電子情報工学科（小田部研究室）

学生番号	15232025	氏　名	川畑　唯一
論文題目	時間発展方程式の解法に用いるアフィン数値積分法に関する研究		

1. 背景

ゲージ場下の量子現象を記述する時間発展方程式を効率よく高い精度で解くことができる陽的数値積分法としてアフィン数値積分法(Affine Integrator: AFI)を提案された。この手法は高い数値的安定性を持つ。本研究では、時間依存 Ginzburg-Landau(TDGL)方程式を数値的に解くことができる AFI と既存の方法の誤差の評価を行い、考察を行う。

2. 計算条件

1 次元 TDGL 方程式は式(1)である。

$$\gamma\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(\frac{\partial}{\partial x}-A_x\right)^2\psi-\alpha|\psi|-\beta|\psi|^2\psi \qquad (1)$$

ここで、ψはオーダーパラメータであり、超伝導電子密度に比例する量である。γは時定数、A_xはベクトルポテンシャルのx成分、α、βは展開係数である。

今回は簡単のため$\alpha=\beta=0$とおき、1 次元量子拡散方程式である式(2)の誤差評価を行った。

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

このとき、AFI の安定性は Lie-Trotter-Suzuki(LTS)分解を行った時の係数で決まる。初期条件として、$\gamma=1.0$とする。また、A_xは一様であり、オーダーパラメータの境界条件は周期的境界条件である。そして、格子点間隔をh、格子点数をNとすると定義域の長さ$L=Nh$と表され、今回は$h=0.1$、$N=100$、$L=10$とした。本研究では Eular 法や 2 次の Runge-Kutta(RK2)法、4 次の Runge-Kutta(RK4)法と 2 次のオーダーの LTS 分解の AFI(AFI-2)、2 次の最適化 LTS 分解の AFI(AFI-2-opt)、4 次の最適化 LTS 分解の AFI(AFI-4-opt)を使用して、時間刻み幅を変え、一定時間式(2)の数値シミュレーションを行い、解析解と比較することで誤差を算出した。今回は $\tau=10$の計測を行った。

3. 計算結果

1 次元量子拡散方程式の誤差の時間刻み幅依存性を図 1 に示す。図 1 の横軸は時間刻み幅、縦軸は誤差の大きさである。図 1 において、1 次元量子拡散方程式のA_xは丸で$A_x=0$、三角で$A_x=1.2$、四角で$A_x=2.4$で示した。

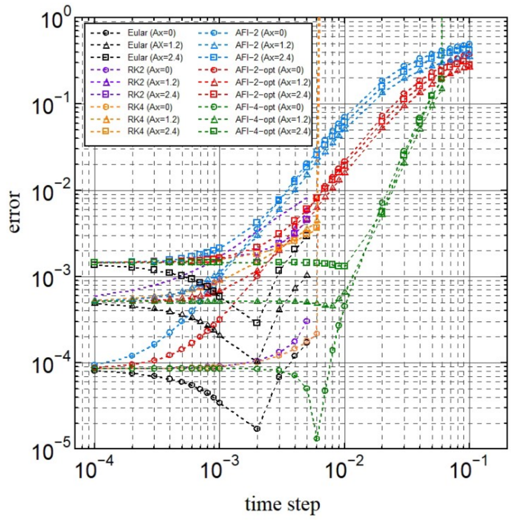

図 1：誤差の時間刻み幅依存性。横軸は時間刻み幅、縦軸は誤差。

4. 考察

時間刻み幅が小さいとき、ベクトルポテンシャルに係わらず、Eular 法や RK2 法、RK4 法といった既存の方法に比べて AFI-2、AFI-2-opt は誤差が大きい。しかし、AFI-4-opt は既存の方法と誤差はあまり変わらない。Eular 法や RK2 法、RK4 法は時間刻み幅がおよそ5×10^{-3}より大きくなると、無限大に大きくなり、うまくシミュレーションができなるなる。しかし、AFI-2、AFI-2-opt では時間刻み幅が計測した最大の時間刻み幅0.1まで安定してシミュレーションができ、AFI-4-opt は5×10^{-2}まで安定してシミュレーションできる。つまり AFI は Eular 法や Runge-Kutta 法といった既存の方法と比較して、時間刻み幅を大きく取っても計算精度がよく、安定的に数値シミュレーションが行える。

研究業績

川畑唯一ら： 2020 年応用物理学会九州支部学術講演会　2020 年 11 月 29 日