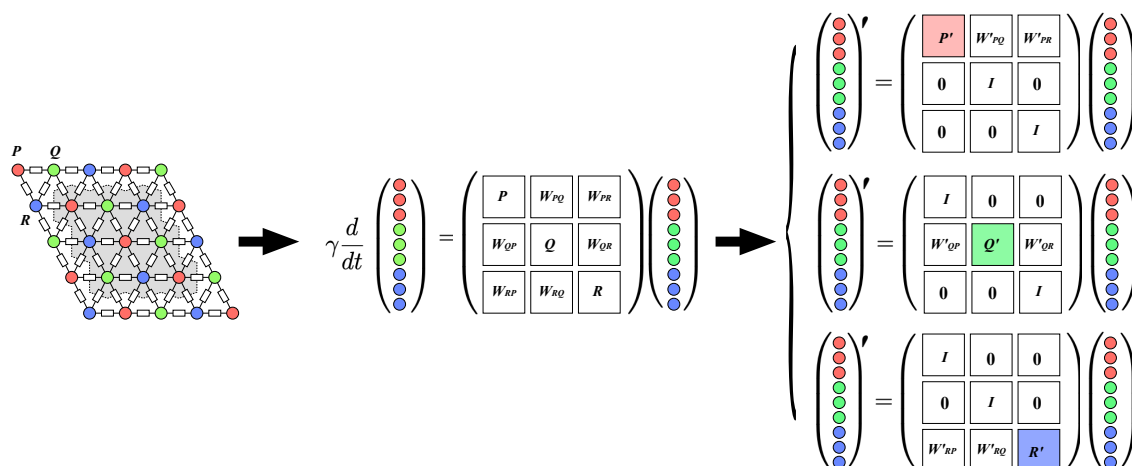


図 9: 3部グラフ (tri-partite graph) への拡張

参考文献

- [1] M. Suzuki, “Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and Monte Carlo simulations,” Phys. Lett. **146** (1990) 319.
- [2] S. M. Cox and P. C. Matthews, “Exponential Time Differencing for Stiff Systems,” J. Compt. Phys. **176** (2002) 430.
- [3] T. Barthel and Y. Zhang, “Optimized Lie-Trotter-Suzuki decompositions for two and three non-commuting terms,” Annals of Physics **418** (2020) 168165.