

令和2年度
卒業論文

超伝導体内の量子化磁束運動を利用した
リザーバーコンピューティングに関する研究

上田 天馬
(学生番号:17232017)

九州工業大学 情報工学部
電子情報工学科

指導教員：小田部 荘司 教授
2021年2月16日

目次

目次	1
第1章 序論	1
1.1 はじめに	1
1.2 Time-Dependent Ginzburg-Landau 方程式	1
1.2.1 Ginzburg-Landau 方程式	1
1.2.2 Time-Dependent Ginzburg-Landau 方程式	2
1.3 Affine Integrator(AFI)	3
1.3.1 1次元系における空間・時間離散化	3
1.3.2 2次元系での AFI	7
1.4 リザーバーコンピューティング(RC)	10
1.4.1 リザーバーコンピューティングとは	10
1.4.2 リザーバーコンピューティングの数理的基礎	10
1.5 研究目的	11
第2章 実装および計算方法	12
2.1 オーダーパラメータ ψ の基礎方程式・条件	12
2.2 リンク変数・ループ変数	13
2.3 境界条件の処理	15
2.3.1 リンク変数の境界条件	16
2.3.2 オーダーパラメータの境界条件	18
2.4 ゲージ場ダイナミクスの時間離散化	19
2.5 電界、磁界、電流密度の実装	19
2.5.1 電界	20
2.5.2 磁界	20
2.5.3 電流密度	20

2.6	ピンの導入.....	21
2.7	描画	21
2.8	リザーバーコンピューティング	21
第3章	結果と考察.....	24
3.1	量子化磁束および電磁現象の可視化	24
3.2	電流、電界を用いたリザーバーコンピューティング	26
3.2.1	出力予測	26
3.2.2	抽出データ数と出力予測の精度の相関	28
3.2.3	ピンの挿入	29
3.2.4	入力の変更	32
第4章	まとめ.....	34
参考文献	35
謝辞	36
研究業績	37

目次

Fig 1.1	格子・リンク変数.....	4
Fig 1.2	2次元系におけるダブルインデックスの定義(周期的境界条件)	8
Fig 2.1	演算 $\nabla \times$ のリンク変数による差分化	13
Fig 2.2	境界付近の格子点およびリンク変数の配置.....	15
Fig 2.3	東西境界における印加磁界、印加電流のリンク変数への反映	17
Fig 2.4	境界条件と基礎方程式によるオーダーパラメータの更新	18
Fig 2.5	電流の印加方法と電界の抽出方法の概略(正弦波)	22
Fig 2.6	電流の印加方法と電界の抽出方法の概略(矩形波)	23
Fig 2.7	ピンの配置.....	23
Fig 3.1	量子化磁束と電磁現象の可視化(ピンなし).....	24
Fig 3.2	量子化磁束と電磁現象の可視化(円状ピン).....	25
Fig 3.3	抽出データ100個の時の各波形の出力.....	26
Fig 3.4	抽出データ200個の時の各波形の出力.....	27
Fig 3.5	抽出データ300個の時の各波形の出力.....	27
Fig 3.6	データ抽出数と NMSE の相関	28
Fig 3.7	円状ピンの配置.....	29
Fig 3.8	円状ピンを 25 個規則的に配置した時の NMSE.....	29
Fig 3.9	円状ピンの配置(25 箇所、ランダム).....	30
Fig 3.10	円状ピンをランダムに 25 個配置したときの NMSE.....	30
Fig 3.11	ピンの数を変化させたときの NMSE	31
Fig 3.12	矩形波入力の際の各波形における NMSE.....	32
Fig 3.13	矩形波入力と正弦波入力の NMSE の差	33

第1章 序論

1.1 はじめに

リザーバーコンピューティング(Reservoir Computing, RC)は、はじめはリカレントニューラルネットワークの学習法の一つとして導入されたが、現在では任意の非線形力学系を活用する手法となっている。特に物理実装に特に適した手法で、量子多体系、スピントロニクス、光、ナノマテリアル、ソフトロボットなど、さまざまな応用例が報告されている。そこで、本研究では超伝導現象を RC に用いることで RC の可能性を探る。

2次元の時間依存 Ginzburg-Landau 方程式をアフィン変換数値積分法(AFI法)によって解き、プログラム実装することで量子化磁束およびそれに係る電磁現象の時間変化の様子を可視化する。また、印加電流を周期的に変化させたときの超伝導体内において、印加電流を入力とし、複数の任意地点における電界の時間変化をリザーバー層のノードとしてリザーバー計算を行い、周期的な波形についてその予測を計算した。

1.2 Time-Dependent Ginzburg-Landau 方程式

ここでは、第2種超伝導体の磁気的特性を記述する理論として、ギンツブルグ・ランダウ理論を説明する。

1.2.1 Ginzburg-Landau 方程式

複素数としてのオーダーパラメータ ψ を定義し、その絶対値の2乗 $|\psi|^2$ が超伝導電子の密度を与えるものとする。超伝導体の自由エネルギーは超伝導電子の密度により変わるので、それを $|\psi|^2$ のべき乗で展開する。さらに、運動量が ψ の空間変化によって与えられるので、その2乗に比例した運動エネルギー並びに磁界のエネルギーを加え、自由エネルギー密度が

$$F_s(B) = F_n(0) + \alpha|\psi|^2 + \frac{1}{2}\beta|\psi|^4 + \frac{1}{2\mu_0}(\nabla \times \mathbf{A})^2 + \frac{1}{2m^*}|(-i\hbar\nabla + e^*\mathbf{A})\psi|^2 \quad (1.1)$$

で与えられるとする。ここで、 α と β は展開係数、 \mathbf{A} はベクトルポテンシャル、第4項は磁界のエネルギー密度、第5項は運動エネルギー密度、 m^* は超伝導電子の質量、 e^* は超伝導電子の電荷である。 $F_n(0)$ は磁界がないときの常伝導状態の自由エネルギー密度であり、これを最小とするように ψ と \mathbf{A} が決まる。 ψ の共役複素数 ψ^* と \mathbf{A} に変分法を適用する。

$$\frac{\delta E_s}{\delta \psi^*} = \frac{\partial E_s}{\partial \psi^*} - \left[\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla \psi^*} \right] = 0 \quad (1.2)$$

$$\frac{\delta E_s}{\delta \mathbf{A}} = \frac{\partial E_s}{\partial \mathbf{A}} - \left[\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla \mathbf{A}} \right] = 0 \quad (1.3)$$

(1.2)式、(1.3)式をそれぞれ解き、

$$\frac{1}{2m^*} (-i\hbar\nabla + 2e\mathbf{A})^2\psi + \alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi = 0 \quad (1.4)$$

$$\mathbf{i} = \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} = \frac{i\hbar e}{m^*} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{4e^2}{m^*} |\psi|^2 \mathbf{A} \quad (1.5)$$

を得る。 \mathbf{i} は電流密度である。これらを Ginzburg-Landau 方程式という。[1]

1.2.2 Time-Dependent Ginzburg-Landau 方程式

GL 方程式に時定数を導入し、時間依存性を持たせた方程式を Time-Dependent Ginzburg-Landau 方程式(以下 TDGL 方程式)という。

ψ と \mathbf{A} の時定数を γ 、 ν とおくと、(1.2)式と(1.3)式は以下の形に書き換えられる。

$$\frac{\delta E_s}{\delta \psi^*} = \frac{\partial E_s}{\partial \psi^*} - \left[\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla \psi^*} \right] = -\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (1.6)$$

$$\frac{\delta E_s}{\delta \mathbf{A}} = \frac{\partial E_s}{\partial \mathbf{A}} - \left[\nabla \cdot \frac{\partial E_s}{\partial \nabla \mathbf{A}} \right] = -\nu \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (1.7)$$

(1.6)式、(1.7)式にゲージ変換

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial \psi}{\partial t} + ie^* V \psi \quad (1.8)$$

$$\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla V \quad (1.9)$$

を与える。 V はスカラーポテンシャルである。

$$\gamma \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} + ie^* V \psi \right) + \frac{1}{2m^*} (-i\hbar\nabla + e^* \mathbf{A})^2 \psi + \alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi = 0 \quad (1.10)$$

$$\nu \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla V \right) + \frac{1}{\mu_0} \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} + \frac{i\hbar e^*}{2m^*} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) - \frac{e^{*2}}{m^*} |\psi|^2 \mathbf{A} = 0 \quad (1.11)$$

(1.10)式、(1.11)式を解くことで超伝導体の数値解析を行う。

1.3 Affine Integrator(AFI)

Affine Integrator(以下、AFI)とは、拡散方程式やゲージ場存在下の Schrödinger 方程式、TDGL 方程式、回転系の Time-Dependent Gross-Pitaevskii 方程式の数値積分のために考案された、陽的数値積分法である。

数値的安定性に関して、AFIはラプラシアン項に関して無条件安定であり、方程式を構成する講全体に関して高い数値的安定性を有する。また、Schrödinger 方程式のような線形保存系において全エネルギーが厳密に保存される性質を持つ。TDGP 方程式のような非線形保存系においてノンドリフト特性を持つ。

AFI は空間に関し離散化するための格子をチェッカボード状に分解することから導かれるアフィン変換対で構成される。数値的安定性やエネルギー保存に関する理論解析が容易で、必要とされる記憶領域が最小であり、また付加的なワーキングメモリを必要としないという長所を持つ。

1.3.1 1次元系における空間・時間離散化

基礎方程式を1次元 TDGL 方程式

$$\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{\partial}{\partial x} - iA_x \right)^2 \psi - \alpha \psi - \beta |\psi|^2 \psi \quad (1.12)$$

であるとする。ここではベクトルポテンシャルが与えられ、固定されているとする。 A_x はベクトルポテンシャルの x 成分である。

パラメータ γ は時定数であり一般には複素数値をとる。 γ が実数値の場合は TDGL 方程式、 $\gamma = -i$ のときは Time-Dependent Gross-Pitaevskii(TDGP)方程式あるいは非線形 Schrödinger 方程式と同じ形になる。

ベクトルポテンシャルはリンク変数 w_{ij} によって次のように実装される。

$$w_{ij} = \exp(i\theta_{ij}), \quad \theta_{ij} = -hA_x \left(\frac{x_i + x_j}{2} \right), \quad i, j = 1, 2, 3, 4 \quad (1.13)$$

x_i は格子点 i の x 座標である。 h は格子点間隔である。ただし、もし格子点 i と格子点 j が接続していない場合、 $w_{ij} = 0$ であるとする。

空間に関する離散化のために導入した格子、リンク変数の状況を図に示す。

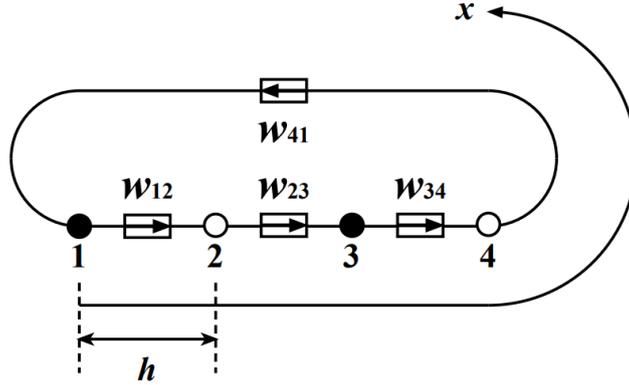


Fig 1.1 格子・リンク変数

TDGL 方程式(1)を空間に関して離散化する。 $\psi_i(t) = \psi(x_i, t)$, $\alpha_i = \alpha(x_i)$, $\beta_i = \beta(x_i)$ とおけば、以下の連立微分方程式が得られる。

$$\gamma \frac{d\psi_1}{dt} = \frac{1}{h^2} (w_{12}\psi_2 + \bar{w}_{41}\psi_4 - 2\psi_1) - \alpha_1\psi_1 - \beta_1|\psi_1|^2\psi_1 \quad (1.14)$$

$$\gamma \frac{d\psi_3}{dt} = \frac{1}{h^2} (w_{34}\psi_4 + \bar{w}_{23}\psi_2 - 2\psi_3) - \alpha_3\psi_3 - \beta_3|\psi_3|^2\psi_3 \quad (1.15)$$

$$\gamma \frac{d\psi_2}{dt} = \frac{1}{h^2} (w_{23}\psi_3 + \bar{w}_{12}\psi_1 - 2\psi_2) - \alpha_2\psi_2 - \beta_2|\psi_2|^2\psi_2 \quad (1.16)$$

$$\gamma \frac{d\psi_4}{dt} = \frac{1}{h^2} (w_{41}\psi_1 + \bar{w}_{34}\psi_3 - 2\psi_4) - \alpha_4\psi_4 - \beta_4|\psi_4|^2\psi_4 \quad (1.17)$$

ここで、 \bar{w} は w の複素共役を表す。ここで、

$$U_i = \alpha_i + \beta_i|\tilde{\psi}_i|^2, \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (1.18)$$

とおく。 $\tilde{\psi}_i$ は ψ_i の推定値である。詳細は後述する。

連立微分方程式は次のようにも書き表される。AFI法の準備のため、奇数の格子点の組と偶数の格子点の組の順番に並べている。

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_3 \\ \psi_2 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} -2 - U_1 h^2 & 0 & w_{12} & w_{14} \\ 0 & -2 - U_3 h^2 & w_{32} & w_{34} \\ \bar{w}_{12} & \bar{w}_{32} & -2 - U_2 h^2 & 0 \\ \bar{w}_{14} & \bar{w}_{34} & 0 & -2 - U_4 h^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_3 \\ \psi_2 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (1.19)$$

式(1.19)は、次のようにも表される。

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} D(-\sigma_Q) & W \\ W^\dagger & D(-\sigma_P) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.20)$$

ここで、 $\mathbf{q} = (\psi_1 \ \psi_3)^T$ 、 $\mathbf{p} = (\psi_2 \ \psi_4)^T$ および

$$\sigma_i = 2 + U_i \hbar^2, \quad i = 1, 2, 3, 4 \quad (1.21)$$

とおいた。また

$$D(-\sigma_Q) = \begin{pmatrix} -\sigma_1 & 0 \\ 0 & -\sigma_3 \end{pmatrix}, \quad D(-\sigma_P) = \begin{pmatrix} -\sigma_2 & 0 \\ 0 & -\sigma_4 \end{pmatrix}, \quad W = \begin{pmatrix} w_{12} & w_{14} \\ w_{32} & w_{34} \end{pmatrix} \quad (1.22)$$

とおいた。なお、 $W^\dagger = \bar{W}^T$ である。

式(1.19)あるいは式(1.20)は

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_3 \\ \psi_2 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_3 \\ \psi_2 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (1.23)$$

あるいは

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.24)$$

とあらわされる。ただし時間推進演算子 \hat{A} は次のように定義される。

$$\hat{A} = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i \in \{1,2,3,4\}} \left(-\sigma_i \psi_i + \sum_{j \in \{1,2,3,4\}} w_{ij} \psi_j \right) \frac{\partial}{\partial \psi_i} \quad (1.25)$$

時間推進演算子 \hat{A} を次のように分解する。

$$\hat{A} = \hat{A}_Q + \hat{A}_P \quad (1.26)$$

ただし、

$$\hat{A}_Q = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i \in Q} \left(-\sigma_i \psi_i + \sum_{j \in P} w_{ij} \psi_j \right) \frac{\partial}{\partial \psi_i} \quad (1.27)$$

$$\hat{A}_P = \frac{1}{\hbar^2} \sum_{i \in P} \left(-\sigma_i \psi_i + \sum_{j \in Q} w_{ij} \psi_j \right) \frac{\partial}{\partial \psi_i} \quad (1.28)$$

ここでは、 $Q = \{1,3\}$ および $P = \{2,4\}$ である。

次に、微分方程式

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \hat{A} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = (\hat{A}_Q + \hat{A}_P) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.29)$$

を時間に関して離散化する。時間刻み幅を τ とおくことで離散時間における時間発展方程式

$$\begin{pmatrix} \mathbf{q}' \\ \mathbf{p}' \end{pmatrix} = \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} (\hat{A}_Q + \hat{A}_P)\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.30)$$

が得られる。なお、 $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = (\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))$ および $(\mathbf{q}', \mathbf{p}') = (\mathbf{q}(t + \tau), \mathbf{p}(t + \tau))$ である。

指数関数演算子は Lie-Trotter-Suzuki 分解により次のように近似できる。

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}(\hat{A}_Q + \hat{A}_P)\right) = \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_Q\right)\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_P\right) + O(\tau^2) \\ \exp\left(\frac{\tau}{2\gamma}\hat{A}_Q\right)\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_P\right)\exp\left(\frac{\tau}{2\gamma}\hat{A}_Q\right) + O(\tau^3) \\ \dots + O(\tau^4) \\ \dots \end{pmatrix} \quad (1.31)$$

指数関数演算子 $\exp(\gamma^{-1}\tau\hat{A}_Q)$ および $\exp(\gamma^{-1}\tau\hat{A}_P)$ の行列表現を得ることができれば数値積分スキーム(AFI)を構成できる。

まず、演算子 \hat{A}_Q を ψ_i 、 $i \in Q$ に作用させる。

$$\hat{A}_Q\psi_i = \frac{1}{\hbar^2}\left(-\sigma_i\psi_i + \sum_{j \in P} w_{ij}\psi_j\right), \quad i \in Q \quad (1.32)$$

次に、 \hat{A}_Q を ψ_i 、 $i \in Q$ に 2 回作用させる。

$$\hat{A}_Q^2\psi_i = \left(-\frac{\sigma_i}{\hbar^2}\right)^2\left(\psi_i - \frac{1}{\sigma_i}\sum_{j \in P} w_{ij}\psi_j\right), \quad i \in Q \quad (1.33)$$

したがって、 \hat{A}_Q を ψ_i 、 $i \in Q$ に m 回作用させると

$$\hat{A}_Q^m\psi_i = \left(-\frac{\sigma_i}{\hbar^2}\right)^m\left(\psi_i - \frac{1}{\sigma_i}\sum_{j \in P} w_{ij}\psi_j\right), \quad i \in Q, \quad m \geq 1 \quad (1.34)$$

であることがわかる。ゆえに、

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_Q\right)\psi_i &= \psi_i + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m!}\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_Q\right)^m\psi_i \\ &= a_i\psi_i + b_i\sum_{j \in P} w_{ij}\psi_j, \quad i \in Q \end{aligned} \quad (1.35)$$

が得られる。ただし、

$$a_i = \exp\left(-\frac{\sigma_i\tau}{\hbar^2\gamma}\right), \quad b_i = \frac{1-a_i}{\sigma_i} \quad (1.36)$$

とおいた。また、

$$\hat{A}_Q\psi_i = 0, \quad i \in P \quad (1.37)$$

より、

$$\hat{A}_Q^m\psi_i = 0, \quad i \in P, \quad m \geq 1 \quad (1.38)$$

であることがわかる。演算子 \hat{A}_P についても同様に、次の結果が得られる。

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_Q\right)\begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D(a_Q) & D(b_Q)W \\ 0 & I \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.39)$$

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\hat{A}_P\right)\begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ D(b_P)W^\dagger & D(a_P) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.40)$$

ここで、

$$\begin{aligned} D(a_Q) &= \begin{pmatrix} a_1 & 0 \\ 0 & a_3 \end{pmatrix}, & D(b_Q) &= \begin{pmatrix} b_1 & 0 \\ 0 & b_3 \end{pmatrix} \\ D(a_P) &= \begin{pmatrix} a_2 & 0 \\ 0 & a_4 \end{pmatrix}, & D(b_P) &= \begin{pmatrix} b_2 & 0 \\ 0 & b_4 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.41)$$

とおいた。 I は単位行列である。

式(1.39)、式(1.40)はそれぞれ指数関数演算子 $\exp(\gamma^{-1}\tau\hat{A}_Q)$ および $\exp(\gamma^{-1}\tau\hat{A}_P)$ の行列表現を表している。つまり、AFI が得られたことになる。

1.3.2 2次元系での AFI

ここで、2次元系を考える。基礎方程式は

$$\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\nabla - i\mathbf{A})^2 \psi - \alpha \psi - \beta |\psi|^2 \psi \quad (1.42)$$

と表される。ただし、

$$\nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad \mathbf{A} = (A_x, A_y) \quad (1.43)$$

である。ここでは格子点やリンク変数を指定するためにダブルインデックスを用いる。このダブルインデックスは空間的な位置に対応する。Fig. 1.2 にダブルインデックスの定義を示す。リンク変数は x 成分と y 成分に分けて定義されることになる。

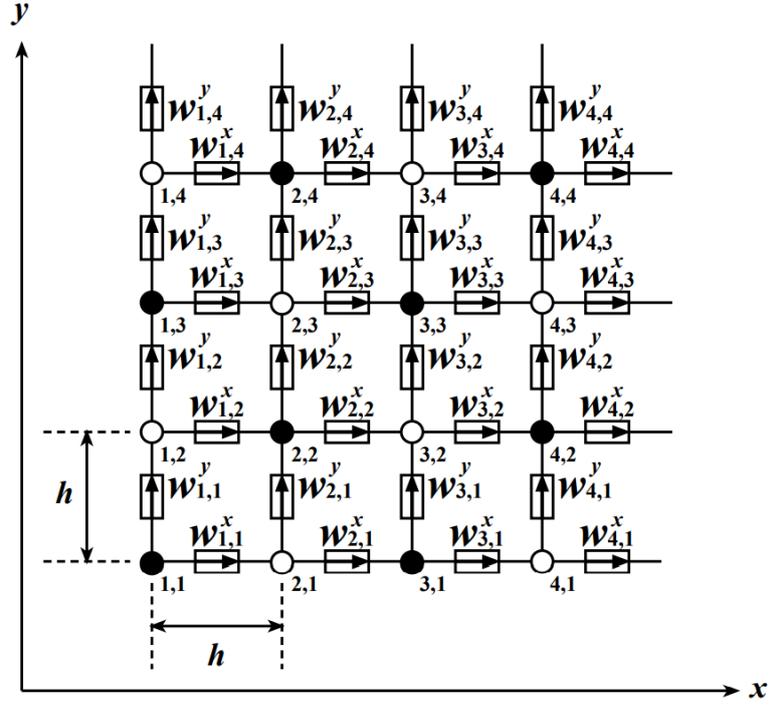


Fig 1.2 2次元系におけるダブルインデックスの定義(周期的境界条件)

格子点は図中の黒丸と白丸のように、2つのグループに分割される。まず空間に関して離散化すると次式のような微分方程式が得られる。

$$\gamma \frac{d\psi_{ij}}{dt} = \frac{1}{h^2} \left(w_{ij}^x \psi_{i+1,j} + \bar{w}_{i-1,j}^x \psi_{i-1,j} + w_{ij}^y \psi_{i,j+1} + \bar{w}_{i,j-1}^y \psi_{i,j-1} - 4\psi_{ij} \right) - \alpha_{ij} \psi_{ij} - \beta_{ij} |\psi_{ij}|^2 \psi_{ij} \quad (1.44)$$

ただし、周期的境界条件より、たとえば $i=0$ は $i=4$ 、 $i=5$ は $i=1$ と読み替えるものとする。ここでは、

$$U_{ij} = \alpha_{ij} + \beta_{ij} |\tilde{\psi}_{ij}|^2 \quad (1.45)$$

とおく。ただし、

$$\tilde{\psi}_{ij} = \frac{1}{4} (w_{ij}^x \psi_{i+1,j} + \bar{w}_{i-1,j}^x \psi_{i-1,j} + w_{ij}^y \psi_{i,j+1} + \bar{w}_{i,j-1}^y \psi_{i,j-1}) \quad (1.46)$$

である。また、

$$\sigma_{ij} = 4 + U_{ij} h^2 \quad (1.47)$$

とおく。

1次元系のと看と同様、格子点を黒丸グループ Q と白丸グループ P に分割することによりAFIを構成することができる。時間推進演算子 $\hat{A} = \hat{A}_Q + \hat{A}_P$ は1次元系のと看と同様に定義することができる。黒丸グループに属する格子点上の ψ の値で構成されるベクトルを \mathbf{q} 、白丸グループに属する格子点上の ψ の値で構成されるベクトルを \mathbf{p} とおけば、1次元系のと看と同様の次のような形の微分方程式

$$\gamma \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = (\hat{A}_Q + \hat{A}_P) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.46)$$

が得られる。この微分方程式を時間に関して時間刻み幅 τ で離散化することで、離散時間における時間発展方程式

$$\begin{pmatrix} \mathbf{q}' \\ \mathbf{p}' \end{pmatrix} = \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} \hat{A}\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \exp\left(\frac{\tau}{\gamma} (\hat{A}_Q + \hat{A}_P)\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.47)$$

が得られる。指数関数演算子の行列表現も1次元系の時と同様に、

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D(a_Q) & D(b_Q)W \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.48)$$

$$\exp\left(\frac{\tau}{\gamma}\right) \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ D(b_P)W^\dagger & D(a_P) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{q} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (1.49)$$

行列 $D(a_Q)$ および $D(a_P)$ は対角行列であり、それぞれ

$$a_{i,j} = \exp\left(-\frac{\sigma_{i,j}\tau}{h^2\gamma}\right), (i,j) \in P \quad \text{および} \quad a_{i,j} = \exp\left(-\frac{\sigma_{i,j}\tau}{h^2\gamma}\right), (i,j) \in P \quad (1.50)$$

を対角成分とするものである。なお、ダブルインデックスにより指定される格子点が黒丸グループに属することを $(i,j) \in P$ 、白丸グループに属することを $(i,j) \in Q$ と表記している。

また、行列 $D(b_Q)$ および $D(b_P)$ は対角行列であり、それぞれ

$$b_{i,j} = \frac{1 - a_{i,j}}{\sigma_{i,j}}, (i,j) \in Q \quad \text{および} \quad b_{i,j} = \frac{1 - a_{i,j}}{\sigma_{i,j}}, (i,j) \in P \quad (1.51)$$

を対角成分とするものである。

行列 W は黒丸グループに属する格子点と白丸グループに属する格子点を結ぶ辺の上で定義されたリンク変数を成分とする行列である。行列 W の行は白丸グループの格子点に対応し列は黒丸グループの格子点に対応する。

1.4 リザーバーコンピューティング(RC)

1.4.1 リザーバーコンピューティングとは

リザーバーコンピューティングは物理実装に適した機械学習技術であり、レーザ系、量子系、ソフトマテリアル等に生じる物理現象を用いたハードウェア実装が近年活発に研究されている。物理現象の特性をうまく RC に活用することで、高速性、省エネルギー性等を達成する革新的な計算機が実現可能であると期待されている。

1.4.2 リザーバーコンピューティングの数理的基礎

一次元の入出力信号の組 $D = \{s(t), y(t)\}_{t=1}^{300}$ が与えられているとし、これを教師データと呼ぶ。RC の目標は、教師データ D を用いて入力 s と出力 Y の対応関係を学習し、出力 $Y_r(k)$ の近似値 $Y(t)$ を得ることである。RC は、入出力層と、リザーバー層と呼ばれる入力信号系列 $\{s(t)\}$ に駆動される力学系から構成される。リザーバーは数理的には N 次元力学系で記述される。

$$\mathbf{X}(t) = \mathbf{F}(s(t)) \quad (1.52)$$

物理実装を想定すると、 \mathbf{F} は物理法則によって定まる状態の時間発展を表す。入力信号 $s(t)$ に応じて、 \mathbf{F} に従い各状態変数 $X_k(t)$ が時間発展する。

近似値 $Y(t)$ を得るために、リザーバーの状態に線形の重みづけをして観測する。

$$Y(k) = \sum_{k=1}^n W_{\text{out},k} X_k(t) \quad (1.53)$$

この観測値 $Y(t)$ が、教師データの出力 $Y_r(t)$ を近似するように出力重み W_{out} を決定する。教師データ D による重みの決定を学習と呼ぶ。RC の重要な特徴は、出力重みの学習のみで情報処理を行える点である。一般の物理法則では時間発展則の細かな制御が難しいが、RC はその必要がない枠組みになっているため、RC は物理実装に適していると言える。

学習には最小二乗法を用いる。出力層の重み $\{w_{\text{out}}\}$ を決定するために教師データ D を用いる。特に $\mathbf{Y}_r = (Y_r(1), \dots, Y_r(t))^T$ と置く。また、出力層の重みを $\mathbf{W}_{\text{out}} = (w_1, \dots, w_n)^T$ と置けば、出力の式(1.53)は $\mathbf{Y} = \mathbf{X}_k(t) \mathbf{W}_{\text{out}}$ となる。二乗誤差が最小となる条件から、

$$\mathbf{W}_{\text{out}} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}_r \quad (1.54)$$

を得る。

この $(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$ を X のムーア・ペンローズの擬似逆行列といい、 X^\dagger で表す。

1.5 研究目的

本研究では、AFIにより TDGL 方程式を実装し、磁束線およびそれに伴う電磁現象の観測を行う。また、それにより得られた電流と電界について、物理現象の実装に適した機械学習技術であるリザーバーコンピューティングを適用し簡単な波形(正弦波、三角波、矩形波、鋸波の周期的な 4 波形)の出力について予測を行うことで、リザーバーコンピューティングの物理実装に対する有用性を調査する。

第2章 実装および計算方法

2.1 オーダーパラメータ ψ の基礎方程式・条件

AFI法を用いて2次 TDGL 方程式を実装する。スカラーポテンシャルが常にいたるところでゼロであるゲージを採用する。ゲージ場(ベクトルポテンシャル)に時間変化、空間変化の記述を含んだ TDGL 方程式は

$$\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\nabla - i\mathbf{A})^2 \psi - \alpha \psi - \beta |\psi|^2 \psi \quad (2.1)$$

$$\tau_A \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \text{Im}[\bar{\psi}(\nabla - i\mathbf{A})\psi] - \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.2)$$

で与えられる。 τ_A はベクトルポテンシャルに関する時定数である。初期条件は

$$\psi(x, y, 0) = \cos\left(\frac{\pi m}{L} x\right) \cos\left(\frac{\pi n}{L} y\right), \quad m, n = 1, 2, 3 \dots \quad (2.3)$$

であるとする。

AFI(2次元)において、「反応項」およびゲージ場存在下では、 $\psi_{i,j}$ は次の式に従って、時間 τ 後の値 $\psi'_{i,j}$ に更新される。

$$\psi'_{i,j} = a_{i,j} \psi_{i,j} + b_{i,j} (w_x^{i,j} \psi_{i+1,j} + \bar{w}_x^{i-1,j} \psi_{i-1,j} + w_y^{i,j} \psi_{i,j+1} + \bar{w}_y^{i,j-1} \psi_{i,j-1}) \quad (2.4)$$

ただし、

$$a_{i,j} = \exp\left(-\frac{\sigma_{i,j}\tau}{h^2\gamma}\right) \quad (2.5)$$

$$b_{i,j} = \frac{1 - a_{i,j}}{\sigma_{i,j}} \quad (2.6)$$

2.2 リンク変数・ループ変数

ゲージ場の時間発展について、 \mathbf{A} をそのまま実装するのではなく、リンク変数に関する微分方程式を導き、それを時間に関して離散化する。演算 $\nabla \times$ の差分化がリンク変数の積で実現できることを Fig. 2.1 に示す。

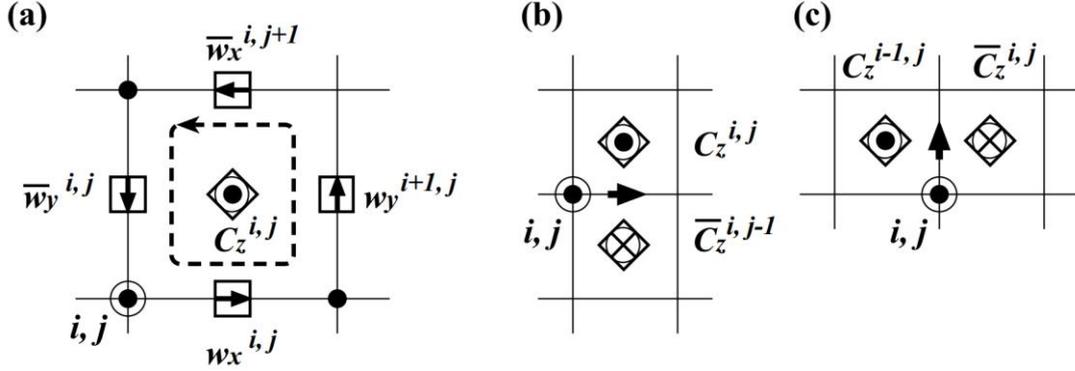


Fig 2.1 演算 $\nabla \times$ のリンク変数による差分化

リンク変数の積をループ変数 C と呼ぶこととする。このとき、式(2.2)における演算 $\nabla \times \nabla \times$ の差分化はループ変数 C の積で実現できる。

ここで、リンク変数 $w_x^{i,j}$, $w_y^{i,j}$ の更新方法について考える。方程式(2.2)を空間に関して離散化することを考える。リンク変数の定義式

$$w_x^i \equiv \exp(-ihA_x^{i,j}), \quad w_y^{i,j} \equiv \exp(-ihA_y^{i,j}) \quad (2.7)$$

および Fig. 2.1(a)より、格子点 (i, j) を左下の頂点とする微小正方形によって演算子 $\nabla \times$ を差分化することを考える。ループ変数 $C_z^{i,j}$ を次式のように、微小正方形の辺上で定義されたリンク変数の積で定義する。

$$\begin{aligned} C_z &\equiv w_x^{i,j} w_y^{i+1,j} \bar{w}_x^{i,j+1} \bar{w}_y^{i,j} \\ &= \exp[-ih(A_y^{i+1,j} - A_y^{i,j} - A_x^{i,j+1} + A_x^{i,j})] \\ &\cong \exp[-ih^2(\nabla \times \mathbf{A})_z^{i,j}] \end{aligned} \quad (2.8)$$

ここで、 $(\nabla \times \mathbf{A})_z^{i,j}$ は、位置 $(i + \frac{1}{2}, j + \frac{1}{2})$ における \mathbf{A} のローテーションのz成分である。

さらに、このループ変数 $C_z^{i,j}$ を用いて次式が得られる。

$$C_z^{i,j} \bar{C}_z^{i,j-1} \cong \exp[-ih^3(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A})_x^{i,j}] \quad (2.9)$$

$$\bar{C}_z^{i,j} C_z^{i-1,j} \cong \exp[-ih^3(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A})_y^{i,j}] \quad (2.10)$$

ここで式(2.9)と(2.10)は、それぞれリンク変数 $w_x^{i,j}$ および $w_y^{i,j}$ と同じ位置で定義されている。

ループ変数 $C_z^{i,j}$ は $(\nabla \times \mathbf{A})_z^{i,j}$ に対応する(Fig. 2.1)。Fig. 2.1(b)、Fig. 2.1(c)は $C_z^{i,j} \bar{C}_z^{i,j-1}$ と $\bar{C}_z^{i,j} C_z^{i-1,j}$ の定義を説明している。

以上の計算より、TDGL 方程式を空間に関して離散化することにより、次の常微分方程式が得られる。

$$\begin{aligned} \gamma \frac{\partial \psi_{i,j}}{\partial t} = & \frac{1}{h^2} (w_x^{i,j} \psi_{i+1,j} + \bar{w}_x^{i-1,j} \psi_{i-1,j} + w_y^{i,j} \psi_{i,j+1} + \bar{w}_y^{i,j-1} \psi_{i,j-1} - 4\psi_{i,j}) \\ & - \alpha_{i,j} \psi_{i,j} - \beta_{i,j} |\tilde{\psi}_{i,j}|^2 \psi_{i,j} \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\tau_A \frac{\partial w_x^{i,j}}{\partial t} = -i \text{Im}[\bar{\psi}_{i,j} w_x^{i,j} \psi_{i+1,j}] w_x^{i,j} - \frac{1}{h^2} (\bar{C}_z^{i,j-1} C_z^{i,j} - 1) w_x^{i,j} \quad (2.12)$$

$$\tau_A \frac{\partial w_y^{i,j}}{\partial t} = -i \text{Im}[\bar{\psi}_{i,j} w_y^{i,j} \psi_{i+1,j}] w_y^{i,j} - \frac{1}{h^2} (\bar{C}_z^{i,j} C_z^{i-1,j} - 1) w_y^{i,j} \quad (2.13)$$

ここで、

$$(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A})_x^{i,j} \cong \frac{\bar{C}_z^{i,j-1} C_z^{i,j} - 1}{-ih^3} \quad (2.14)$$

$$(\nabla \times \nabla \times \mathbf{A})_y^{i,j} \cong \frac{\bar{C}_z^{i,j} C_z^{i-1,j} - 1}{-ih^3} \quad (2.15)$$

であることを用いた。

2.3 境界条件の処理

ここでは境界条件の実装方法について説明する。

これまでのように2次元では長方形シミュレーション領域を考える。オーダーパラメータの値は格子点上で定義されている：

$$\psi_{i,j}, \quad i = 0, \dots, N_x + 1, \quad j = 0, \dots, N_y + 1 \quad (2.16)$$

ここではz方向に印加されている一様磁界 B_a を考える。このとき、 $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}_a = (0, 0, B_z)$ が東西南北の境界で満たされていなくてはならない。さらに、y方向に電流 \mathbf{J}_a が印加されている場合、すなわち $\mathbf{J}_a = (0, J_a, 0)$ である場合、先の境界条件に電流による効果が重畳されることになる。Fig 2.2 に境界付近の格子点およびリンク変数の配置を示す。印加磁界および印加電流はリンク変数の境界条件に反映される。

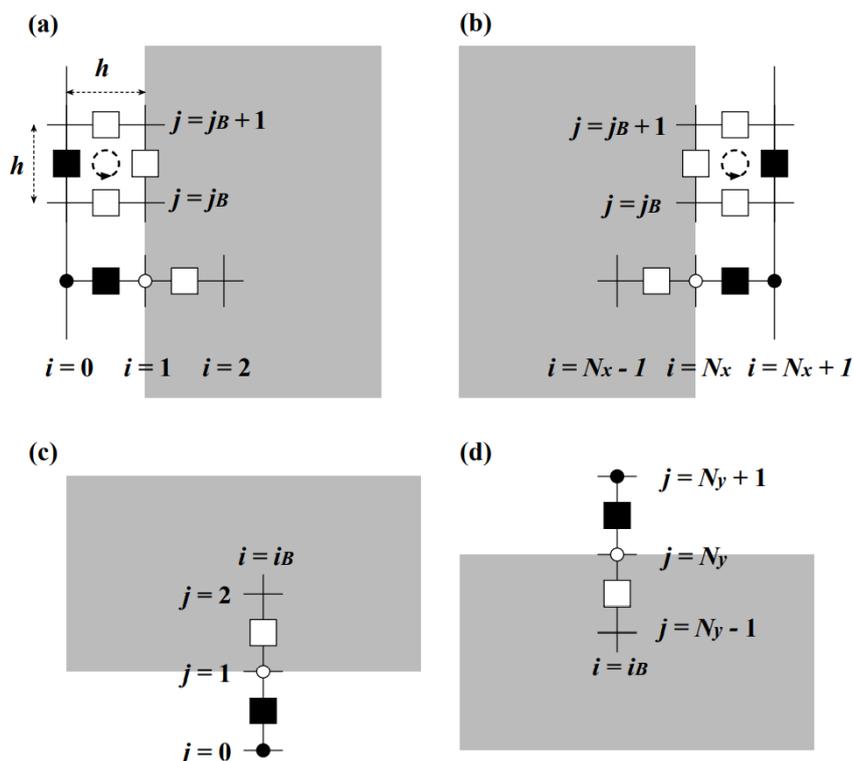


Fig 2.2 境界付近の格子点およびリンク変数の配置

(a)西側境界($x = 0$) (b)東側境界($x = L_x$) (c)南側境界($y = 0$) (d)北側境界($y = L_y$)

2.3.1 リンク変数の境界条件

西側および東側の境界($x = 0$ および $x = L_x$)において、境界面に垂直な成分 w_x はノイマン境界条件

$$w_x^{0,j_B} = w_x^{1,j_B}, \quad (2.17)$$

$$w_x^{N_x,j_B} = w_x^{N_x-1,j_B} \quad (2.18)$$

に従うとする。ここで、 $j_B = 1, \dots, N_y$ である。右辺が左辺に代入されるような実装を行うものとし、以降の境界条件の式についても、同様に実装を行うものとする。

西側の境界($x = 0$)において境界面に平行な成分 w_y が満たすべき条件は、アンペールの法則より、

$$\begin{aligned} w_x^{0,j_B} w_y^{1,j_B} \bar{w}_x^{0,j_B+1} \bar{w}_y^{0,j_B} &\cong \exp\left(-i \oint_{(0,j_B)} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}\right) \\ &= \exp\left(-i \iint_{(0,j_B)} \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S}\right) \\ &\cong \exp[-ih^2(B_a + \mu_0 \frac{L_x}{2} J_a)] \end{aligned} \quad (2.19)$$

ここで μ_0 は真空透磁率、 L_x はシミュレーション領域の x 方向のサイズに対応する。式(2.19)により、西側境界における境界面に平行な成分 w_y が得られる：

$$w_y^{0,j_B} = w_x^{0,j_B} w_y^{1,j_B} \bar{w}_x^{0,j_B+1} \exp[ih^2(B_a + \mu_0 \frac{L_x}{2} J_a)] \quad (2.20)$$

東側の境界($x = L_x$)において境界面に平行な成分 w_y が満たすべき条件は、同様にアンペールの法則から導かれる次の関係式によって求めることができる。

$$\begin{aligned} w_x^{N_x,j_B} w_y^{N_x+1,j_B} \bar{w}_x^{N_x,j_B+1} \bar{w}_y^{N_x,j_B} &\cong \exp\left(-i \oint_{(N_x,j_B)} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s}\right) \\ &= \exp(-i \iint_{(N_x,j_B)} \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S}) \\ &\cong \exp[-ih^2(B_a - \mu_0 \frac{L_x}{2} J_a)] \end{aligned} \quad (2.21)$$

式(2.21)により、東側境界における境界面に平行な成分 w_y が得られる：

$$w_y^{N_x+1,j_B} = w_x^{N_x,j_B} w_x^{N_x,j_B+1} \bar{w}_y^{N_x,j_B} \exp[-ih^2(B_a - \mu_0 \frac{L_x}{2} J_a)] \quad (2.22)$$

ここで、式(2.20)および式(2.22)において、 $j_B = 1, \dots, N_y - 1$ である。

印加磁界(z 方向)と印加電流(y 方向)の効果は東西境界面における面に平行な成分に反映される。印加磁界と印加電流のリンク変数の境界条件への反映について、Fig 2.3 に示す。

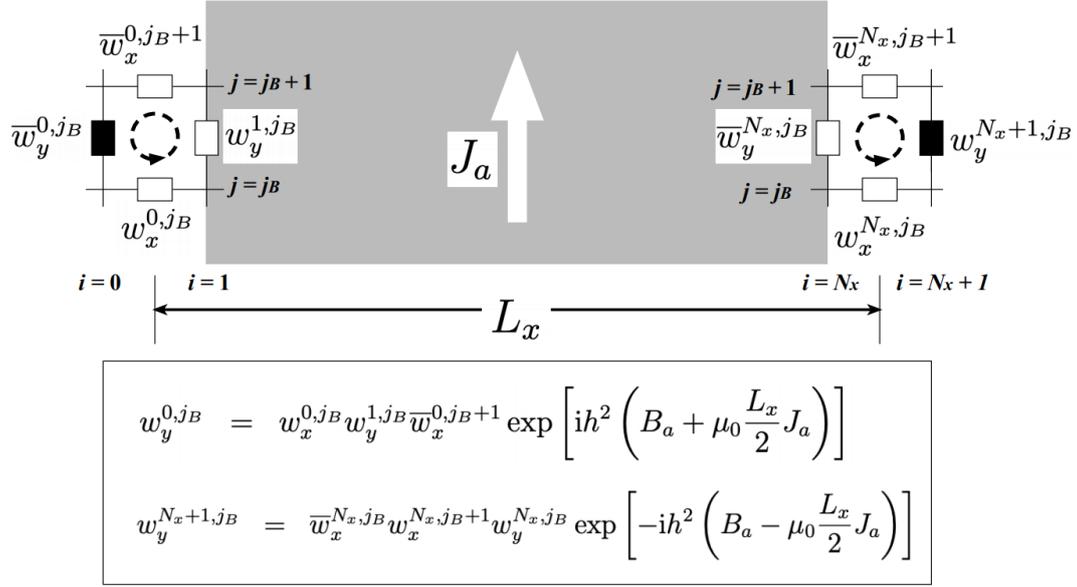


Fig 2.3 東西境界における印加磁界、印加電流のリンク変数への反映

南側、北側の境界面における境界面に垂直な成分に関して、次のようなノイマン境界条件

$$w_y^{i_B,0} = w_y^{i_B,1} \quad (2.23)$$

$$w_y^{i_B,N_y} = w_y^{i_B,N_y-1} \quad (2.24)$$

に従うとする。ここで、 $i_B = 1, \dots, N_x$ である。

南および北側の境界面における接線成分についてもノイマン境界条件が満たされるとする。

$$w_x^{i_B,0} = w_x^{i_B,1} \quad (2.25)$$

$$w_x^{i_B,N_y+1} = w_x^{i_B,N_y} \quad (2.26)$$

ここで $i_B = 1, \dots, N_x - 1$ である。

2.3.2 オーダーパラメータの境界条件

西側と東側の境界においてはノイマン境界条件に対応する、次式が満たされるとする。

$$\psi_{0,j_B} = w_x^{0,j_B} \psi_{1,j_B} \quad (2.27)$$

$$\psi_{N_x+1,j_B} = \bar{w}_x^{N_x,j_B} \psi_{N_x,j_B} \quad (2.28)$$

ここで、 $j_B = 1, \dots, N_y$ である。

南側と北側の境界においても、ノイマン境界条件に対応する次式が満たされるとする。

$$\psi_{i_B,0} = w_y^{i_B,0} \psi_{i_B,1} \quad (2.29)$$

$$\psi_{i_B,N_y+1} = \bar{w}_y^{i_B,N_y} \psi_{i_B,N_y} \quad (2.30)$$

ここで、 $i_B = 1, \dots, N_x$ である。

オーダーパラメータについて、値の更新方法を示す図を Fig 2.4 に示す。

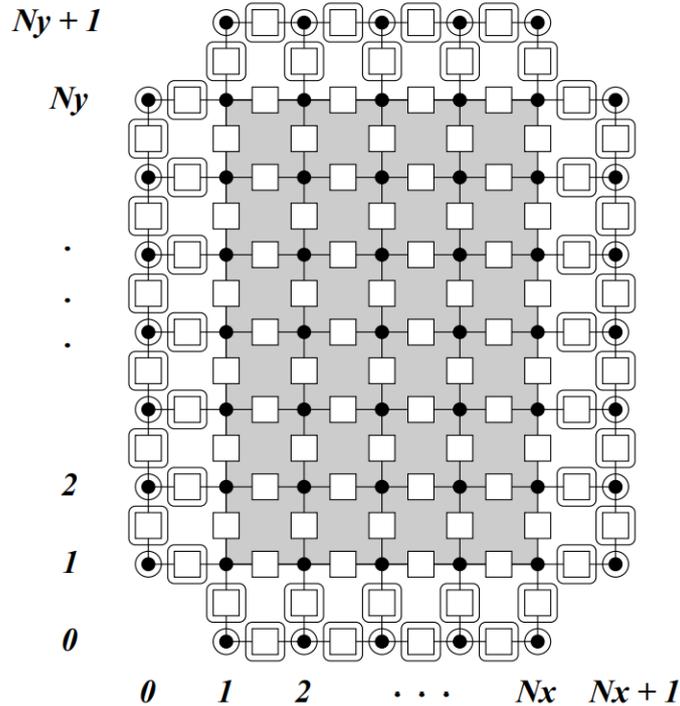


Fig 2.4 境界条件と基礎方程式によるオーダーパラメータの更新

曲線で囲まれている格子点およびリンク変数は境界条件によって、囲まれていないものは基礎方程式によって値が更新される。

2.4 ゲージ場ダイナミクスの時間離散化

ここで、ゲージ場のダイナミクスを記述する常微分方程式の時間に関する離散化を考える。ゲージ場に関する方程式(2.12)、(2.13)について、

$$w_x^{i,j} = \exp(i\theta_x^{i,j}), \quad w_y^{i,j} = \exp(i\theta_y^{i,j}) \quad (2.31)$$

および

$$\omega_x^{i,j} = \frac{d}{dt}\theta_x^{i,j}, \quad \omega_y^{i,j} = \frac{d}{dt}\theta_y^{i,j} \quad (2.32)$$

とおく。すると次の関係式が得られる。

$$\omega_x^{i,j} = -\frac{1}{\tau_A} \text{Im}[\bar{\psi}_{i,j} w_x^{i,j} \psi_{i+1,j} + \frac{1}{\hbar^2} \bar{C}_z^{i,j-1} C_z^{i,j}] \quad (2.33)$$

$$\omega_y^{i,j} = -\frac{1}{\tau_A} \text{Im}[\bar{\psi}_{i,j} w_y^{i,j} \psi_{i,j+1} + \frac{1}{\hbar^2} \bar{C}_z^{i,j} C_z^{i-1,j}] \quad (2.34)$$

これらの関係式より、次のような、リンク変数の偏角に関するオイラー法が考えられる。

$$\theta_x^{i,j}(t+\tau) = \theta_x^{i,j}(t) + \frac{\tau}{2} (\omega_x^{i,j}(t) + \omega_x^{i,j}(t+\tau)), \quad (2.35)$$

$$\theta_y^{i,j}(t+\tau) = \theta_y^{i,j}(t) + \frac{\tau}{2} (\omega_y^{i,j}(t) + \omega_y^{i,j}(t+\tau)) \quad (2.36)$$

2.5 電界、磁界、電流密度の実装

TDGL 方程式(1.10)、(1.11)は次のようにも表される。

$$\gamma \left(\frac{\partial}{\partial t} + iq\phi \right) \psi = (\nabla - iq\mathbf{A})^2 \psi - \alpha\psi - \beta|\psi|^2\psi \quad (2.37)$$

$$\gamma \left(\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \nabla\phi \right) = q \text{Im}[\bar{\psi}(\nabla - iq\mathbf{A})\psi] - \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.38)$$

ここで、 ϕ はスカラーポテンシャル、 q は電荷である。

電界 \mathbf{E} および磁界 \mathbf{B} は次のように表される。

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.39)$$

ここで、式(2.37)、(2.38)、(2.39)はゲージ対称性を持つ。すなわち、任意関数 χ のゲージ変換

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla\chi, \quad \phi \rightarrow \phi - \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad \psi \rightarrow \psi \exp(iq\chi) \quad (2.40)$$

によって式(2.37)、(2.38)、(2.39)は形を変えない。

このゲージ対称性を利用して、ゲージを選択する。今回はスカラーポテンシャル ϕ があらゆる場所で常にゼロであるゲージを採用した。このゲージのもとでは、式(2.37)、(2.38)、(2.39)はそれぞれ次のように表される。

$$\gamma \frac{\partial \psi}{\partial t} = (\nabla - iq\mathbf{A})^2 \psi - \alpha \psi - \beta |\psi|^2 \psi \quad (2.41)$$

$$\tau_A \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = q \text{Im}[\bar{\psi}(\nabla - iq\mathbf{A})\psi] - \nabla \times \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.42)$$

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (2.43)$$

2.5.1 電界

式(2.43)の左式および式(2.7)より、電界 $\mathbf{E} = (E_x, E_y)$ は次のように計算される。

$$E_x^{i,j} = \frac{1}{h} \frac{d\theta_x^{i,j}}{dt} = \omega_x^{i,j}/h \quad (2.44)$$

$$E_y^{i,j} = \frac{1}{h} \frac{d\theta_y^{i,j}}{dt} = \omega_y^{i,j}/h \quad (2.45)$$

2.5.2 磁界

式(2.43)右式および式ループ変数 $C_z^{i,j}$ の定義式より、磁界は

$$B_z^{i,j} = -\frac{1}{h^2} \arg[C_z^{i,j}] \quad (2.46)$$

と表される。磁界はループ変数 $C_z^{i,j}$ の値が定義されている空間位置と同じ位置で定義される。

2.5.3 電流密度

式(2.38)右辺の第1項は電流密度に対応する。これを \mathbf{J} とおく。

$$\mathbf{J} = q \text{Im}[\bar{\psi}(\nabla - iq\mathbf{A})\psi] \quad (2.47)$$

であり、

$$J_x^{i,j} = q \text{Im}[\bar{\psi}_{i,j} w_x^{i,j} \psi_{i+1,j}]/h \quad (2.48)$$

$$J_y^{i,j} = q \text{Im}[\bar{\psi}_{i,j} w_y^{i,j} \psi_{i,j+1}]/h \quad (2.49)$$

である。電流密度の x 成分、 y 成分は対応するリンク変数 w_x および w_y が定義されている空間位置と同じ位置で定義される。

2.6 ピンの導入

ピンは TDGL 方程式中のパラメータ α に空間依存性を持たせることによって実現する。すなわち $\alpha = \alpha(x, y)$ (2次元)とすることである。ピンを配置したい座標で $\alpha = 0$ とすることでピン領域(常伝導領域)を設定する。

2.7 描画

描画処理は統合開発環境 Processing により行う。100×100の大きさを持つ超伝導平面について、各部分のオーダーパラメータの2乗を輝度に、位相を色相に割り当て表示させる。これにより量子化磁束の観測を行う。ピンがある領域($\alpha = 0$)には白い格子を描画し、ピンの位置がわかるようにする。また、それとは別の画面に、磁界の大きさを色相で、電界を黒矢印で、電流密度を白矢印で表示させる。これにより電磁現象の可視化を行う。

2.8 リザーバーコンピューティング

100×100の超伝導領域のうち、重複のないようにランダムに n 箇所の座標を抽出し電界の時間変化のデータ $E(t)$ を得る。なお、印加電流を正弦波的(振幅1、周期300ステップ)に変化させたときの電界の時間変化のデータとする。なお、印加電流の初期値は1[A]であるとし、量子化磁束が観測されはじめる1500ステップ目から電流をサイン波的に変化させることとする。なお、電界についても同様に、 n 箇所について1500ステップ目から1799ステップ目の300ステップ分をとる。

これを入力信号系列である電流に駆動される $X(t)$ とする。用いる教師データ出力は1周期分の正弦波、三角波、矩形波、鋸波とする。式(1.54)で出力層の重みを導出し、式(1.53)により観測値 $Y(t)$ を求める。出力と観測値をプロットし、視覚的に比較を行う。この一連の実装は Mathematica により行う。

また、予測精度の指標として、出力 $Y_r(t)$ と観測値 $Y(t)$ の差を表す、正規化平均二乗誤差(NMSE、Normalized Mean Square Error)を計算する。

$$\text{NMSE} = \frac{\sum_{k=1}^n (Y(t_k) - Y_r(t_k))^2}{\sum_{k=1}^n (Y_r(t_k))^2} \quad (2.50)$$

Fig 2.5 に電流の印加方法と電界の抽出方法の概略を示す。本研究では、正弦波入力に応じて駆動する電界をリザーバー層のノードとし、4つの周期的な波形(正弦波、三角波、矩形波、鋸波)の予測を行う。

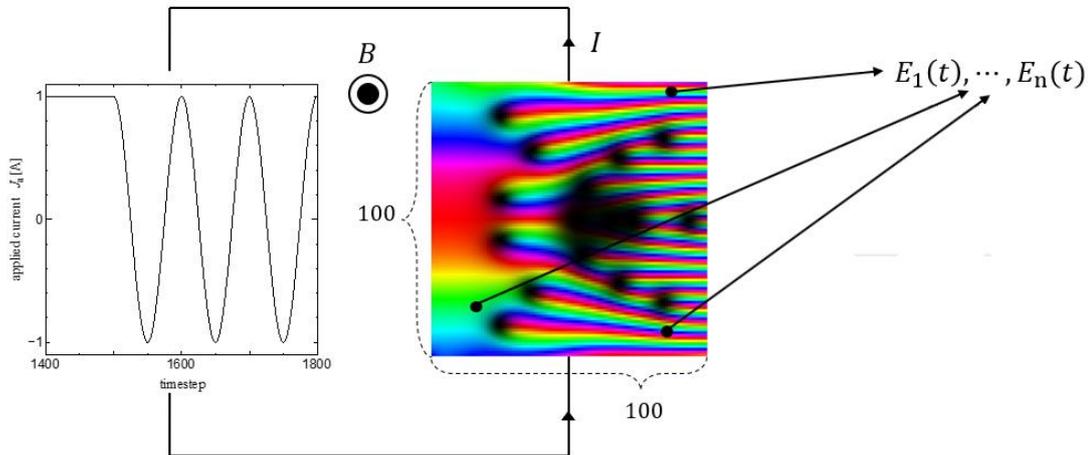


Fig 2.5 電流の印加方法と電界の抽出方法の概略(正弦波)

また、入力として用いる電流の変化のさせ方やピンの導入が与える影響についても調査を行う。入力信号が与える影響を調べるために、Fig 2.6 のように入力信号を矩形波にして同様に NMSE の計算を行う。また、ピンが与える影響について、半径 5 の円状ピンを 25 個導入して NMSE の計算を行う。2通りの配置方法を Fig 2.7 に示す。なお、Fig 2.7 右図の配置方法について、ピンの重複はなく、ランダムになるように実装を行った。

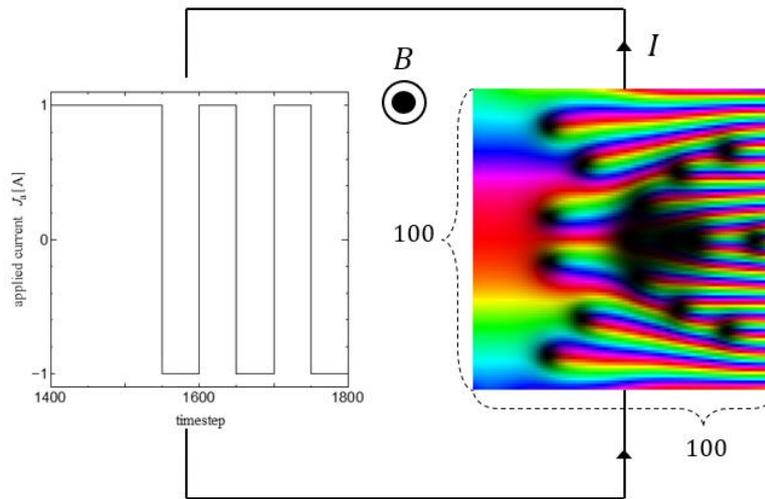


Fig 2.6 電流の印加方法と電界の抽出方法の概略(矩形波)

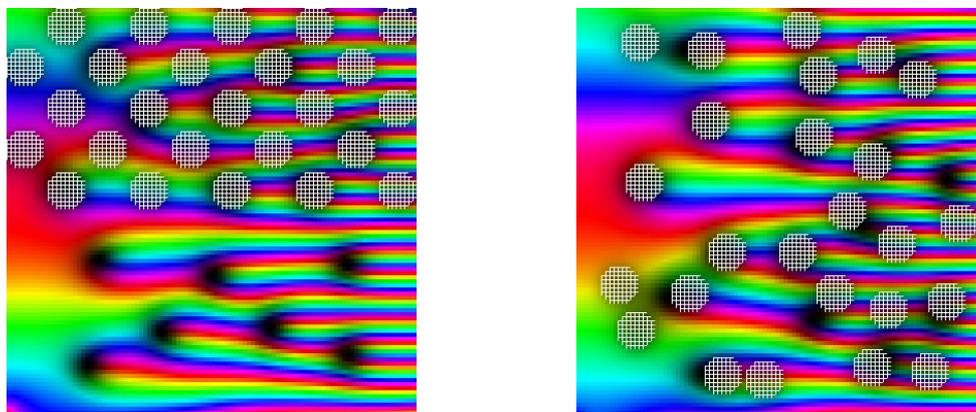


Fig 2.7 ピンの配置

第3章 結果と考察

3.1 量子化磁束および電磁現象の可視化

まず、ピンを入れずに量子化磁束および電磁現象を観測した様子を Fig 3.1 に示す。黒い円状の部分が右から左へと動いていく様子が観測できた。これが量子化磁束である。量子化磁束は左端に到達すると消失する。量子化磁束の中心部の磁界が大きくなっており、電界は量子化磁束の周囲に沿うように分布している。

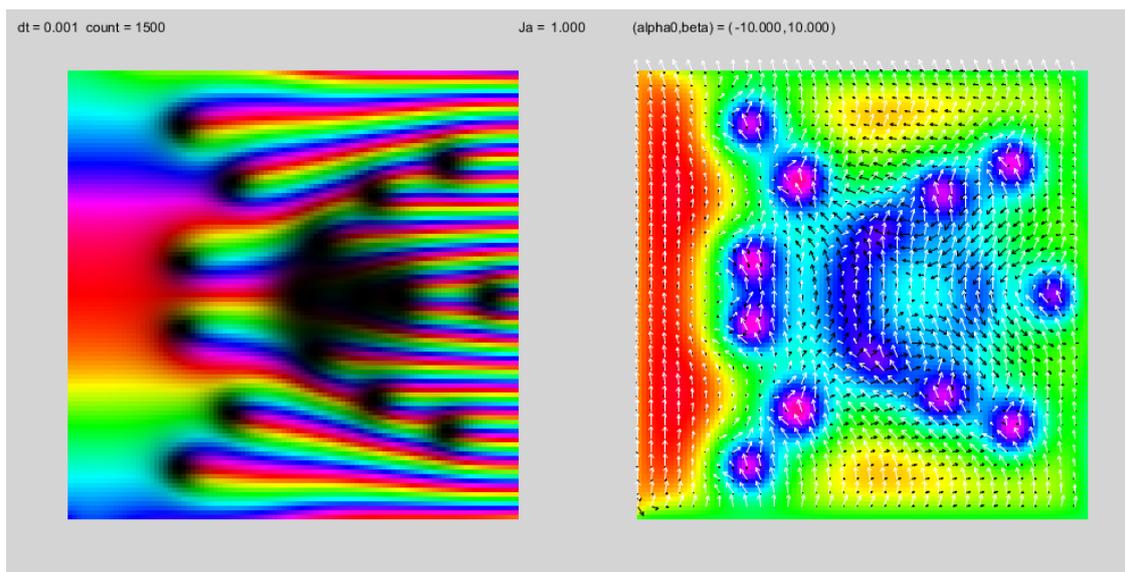


Fig 3.1 量子化磁束と電磁現象の可視化(ピンなし)

次に、円状のピンを 25 個導入し、量子化磁束および電磁現象を観測した様子を Fig 3.2 に示す。Fig 3.2 左図の上部に表示されている、白い格子状の部分がピンを実装した部分である。円状のピンによりピン留めを行っている Fig 3.2 右側上部では量子化磁束がピンにより留められ、ピンのある場所で動かなくなった。Fig 3.2 部ではピンがない場合と同様に右から左へ磁束が動き、左端に到達すると消失する。

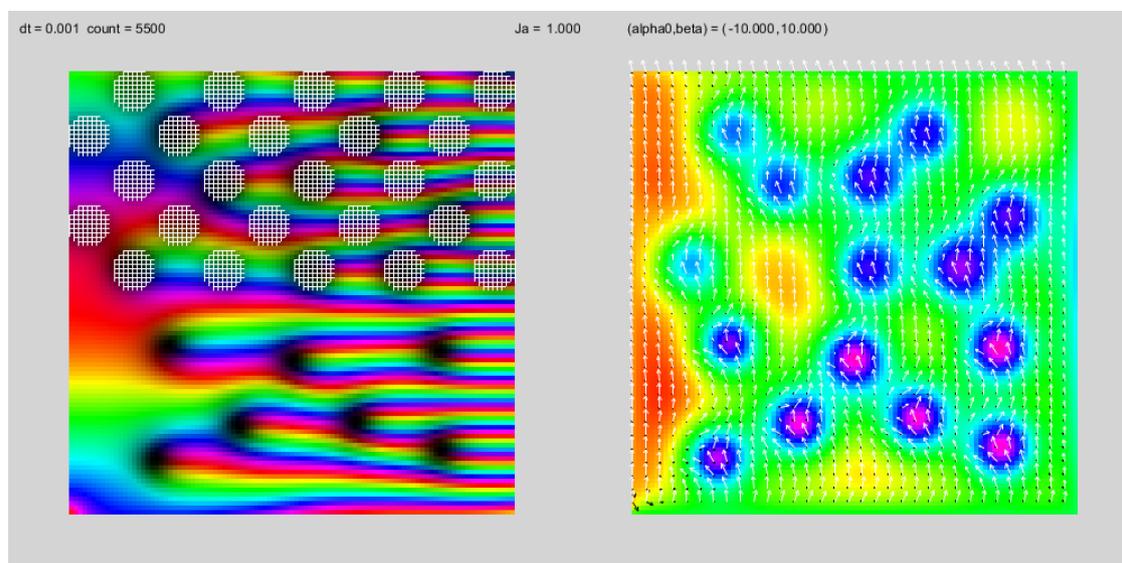


Fig 3.2 量子化磁束と電磁現象の可視化(円状ピン)

3.2 電流、電界を用いたリザーバーコンピューティング

3.2.1 出力予測

まず、ピンがない場合について、リザーバーコンピューティングにより出力の予測を行った。抽出するデータの数が100個、200個、300個の場合について、各波形の予測を行った結果を Fig 3.3、Fig 3.4、Fig 3.5 に示す。

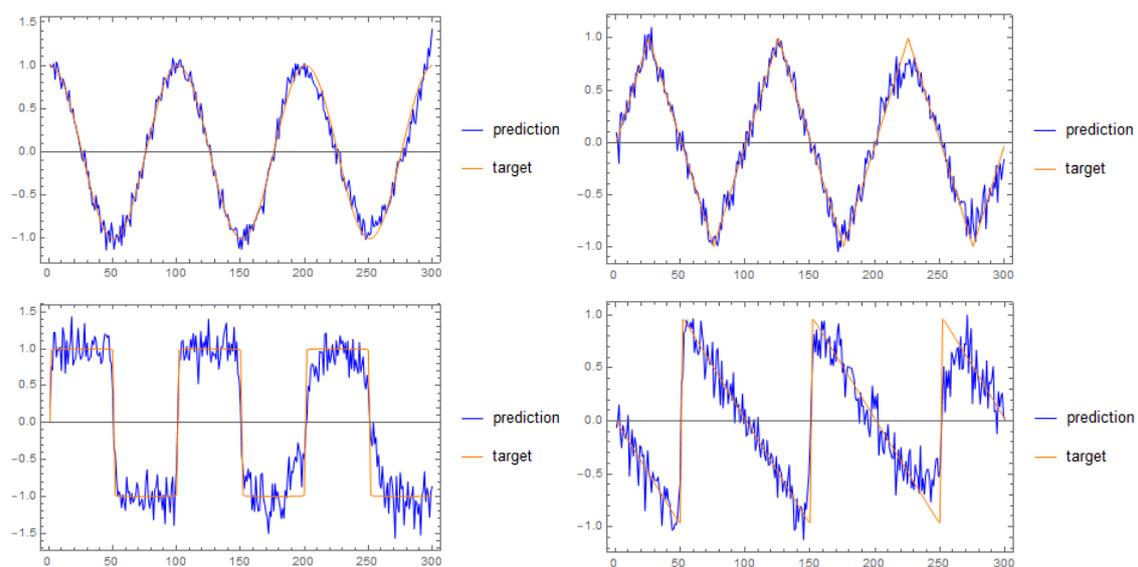


Fig 3.3 抽出データ100個の時の各波形の出力

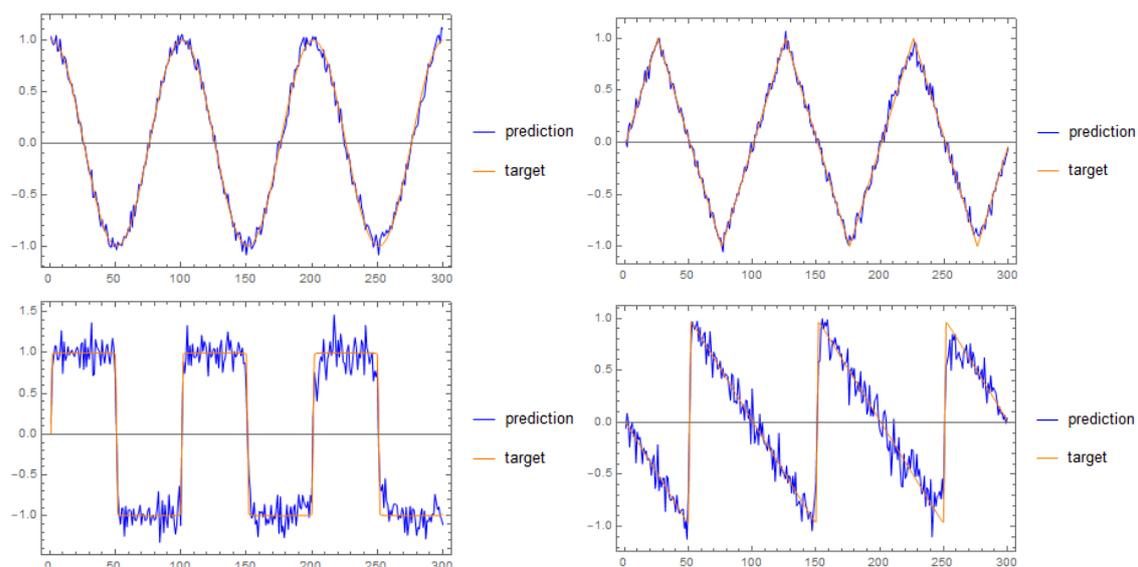


Fig 3.4 抽出データ200個の時の各波形の出力

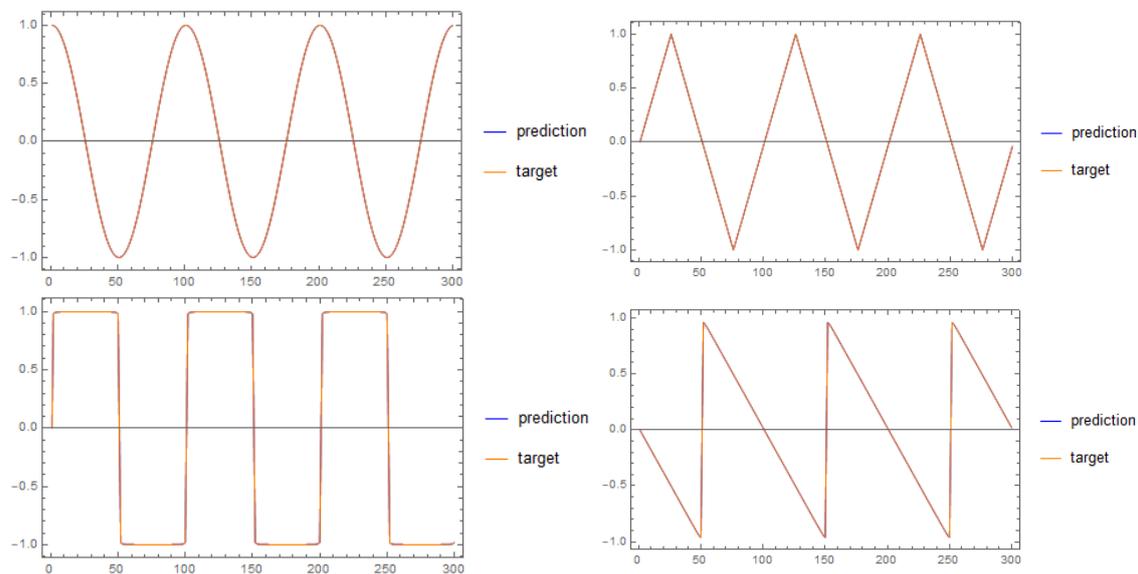


Fig 3.5 抽出データ300個の時の各波形の出力

以上の結果について、まず、抽出する電界の数が多いほど NMSE は小さくなった。これはより多くの地点についての電界の時間変化をとることで重みの値の数が多くなり、和によって信号をより正確に表現できるようになるためだと考える。

3.2.2 抽出データ数と出力予測の精度の相関

3.1.1節の結果を受け、予測する波形を正弦波、三角波、矩形波、鋸波として、抽出する電界の数を50個から350個まで、50個刻みで大きくしていったときの NMSE の変化を表すグラフを Fig 3.6 に示す。

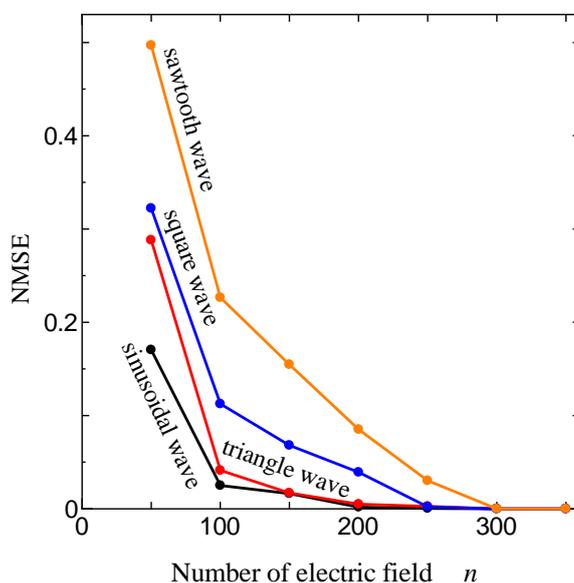


Fig 3.6 データ抽出数と NMSE の相関

どの波形についても、リザーバー層のノードとして用いる電界の数 n を増加させると NMSE が小さくなり、300 個でほぼ0となっている。これは、本研究で用いた各波形は300個の離散的な数値で表現しており、それを表現するのに300個の電界があれば十分であるためと考える。

また、鋸波、矩形波、三角波、正弦波の順番で NMSE が大きいことがわかる。これは波形のスペクトルに起因するものと考えられる。鋸波や矩形波、三角波の式は正弦波の合成で表され、高調波をふんだんに持つ。こういった波形を和で正確に表現するには、正弦波より多くの値を必要とするはずである。このために NMSE には顕著な差が表れたと考える。

3.2.3 ピンの挿入

続いて、二次元超伝導領域にさまざまな配置で円状ピンを配置した場合について、波形の予測にどのような影響が出るかシミュレーションを行った。

まず、Fig 3.7 のように、超伝導領域の上部に規則的に 25 個の円状ピンを配置した場合について、各波形の NMSE を計算した。その結果を Fig 3.8 に示す。

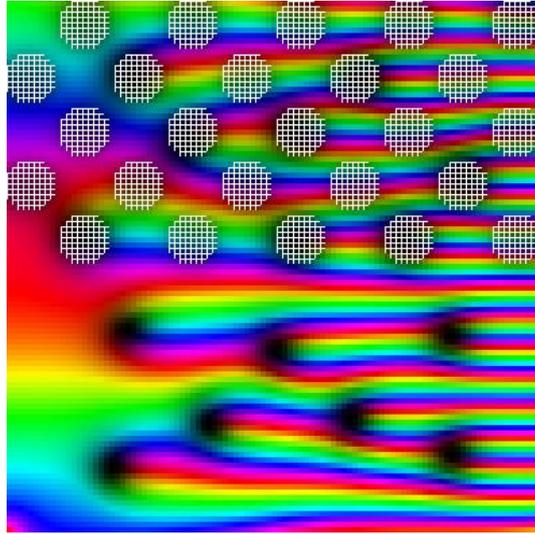


Fig 3.7 円状ピンの配置

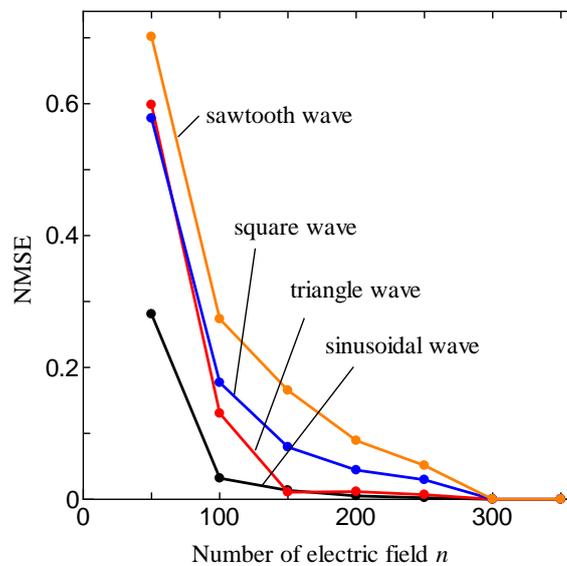


Fig 3.8 円状ピンを 25 個規則的に配置した時の NMSE

次に、Fig 3.9 のように、重複のないようにランダムに 25 個の円状ピンを配置した場合について、NMSE を計算した。その結果を Fig 3.10 に示す。

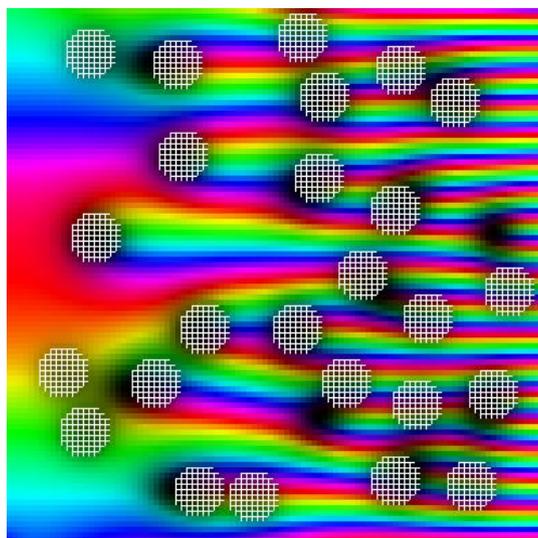


Fig 3.9 円状ピンの配置(25箇所、ランダム)

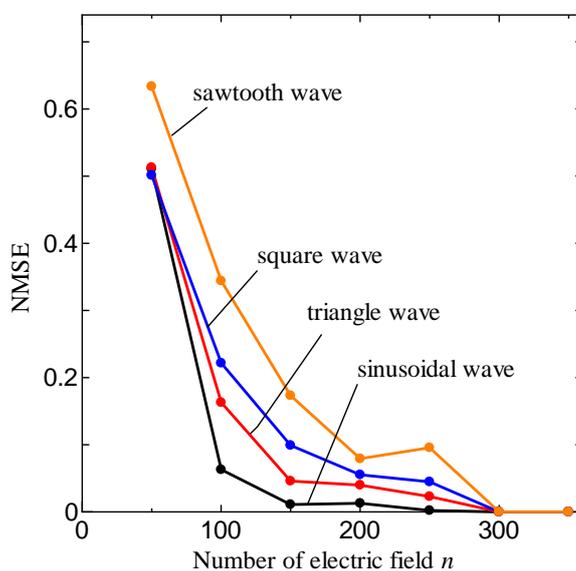


Fig 3.10 円状ピンをランダムに 25 個配置したときの NMSE

Fig 3.9、Fig 3.10 より、300個抽出することで NMSE はほぼ 0 になるという点はピンを入れない場合と同様であったが、それ以外の個数については全体的に NMSE が大きいという結果になった。これは磁束ピンニングにより磁束の運動が止められた箇所が発生した結果、電磁誘導による電圧の発生が抑えられたことで電界の変化が小さくなり、電流と電界の対応関係をうまく学習できなかったことによるものと考えられる。

次に、鋸波予測について、ピンの数が与える影響を調べるために、ランダムに配置するピンの数を変化させたときの NMSE を計算した。その結果を Fig 3.11 に示す。

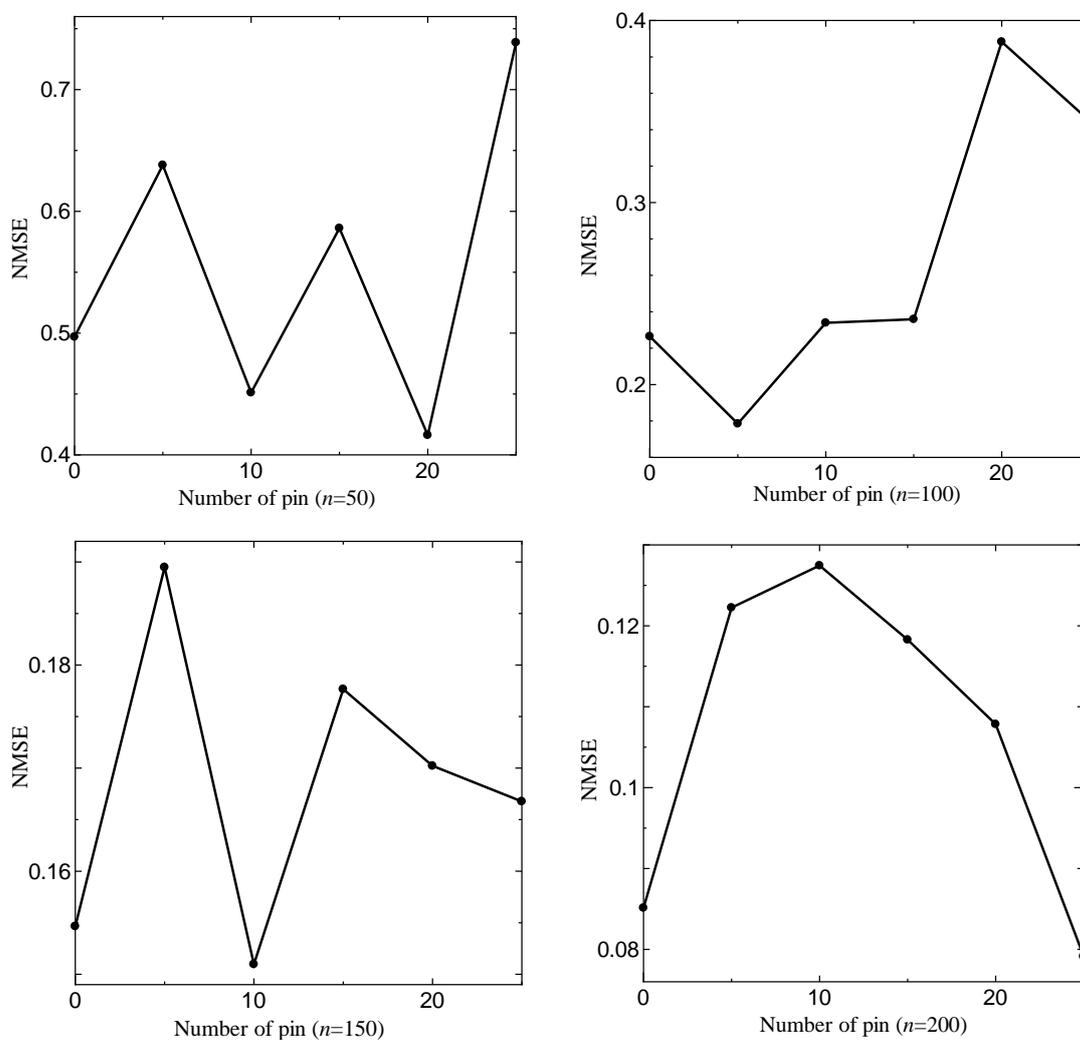


Fig 3.11 ピンの数を変化させたときの NMSE

ピークの位置やグラフの形状はばらばらで、規則性は見られなかった。これは電界を抽出する箇所やピンを導入する位置がランダムであることによるものだと考えている。

3.2.4 入力の変更

入力(電流)を正弦波から矩形波に変更して電界を抽出し、出力を行った。その結果を Fig 3.12 に示す。

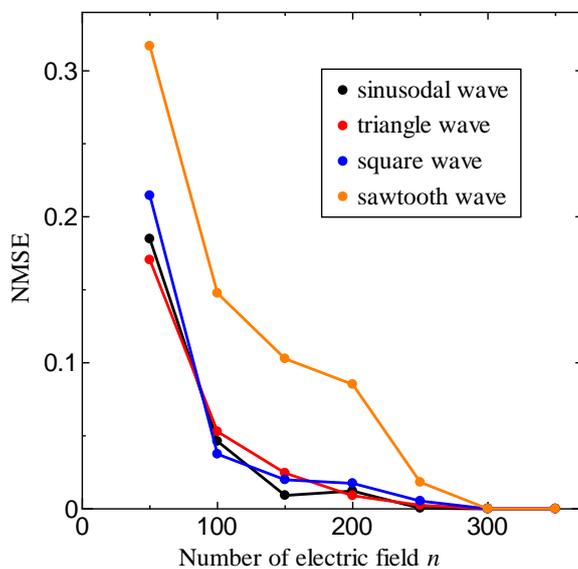


Fig 3.12 矩形波入力の際の各波形における NMSE

矩形波入力の際と正弦波入力の際の NMSE の差をわかりやすくするため、電界の各抽出数について矩形波の NMSE から正弦波の NMSE を引きプロットした。その結果を Fig 3.13 に示す。マイナス値をとると正弦波よりよい NMSE が得られていることになる。

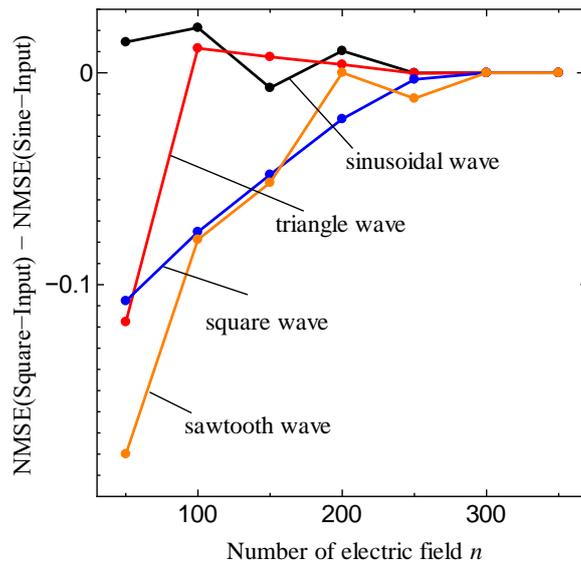


Fig 3.13 矩形波入力と正弦波入力の NMSE の差

正弦波の予測については NMSE が大きくなったが、矩形波の予測については NMSE が大幅に小さくなった。これは、入力を正弦波→矩形波としたことで矩形波的に変化する電流に駆動される電界の予測がうまくいったものと考えられる。また、三角波、鋸波の予測についても、電界の抽出数によっては NMSE が改善された。これは矩形波と正弦波の形状の違いによるものと考えている。正弦波は時間によりさまざまな値をとるが、矩形波は2つの値に限られる。2つの電流値に対する電界の対応を学習するほうが、多様な値に対する電界の対応の学習をするより容易であるためと考える。

第4章 まとめ

今回の研究では、AFIによる2次元超伝導平面における量子化磁束線とそれに係る電磁現象の可視化およびリザーバーコンピューティングへの応用を行った。

Processingを用いてAFIによる2次元超伝導領域の実装を行った。ピンを導入することが量子化磁束の運動にどのような影響をもたらすのか、シミュレーションを通して確認することができた。

Processingにより実装した二次元超伝導領域に電流を印加し、その印加電流値を周期的な正弦波として変化させたときの電界の変化をリザーバー層のノードとしてリザーバー計算を行った。正弦波、三角波、矩形波、鋸波について予測を行い、予測の精度を表す指標であるNMSEを計算することで抽出数やピンの導入が与える影響を調べた。結果として、どの波形についても、抽出する電界の地点の数を増加させるとNMSEが小さくなり、300箇所抽出するとNMSEはほぼ0となった。また、矩形波や鋸波といった、その式が多くの正弦波の合成で表される、高調波成分をふんだんに持つ波形ほどNMSEは大きくなり、予測の精度が落ちた。ピンを導入して同様に予測を行った場合、すべての波形について、電界の抽出数によってはNMSEが大きくなった。入力信号を正弦波から矩形波に変化させると、矩形波予測については全体的に小さいNMSEが得られたが、正弦波、三角波、鋸波については電界の抽出数によってさまざまなNMSEが得られた。

今後の課題として、ピンを配置することでは達成できなかった、より少ない電界の抽出数でより小さいNMSEを得る方法を模索していきたい。また、超伝導は複雑な系であるので、より複雑な波形の予測やタスクについて調査していきたい。

参考文献

- [1]中嶋浩平, 井上克馬、國康夫吉、Sophon Somlor、Tito Pradhono Tomo、Alexander Schmitz. 柔らかいマテリアルの変形を用いた情報処理
- [2]松下照男. 電磁気学と超伝導(完成版).
- [3]松下照男. 磁束ピンニングと電磁現象. 1994年12月
- [4]松野哲也. AFIをはじめよう ver.6. 2020年1月
- [5]犬伏正信, 吉村和之. リザーバーコンピューティングに適した力学系の特性と構造. 2019年2月

謝辞

本研究に取り組むにあたり、多くの方から多大なご助力を賜りました。まず、指導教官である小田部荘司教授にお礼申し上げます。研究におきましては進捗の面倒を見て頂いただけでなく、超伝導という理論を丁寧にご教授して下さったり、学会発表の機会をご提案して頂きました。その他にも海外の大学との交流の場を設けて下さったりとさまざまなご支援を頂きました。

次に、有明高専の松野哲也教授にお礼申し上げます。AFI という非常に興味深い内容について、分かりやすい貴重な資料を提供してくださりました。

次に、AFI という共通のテーマについて、一緒に取り組んだ川畑唯一さんにお礼申し上げます。質問の回答が大いに研究の役に立ちました。

最後に、お世話になった小田部研究室の皆さんに深く感謝いたします。

研究業績

発表

1. 上田天馬、木下雄士、米中友浩、一木悠人、小田部荘司、松下照男、木内勝
「縦磁界効果を用いた10kA 級超伝導直流電力ケーブルの設計」2020 年度応用物理学
会九州支部学術講演会、オンライン、令和 2 年 11 月 29 日