

ゲージ場中の量子拡散シミュレーションのための数値積分アルゴリズム

An integration algorithm to simulate diffusions of quantum particles in the gauge field

○ 松野 哲也 (有明高専)

○ Tetsuya Matsuno (Ariake College)

E-mail: tetsuya@ariake-nct.ac.jp

ゲージ場中の量子拡散現象を効率的にシミュレートするために、時間領域で陽的に数値積分する新しいアルゴリズムを提案した。ここでは、単純化した時間依存ギンツブルグ・ランダウ (TDGL) 方程式

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

に基づき 2次元空間におけるシミュレーションを実行しオーダーパラメータ ψ の振る舞いを調べアルゴリズムの性能検証を行った。ただし、 \mathbf{A} はベクトルポテンシャル、 $g (= 1)$ は量子の電荷、 $\alpha (> 0)$ は超伝導性の強さ、 $\beta (< 0)$ は ψ の定常状態における飽和値を反映するパラメータである。

ここでは、単純化 TDGL 方程式のラプラシアン項の数値積分に伴う空間に関する離散化の際にスタガード格子を導入した。これによって、カノニカル共役変数ペアの時間発展を記述する形の一般化ハミルトン方程式が得られた。したがって時間に関する離散化の際に、シンプレクティック法類似の手法を導入することができた。またリンク変数法、および ψ の実部と虚部をカノニカル共役ペアとみなすことによりゲージ場を適切に実装できた。

理論解析により、 $\alpha = \beta = 0$ かつ $\mathbf{A} \equiv 0$ のとき、本アルゴリズムは数値的に無条件安定であり、かつ時間刻み幅 Δt に関して 2 次の精度となることがわかった。さらに数値シミュレーションにより、図 1 に示す様に、本アルゴリズムは \mathbf{A} および非線形項が存在するときでも 2 次の精度であることがわかった。また、 Δt を Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) 条件を満たすための境界線上まで大きくしても数値的安定性が保たれることがわかった。

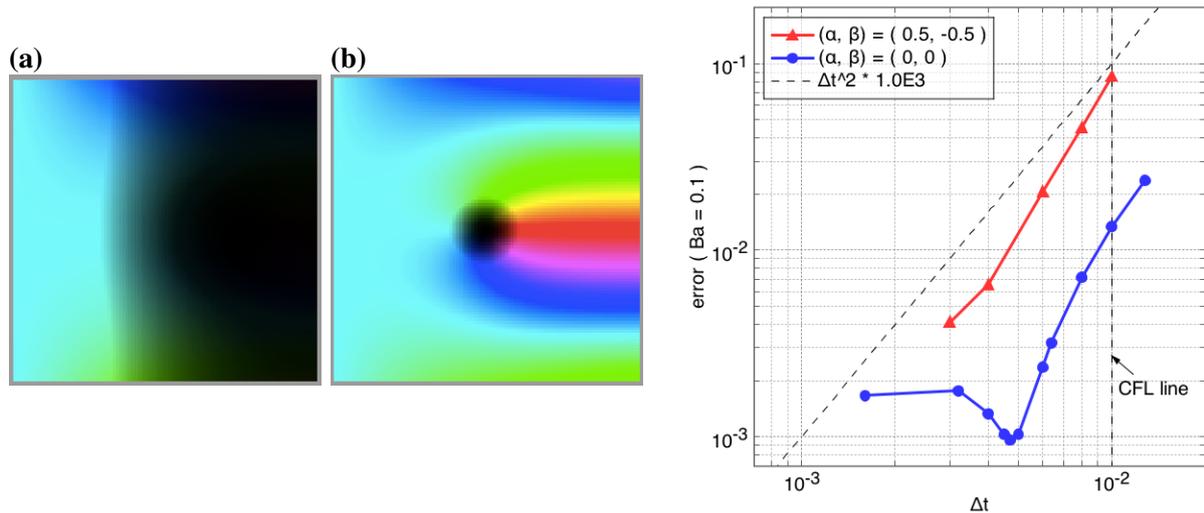


図 1: 左側のシミュレーション画像:(a) 非線形項なし ($(\alpha, \beta) = (0, 0)$), (b) 非線形項あり ($(\alpha, \beta) = (0.5, -0.5)$). 表示の明るさは $|\psi|$, 表示の色相は ψ の位相に対応する. (a), (b) とともに十分時間が経過した定常状態のときの ψ を可視化した. 右側のグラフ: 1 格子点当たりの平均 2 乗誤差の平方根の時間刻み幅 Δt 依存性. ●印と▲印はそれぞれ、非線形項なし (a) の場合と、あり (b) の場合を示す. 図中の CFL line とは Courant-Friedrichs-Lewy 条件の境界線をあらわす. シミュレーション領域サイズ: $L_x = L_y = 10$, 格子点: 100×100 (空間刻み幅: 0.1), 境界条件: 左端 ($x = 0$) はディリクレ型 ($\psi \equiv 1 + i0$), 右端 ($x = L_x$)・上端 ($y = L_y$)・下端 ($y = 0$) はノイマン型 ($(\nabla - ig\mathbf{A})\psi \equiv 0$). 初期条件: $\psi(x, y, 0) = 1.0$. ベクトルポテンシャル: $\mathbf{A} = (0, B_a x)$ ただし $B_a = 0.1$. 以上の座標表記は左下点を原点とした.