AFI の導出 ver.1 by 松野哲也 2021

量子化磁束動力学シミュレーション研究グループ 2021 夏（秋）のセミナー資料

1　はじめに

本文書は，なるべく多くの人に Affine integrator[1] を楽しんでもらうことを意図したものです．読者に AFI の原理を理解してもらい，AFI をプログラミングできるようになってもらうことを目的とします．

2　数学的準備

ここでは，AFI を簡潔に導くために必要な幾つかの公式を確認しておきます．

2.1　ブロック行列の逆行列に関する公式

ブロック行列

$$F = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$$

において，A と $S = D - CA^{-1}B$ が正則なとき

$$F^{-1} = \begin{pmatrix} A^{-1} + A^{-1}BS^{-1}CA^{-1} & -A^{-1}BS^{-1} \\ -S^{-1}CA^{-1} & S^{-1} \end{pmatrix} \tag{1}$$

です．さらに D が正則ならば

$$F^{-1} = \begin{pmatrix} (A - BD^{-1}C)^{-1} & -A^{-1}BS^{-1} \\ -S^{-1}CA^{-1} & S^{-1} \end{pmatrix} \tag{2}$$

です．また，さらに $C = O$（ゼロ行列）つまり

$$F = \begin{pmatrix} A & B \\ O & D \end{pmatrix}$$

ならば,

$$F^{-1} = \begin{pmatrix} A^{-1} & -A^{-1}BD^{-1} \\ O & D^{-1} \end{pmatrix} \tag{3}$$

です．以後用いる公式は式 (3) のみです.

2.2　行列指数関数 (Matrix exponential) に関する公式

ラプラス変換を $\mathcal{L}$ とおきます．ラプラス逆変換は $\mathcal{L}^{-1}$ と書きます．単位行列は I と書きます．まず，正方行列 A に対して

$$\mathcal{L}^{-1}[(sI-A)^{-1}] = \exp(At) \tag{4}$$

が成り立ちます．また，

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\frac{1}{s}(sI-A)^{-1}\right] = A^{-1}(\exp(At)-I) \tag{5}$$

が成り立ちます．

ここで $x(\tau)$ のラプラス変換 $\mathcal{L}[x(t)] \equiv X(s)$ は

$$X(s) = \int_0^\infty x(t)e^{-st}dt$$

で定義されます．公式 (4) の証明は容易です（ヒント：微分方程式：$dx/dt = Ax$ をラプラス変換します）．公式 (5) の証明も容易です（ヒント：微分方程式：$dx/dt = Ax + b$ をラプラス変換します）．

3　AFI の導出

前章の数学的準備があれば AFI は比較的容易に導かれます．

3.1　ブロック行列の指数関数の行列表現

ここでは，ある偏微分方程式を**空間に関する離散化**を行った結果，連立常微分方程式

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_q & W_q \\ W_p & A_p \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \tag{6}$$

が得られたとします．ここで A_q, A_p, W_q, W_p は互いにサイズが等しい正方行列であるとします．また，A_q, A_p は正則であるとします．右辺ブロック行列を

$$\begin{pmatrix} A_q & W_q \\ W_p & A_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_q & W_q \\ O & O \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} O & O \\ W_p & A_p \end{pmatrix} \tag{7}$$

のように 2 つのブロック行列に分解し，それぞれの分解要素ブロック行列の指数関数

$$\exp\left[\tau\begin{pmatrix} A_q & W_q \\ O & O \end{pmatrix}\right],\quad \exp\left[\tau\begin{pmatrix} O & O \\ W_p & A_p \end{pmatrix}\right] \tag{8}$$

を求めましょう．これらの行列指数関数は時間発展演算子としての意味をもちます．ここでパラメータ τ は時間刻み幅です．さて，このとき行列指数関数に関する公式が利用できます．すなわち

$$\mathcal{L}^{-1}\left[\left(sI-\begin{pmatrix} A_q & W_q \\ O & O \end{pmatrix}\right)^{-1}\right],\ \ \mathcal{L}^{-1}\left[\left(sI-\begin{pmatrix} O & O \\ W_p & A_p \end{pmatrix}\right)^{-1}\right] \tag{9}$$

を計算すれば良いのです．ブロック行列の逆行列に関する公式 (3) および行列指数関数に関する公式 (4), (5) を用いることによって

$$\exp\left[\tau\begin{pmatrix} A_q & W_q \\ O & O \end{pmatrix}\right]=\begin{pmatrix} \exp(\tau A_q) & A_q^{-1}(\exp(\tau A_q)-I)W_q \\ O & I \end{pmatrix} \tag{10}$$

$$\exp\left[\tau\begin{pmatrix} O & O \\ W_p & A_p \end{pmatrix}\right]=\begin{pmatrix} I & O \\ A_p^{-1}(\exp(\tau A_p)-I)W_p & \exp(\tau A_p) \end{pmatrix} \tag{11}$$

が得られます．つまり行列の指数関数で表されていた時間発展演算子の行列表現が得られたことになります．このようにして**時間に関する離散化**が行われます．これら行列表現：式 (10) および (11) が Affine Integrator(AFI) を構成します．

3.2　シンプルな行列の指数関数の例

前節でブロック行列の指数関数の行列表現が得られました．さて，実はその行列表現に再び行列の指数関数（$\exp(\tau A_q)$ など）が含まれています．プログラミング（実装）のためには，行列の指数関数 $\exp(\tau A_q)$ の行列表現を求めておく必要があります．

実は多くの場合，行列 A_q は対角行列などといった単純な形なので $\exp(\tau A_q)$ を求めておくことは容易です．以下に例を示します：

$$\exp\left[\tau\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}\right]=\begin{pmatrix} \exp(\tau a) & 0 \\ 0 & \exp(\tau b) \end{pmatrix} \tag{12}$$

$$\exp\left[\tau\begin{pmatrix} 0 & -\omega \\ \omega & 0 \end{pmatrix}\right]=\begin{pmatrix} \cos(\omega\tau) & -\sin(\omega\tau) \\ \sin(\omega\tau) & \cos(\omega\tau) \end{pmatrix} \tag{13}$$

$$\exp\left[\tau\begin{pmatrix} a & -\omega \\ \omega & a \end{pmatrix}\right]=\exp(\tau a)\begin{pmatrix} \cos(\omega\tau) & -\sin(\omega\tau) \\ \sin(\omega\tau) & \cos(\omega\tau) \end{pmatrix} \tag{14}$$

$$\exp\left[i\tau\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & -a \end{pmatrix}\right]=\cos(\omega\tau)I+\frac{i}{\omega}\sin(\omega\tau)\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & -a \end{pmatrix},\ \omega=\sqrt{a^2+|b|^2} \tag{15}$$

ただし，式 (15) において a は実数，b は複素数（b^* は b の複素共役）としました．

3.3 Lie-Trotter-Suzuki 分解

微分方程式

$$\frac{dx}{dt} = Ax \tag{16}$$

で規定されれる $x(t)$ の時間発展は

$$x(t+\tau) = \exp(\tau A)x(t) \tag{17}$$

と表されます．AFI の考え方で式 (17) を計算する（時間刻み幅 τ で数値積分を行う）ときには $A = Q + P$ と分解して $\exp(\tau A)$ の行列表現を求めるかわりに，$\exp(\tau Q)$ や $\exp(\tau P)$ の行列表現を求める，というものでした．分解した方が行列表現を求めやすくなるからです．ここで，一般には

$$\exp[\tau(Q+P)] \neq \exp(\tau Q)\exp(\tau P) \tag{18}$$

であることに注意しましょう．左辺と右辺が等しくなるのは $QP = PQ$ のとき（Q と P が可換のとき）のみです．多くの場合は $QP \neq PQ$（非可換）なので，式 (18) の左辺は $\exp(a_i\tau Q)$ や $\exp(b_i\tau P)$ （a_i や b_i は適当な係数）の積で近似されます．あるいは，左辺を右辺のように分解するといいます．この分解のことを Lie-Trotter-Suzuki 分解（LTS）分解と呼びます．以下に LTS 分解の例を示します：

$$\exp[\tau(Q+P)] = \exp(\tau Q)\exp(\tau P) + O(\tau^2) \tag{19}$$

$$\exp[\tau(Q+P)] = \exp((1/2)\tau Q)\exp(\tau P)\exp((1/2)\tau Q) + O(\tau^3) \tag{20}$$

上から順にそれぞれ（τ に関する）1 次の展開，2 次の展開と呼ばれます．このような展開は様々な研究者によって研究されています．最近 Barthel(2020) らによって得られた最適化近似展開（最適化 LTS 分解）[2] の例（２次および４次）を次に示します：

$$\begin{aligned}\exp[\tau(Q+P)] =& \exp(a_1\tau Q)\exp(b_1\tau P)\exp(a_2\tau Q)\exp(b_1\tau P)\exp(a_1\tau Q) + O(\tau^3),\\ & b_1 = 1/2,\ a_2 = 1 - 2a_2,\ a_1 = (3-\sqrt{3})/6\end{aligned} \tag{21}$$

$$\begin{aligned}\exp[\tau(Q+P)] =& e^{a_1\tau Q}e^{b_1\tau P}e^{a_2\tau Q}e^{b_2\tau P}e^{a_3\tau Q}e^{b_3\tau P}e^{a_3\tau Q}e^{b_2\tau P}e^{a_2\tau Q}e^{b_1\tau P}e^{a_1\tau Q} + O(\tau^5),\\ & b_3 = 1 - 2(b_1+b_2),\ a_3 = \frac{1}{2} - (a_1+a_2),\\ & b_1 = 0.42652466131587616168,\ b_2 = -\ 0.12039526945509726545,\\ & a_1 = 0.09584850274120368118 2,\ a_2 = -\ 0.07811115892163792269 5\end{aligned} \tag{22}$$

AFI および SI においては，このように $Q-$ 演算と $P-$ 演算を交互に状態ベクトルに作用させる形で数値積分が実現されます．

ところで，先に，$A = Q + P$ と分解して考える理由として $\exp(\tau Q)$ や $\exp(\tau P)$ の行列表現の求めやすさをあげました．実はもう一つ理由があります．この分解によってある種の構造が保存されるからです．保存系（ハミルトン系）に対して AFI を適用したときにはエネルギーが保存されます．また symplectic integrator(SI) を適用したとき（SI においても LTS 分解が用いられます）には位相空間の体積が保存されます．

エネルギー保存や位相空間の体積保存は，もともとの時空連続系が持っていた性質です．空間および時間を離散化してもこれらの保存量を保存することは数値積分において望ましい性質をもたらします．望ましい性質とは例えば，長時間シミュレーションを実行しても保存量のドリフト（平均的に一方向に変化する傾向）が無いことです．

もともとの連続系を記述する微分方程式が持っていたある種の性質（対称性）を保存するような数値積分法のことを構造保存型の数値積分方あるいは幾何学的数値積分法と呼びます．ちなみに，Euler 法や修正 Euler 法や Runge-Kutta 法は構造保存ではありません．これらの方法でハミルトン系（保存系）の数値積分を行うとエネルギーがドリフトしてしまいます．長時間のシミュレーションにおいては無視できない問題となります．また安定性があまり良くないので計算コストが高くなりがちです．

4　演習問題

問題 1． 公式を利用して，式 (10) および (11) を導いてみましょう．

問題 2a． 図 1(a) に示す 1 次元トイモデルをあらわす微分方程式：図 1(b) を導いてみましょう．つまり，3×3 行列：A_q, A_p, W_q, W_p の具体的な形を求めてみましょう．

ここではトイモデルは粒子拡散（ 1 次元）を表すものであり，モデルの基礎となる偏微分方程式（拡散方程式：粒子密度 $u(x,t)$，拡散定数 D）は

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

で与えられるとします．粒子密度 $u(x,t)$ は各格子点で標本化されます．格子点間隔は h とします．標本値：$(q_1(t), p_1(t), q_2(t), p_2(t), q_3(t), p_3(t))$ は 2 つの 3 次元ベクトル $q(t) = (q_1(t), q_2(t), q_3(t))^T$ および $p(t) = (p_1(t), p_2(t), p_3(t))^T$ にまとめられ，結果として粒子拡散は 6 次元の常微分方程式：図 1(b) で記述されます．

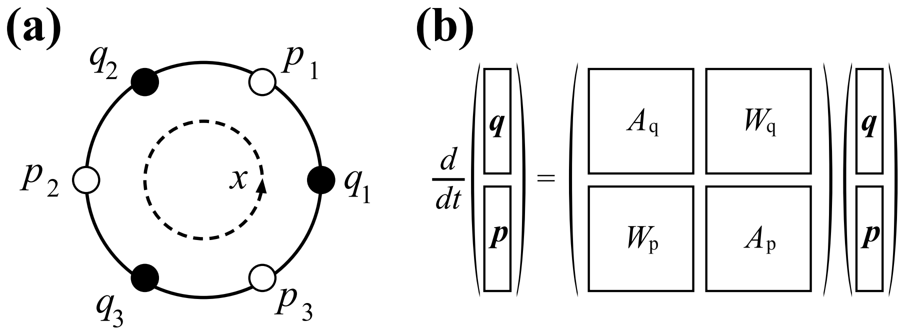

図 1　トイ（おもちゃ）モデル

問題 2b.　先の問い **2a** で具体的に求められた行列

$$\begin{pmatrix} A_q & W_q \\ W_p & A_p \end{pmatrix}$$

に対する時間発展演算子

$$\exp\left[\tau\begin{pmatrix} A_q & W_q \\ O & O \end{pmatrix}\right],\quad \exp\left[\tau\begin{pmatrix} O & O \\ W_p & A_p \end{pmatrix}\right]$$

の行列表現を求めてみましょう．

問題 2c.　空間離散化格子を図 2(a) に示すように格子点の個数を一般的に N 個として AFI を実装（プログラミング）しましょう．

ただし実際のプログラムにおいては，$q-$ 格子と $p-$ 格子は配列変数 u の要素指定インデックスが奇数か偶数かで区別するようにしましょう（図 2(b) 参照）．

問題 2d.　実は図 2(a) あるいは (b) は，元々の（空間離散化する前の）方程式に対して周期的境界条件が課せられていたことを表しています．一方，ディリクレ境界条件やノイマン境界条件を課したい場合には「はし」が必要です（図 2(c) あるいは (d) 参照）．実装において，左端および右端に「のりしろ」を作っておきます．つまり配列 u として記憶領域：$u[0], u[1], u[2], \cdots, u[N], u[N+1]$ （全部で $N+2$ 個の配列要素）を確保しておきます．ここで $u[0]$ と $u[N+1]$ がそれぞれ左端と右端の「のりしろ」です．

さて，ディリクレ境界条件：

$$u_0 = u_{N+1} = 0$$

および，ノイマン境界条件：

$$u_0 = u_1,\ u_{N+1} = u_N$$

を実装してみましょう．

※ **note:**　周期的境界条件の場合にも「のりしろ」を作っておくと実装上便利です．

※ **note:**　「のりしろ」を作る理由はループ処理内部の「if 文」が不要になるからです．

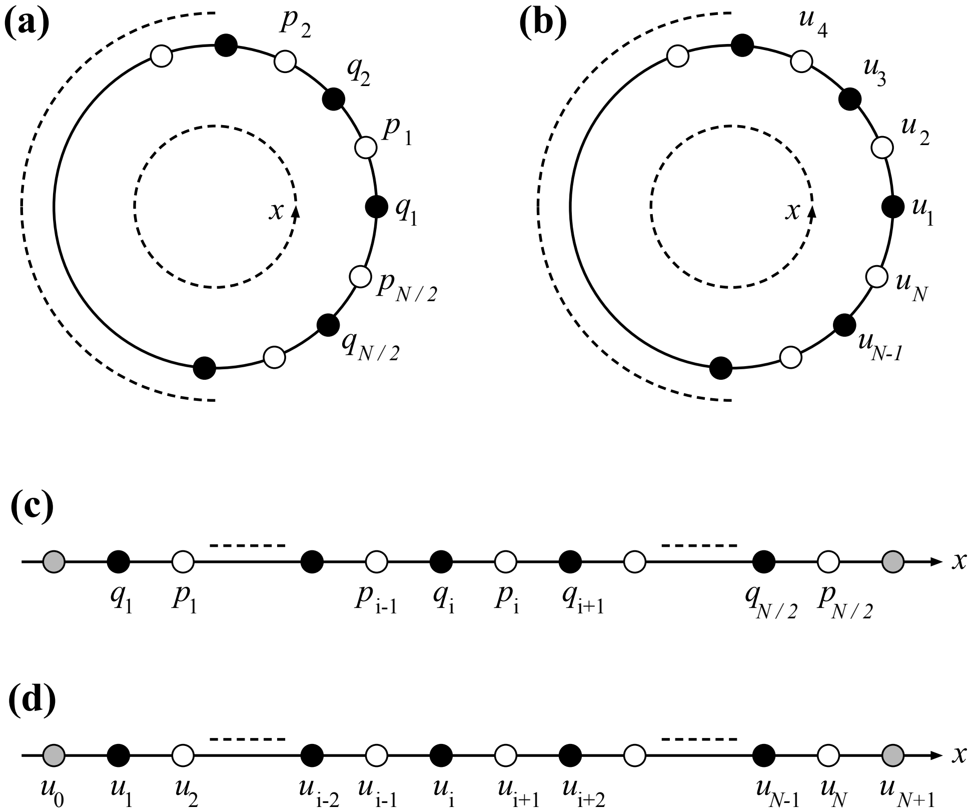

図 2　1 次元系の空間離散化の考え方

問題 3.　2 次元系や 3 次元系で拡散方程式のための AFI を実装してみましょう．
（チェッカボード上に「色分け」された空間離散化格子を用います）

問題 4a.　拡散方程式の独立変数（時刻）t を it（i は虚数単位）に置き換えるだけで，拡散方程式は自由粒子を記述する Schrödinger 方程式の形になることを確認しましょう．

問題 4b.　Schrödinger 方程式のための AFI の実装に挑戦してみましょう（複素数クラスや複素数を計算するための関数の定義が必要です．）．

問題 4c.　ポテンシャル項つきの Schrödinger 方程式のための AFI を実装しましょう．

5 補足事項

ここは著者の個人的メモのようなものです．読む必要はありませんが，AFI のさらなる発展に関心がある方にご参考までに示します：

1. もしも $A_q = A_p = O$ かつ $W_p = -W_q^T$ のときは AFI は Symplectic integrator(SI) になる．すなわち式 (10) および (11) で表される変換はこのとき位相空間の体積を保存する．つまり，このとき行列：式 (10) および (11) の行列式は 1 となる．したがって，**AFI は SI を一般化（拡張）したものだと捉えてもよいかもしれない．**
2. Schrödinger 方程式を数値積分する方法が 2 つある：1 つは波動関数を複素関数として空間離散化を行い複素ベクトルベースで数値積分する方法である．もう 1 つは波動関数を実部と虚部に分けて実数ベクトルベースで数値積分する方法である．前者（複素ベクトルベース）の場合は空間を「黒丸」と「白丸」に分けて複素ベクトルを 2 つの複素ベクトルに分割しカノニカル共役対として数値積分を構成することになり，これは AFI を構成することとなる．後者（実数ベクトルベース）の場合は「実部ベクトル」と「虚部ベクトル」でカノニカル共役対とし，これは SI を構成することとなる．ちなみに Schrödinger 方程式が線形の場合は **AFI を用いるとエネルギーが保存される．**非線形 Schrödinger 方程式（あるいは TDGP 方程式）の場合のエネルギー保存解法については今後の課題である．SI を用いる場合は線形非線形いずれの場合においてもエネルギーは保存されない（位相空間の体積は保存される）．
3. Schrödinger 方程式，TDGP 方程式（非線形 Schrödinger 方程式），TDGL 方程式のときは A_q, A_p は対角行列であり，$W_q, W_p (= W_q^\dagger)$ はリンク変数を成分とするスパース行列となる．ちなみに，Schrödinger 方程式および TDGP 方程式は保存系の方程式であり，このような量子保存系のときは置き換え：$\tau \longrightarrow -i\tau$ をすればよい．ここで i は虚数単位である．
4. 量子保存系（$\tau \longrightarrow -i\tau$）のとき，行列：式 (10) および (11) の行列式は一般には複素数でありその絶対値は常に 1 である．
5. 散逸系（普通の粒子拡散など）においては，行列：式 (10) および (11) の行列式は正の実数でありその大きさは 1 よりも（任意の τ に対して）常に 1 より小さい．
6. 散逸系の場合，行列：式 (10) および (11) の行列式の大きさが 1 よりも小さいことは前項で述べたが，このことはやはり「構造保存」と呼ばれる良い性質を意味する．AFI の高い安定性と関係している．Lie-Trotter-Suzuki(LTS) 分解の（τ に関して）2 次のオーダーまでならば展開係数が全て正であり，このことは 2 次の AFI が無条件安定（とても良い性質）であることを意味する．ただし，4 次のオーダーになると LTS 展開において負の展開係数が存在する．このことは 4 次の AFI は条件付き安定（ある大きさまでの τ ならば安定）であることを意味する．条件付きではあるが，Runge-Kutta 法と比較すると AFI の方がかなり安定性が高い [1]．
7. 非線形の実装について．現段階では AFI は非線形性を線形項の係数に「埋め込んで」いる．より良い実装の仕方については現在検討中である．

参考文献

[1] 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)

[2] T. Barthel and Y. Zhang, “Optimized Lie-Trotter-Suzuki decompositions for two and three non-commuting terms,” Annals of Physics **418**, 168165 (2020)

6　解答（一部の略解）

1.

$$\exp\left[\tau\begin{pmatrix} A_q & W_q \\ O & O \end{pmatrix}\right]$$

の行列表現を求めるために次のような計算を行う：

$$\begin{aligned}\left(sI-\begin{pmatrix} A_q & W_q \\ O & O \end{pmatrix}\right)^{-1} &= \begin{pmatrix} sI-A_q & -W_q \\ 0 & sI \end{pmatrix}^{-1} \\ &= \begin{pmatrix} (sI-A_q)^{-1} & \dfrac{1}{s}(sI-A_q)^{-1}W_q \\ O & \dfrac{1}{s}I \end{pmatrix}\end{aligned}$$

ここで 2 番目の等式においては公式 (3) を用いた．得られたブロック行列の構成要素それぞれに公式 (4) や公式 (5) を用いることにより

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

が得られる．

$$\exp\left[\tau\begin{pmatrix} O & O \\ W_p & A_p \end{pmatrix}\right]$$

についても同様にして結果が得られる．

4a.　拡散方程式（1 次元）

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

において，置き換え：$t \longrightarrow it$（ここで i は虚数単位）を行うと

$$\frac{1}{i}\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \qquad \text{あるいは} \qquad i\frac{\partial u}{\partial t} = -D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

が得られる．これは自由粒子を記述する Schrödinger 方程式（1 次元）

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

と同じ形である．ここで m は粒子の質量，$\hbar$ はプランク定数 h を 2π で割ったもの（$\hbar = h/(2\pi)$）である．

※補足　ところで，拡散方程式に粒子消滅項（あるいは放熱項）を付与したもの：

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \alpha(x)u$$

は，置き換え：$t \longrightarrow it$ によって

$$i\frac{\partial u}{\partial t} = -D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \alpha(x)u$$

となる．すなわち，これは（ポテンシャル項 $V(x)$ つき）Schrödinger 方程式（1 次元）

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi$$

と同じ形である．

4b.　Schrödinger 方程式を空間に関して離散化して得られる常微分方程式は

$$i\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} \psi_q \\ \psi_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_q & -W \\ -W^\dagger & A_p \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_q \\ \psi_p \end{pmatrix}$$

のような形になる．ここで，$W^\dagger$ は W のエルミート共役（複素共役かつ転置）のことである．行列 A_q および A_p は対角行列となり，これらの行列の各成分はポテンシャル項とラプラシアン演算子の一部が含まれる．行列 W にはラプラシアン演算子の一部：格子点間の接続情報）が含まれる．ゲージ場の情報も W に含まれる．つまり行列 W の各成分は「リンク変数」である．今の場合，時間発展演算子

$$\exp\left[-i\tau\begin{pmatrix} A_q & -W \\ O & O \end{pmatrix}\right],\quad \exp\left[-i\tau\begin{pmatrix} O & O \\ -W^\dagger & A_p \end{pmatrix}\right]$$

の行列表現が必要である．やはり，公式 (4) や公式 (5) を用いることにより

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

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

が得られる．