様　式　Ｃ－１９、Ｆ－１９－１、Ｚ－１９　（共通）

科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

令和　５年　６月２６日現在

機関番号：５７１０２
研究種目：基盤研究(C)（一般）
研究期間：2020～2022
課題番号：２０Ｋ０４５８６

研究課題名（和文）超伝導体および超流体における巨視的波動関数の高速数値シミュレーション手法の開発

研究課題名（英文）Development of a Fast Numerical Simulation Method for Macroscopic Wave Functions in Superconductors and Superfluids

研究代表者
松野　哲也（Matsuno, Tetsuya）

有明工業高等専門学校・創造工学科・教授

研究者番号：８０２４３９２１

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　3,200,000円

研究成果の概要（和文）：ゲージ場存在下の巨視的量子現象である超伝導現象における量子化磁束（磁場を伴った量子渦）および回転超流体における量子渦現象を記述する量子力学的方程式である時間依存ギンツブル-グランダウ方程式や時間依存グロス-ピタエフスキー方程式を効率的に数値計算するための陽的数値積分法を提案した．その数値積分法は極めて安定性が高くなおかつ構造保存特性を有するので量子渦の複雑なダイナミクスを効率的に解析することが可能となる．

研究成果の学術的意義や社会的意義
本研究において提案された陽的構造保存数値積分法は安定性と構造保存の観点から極めて良い特性を有することが明らかとなった．この手法により大規模量子シミュレーションを様々なパラメータで繰り返し試行することが容易になる．それゆえ本手法は，大電流超伝導送電線のための材料設計，超高速超低消費電力の超伝導デバイスの開発，量子コンピュータのためのデバイスの最適設計，磁場（ゲージ場）に関わる新奇量子デバイスの開発や超流体の量子渦構造の数値的研究による乱流現象の解明など，量子工学・物理学の分野に大きく貢献することが期待される．

研究成果の概要（英文）：We propose an explicit numerical integration method for efficient numerical computation of the time-dependent Ginzburg-Grandau equation and the time-dependent Gross-Pitaevsky equation, which are quantum mechanical equations describing quantized magnetic flux (quantum vortex with magnetic field) in superconductivity, a macroscopic quantum phenomenon in the presence of a gauge field, and quantum vortex phenomena in rotating superfluids. The numerical integration method is extremely stable. The numerical integration method is extremely stable and has structure-conserving properties, which makes it possible to efficiently analyze the complex dynamics of quantum vortices.

研究分野：数理物理および物性基礎関連

キーワード：構造保存数値積分法　巨視的波動関数　ゲージ場　量子化磁束　量子渦　超伝導体　超流体

１．研究開始当初の背景
超伝導体内部の量子化磁束および回転超流体内の量子渦の動的振る舞いを記述する非線形複素偏微分方程式である時間依存ギンツブルグ・ランダウ（Time-Dependent Ginzburg-Landau: TDGL）方程式や時間依存グロス・ピタエフスキー（Time-Dependent Gross-Pitaevskii: TDGP）方程式（あるいは非線形シュレディンガー方程式）を効率よく数値的に解くことは工学的にも理学的にも重要である．しかしながら，これまで上記方程式を数値的に解くための高安定な陽的数値積分法がなかったために時間刻み幅を Courant-Friedrichs-Lewy 基準（CFL 基準）と比べて十分に小さくするか，時間刻み幅を比較的大きくとることができる陰的解法が用いられることが多く，単位シミュレーション時間当たりの計算量を小さくすることは困難であった．近年は GPU 並列処理による数値演算高速化のためのテクノロジーが急速に発達してきている．並列化による高速化には，ハードウェア構造との相性のよさから陽的解法が適しているので，高安定かつ記憶領域が少ない陽的数値積分法が望まれていた．
物理学的数値シミュレーションのための陽的数値積分法において安定性の他に重要なことの一つは対象としている物理系を記述している方程式：ここでは TDGL 方程式や TDGP 方程式が有する対称性を保存する（あるいは構造保存である）ことである．例えば TDGP 方程式で記述できる量子乱流現象においては多くの渦が絡み合った状態においてエネルギーが様々な空間スケールの間を流れる．このような状況で関心のある物理量の十分な数値的サンプルを得るために全エネルギーの保存がかなり長いシミュレーション時間保持される必要がある．したがって，望まれる数値積分法はドリフト特性を持たないこと，すなわち全エネルギーの一方向的な増加あるいは減少というアーティファクトが存在しないことが望まれる．また例えば TDGL 方程式で記述できる第２種超伝導体における磁束フロー状態においては定常的エネルギー散逸が生じておりこれが外部電源から供給されるエネルギーと釣り合っている．このような散逸系においてはエネルギー供給を止めた時の系のエネルギーは厳密に単調減少するので数値積分法にも厳密に単調減少する特性が望まれる．
理学および工学の分野において量子力学的ダイナミクスの数値シミュレーションは重要であり線形シュレディンガー方程式のための陽的構造保存数値積分法は既に提案されていた．しかしながらゲージ場存在下で発生する量子渦の動力学の数値計算のための高安定で構造保存特性を有する実装容易な陽的数値積分法は提案されていなかった．

２．研究の目的
本研究の目的は，ゲージ場存在下で発生する量子渦の動力学を TDGL・TDGP 方程式ベースで数値解析するための高安定かつ構造保存特性を有する陽的数値積分アルゴリズムを構築することである．ここでゲージ場とは，TDGL 方程式で記述される第２種超伝導体における量子化磁束に関する電磁現象を取り扱う場合は磁場に対応するベクトルポテンシャルを意味し，また TDGP 方程式で記述される回転超流体における量子渦に関する現象を取り扱う場合は回転座標変換に伴って等価的に生じる有効ゲージ場を意味する．

３．研究の方法
本研究では TDGL・TDGP 方程式を実物理空間における時間発展方程式として取り扱う．当該偏微分方程式をまずは空間に関して離散化して多次元常微分方程式に変換する．本研究における基本方針は空間離散化格子点上で標本化される波動関数値は複素数オブジェクトとして取り扱うことである．ここでは空間離散化格子をチェッカーボード的に２分割する（空間離散化格子を２部グラフと見做す）ことによって２つの共役複素多次元状態ベクトルを構成する．ゲージ場は格子点と格子点を結ぶ辺の上で定義されるリンク変数として組み込まれる．その上でこの複素状態ベクトル対に（ゲージ場および非線形ポテンシャル項を組み込んだ）共役な時間発展演算子対を逐次的に作用させて時間発展させていく数値積分スキームを構成する．
得られた数値積分スキームの安定性および構造保存性を理論的に解析し，得られた解析結果を数値的に検証する．

４．研究成果
本研究において提案された陽的数値積分法を AFI（Affine Integrator）と呼ぶことにする．図１に AFI を用いた数値計算例を示す．ここでは TDGP 方程式ベースの数値計算により回転超流体における量子渦の運動を再現した様子を示した．図２にはエネルギーの振る舞いを示す．
ここではよく用いられている陽的解法のひとつである４次精度のルンゲ・クッタ法（RK4）との比較検討を行った．計算のための記憶領域について RK4 ではシミュレーション領域の２倍は最低必要であることに対し AFI では最小（1 倍）でありデータ転送過程がボトルネックとなる傾向にある並列処理において本手法は大変有利であることが明らかとなった．さらに AFI は 4 次精度への拡張が可能であり，このとき計算精度，安定性，計算量，記憶領域の各観点において AFI は RK4 に匹敵するか凌駕することが示された．また，AFI は線形無散逸系（シュレディン

ガー方程式）に適用された場合，全エネルギーを厳密に（丸め誤差レベルで）保存することが理論的に示されなおかつ数値的に確認された（図２参照）．

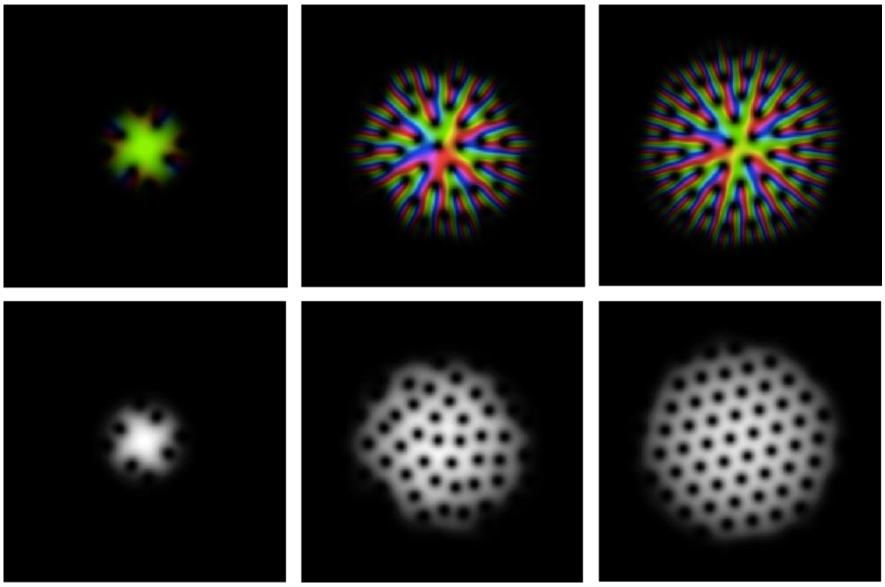

図１：回転超流体における量子渦の時間発展の計算例．上図の明度は超流体分子に関する波動関数の振幅，色相は位相に対応する．下図は色を取り除いたもの．時間が経つにつれて量子渦の三角格子が形成されていく様子が分かる．

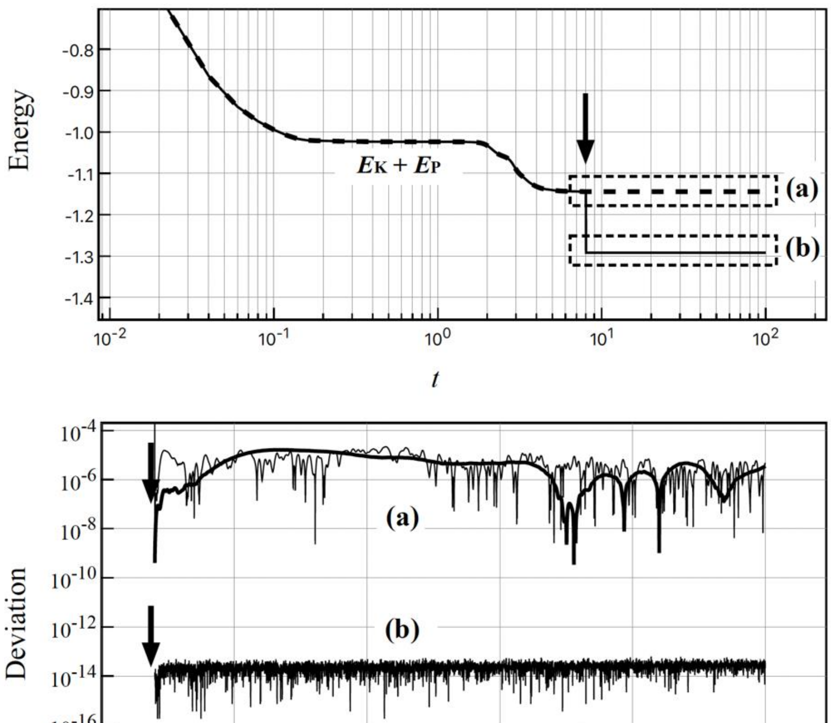

図２：TDGP 方程式ベースの数値シミュレーション（図１に対応）におけるエネルギー（運動エネルギーE_KとポテンシャルエネルギーE_Pの和）の振る舞い．エネルギーの振る舞いにはドリフト観測されず良い特性を示す（上段および下段(a)）．またポテンシャルの非線形部分をゼロにして方程式を線形にした場合エネルギーは丸め誤差のオーダーの変動しか生じないという著しく良い特性が確認された（上段および下段(b)）．

さらに，本研究で取り扱ったTDGL・TDGP方程式に対してAFIは構造保存特性を持つことが理論的に明確に示されなおかつ数値的に確認された．つまり線形系の場合のエネルギー厳密保存特性（図２）に加え，ポテンシャル項に３次の非線形性がある場合においても修正エネルギーは厳密に保存されることが明らかとなった．つまり AFI は構造保存の指標としての修正エネルギーという保存量を持つことがわかった．図３に数値計算の概略を図４に修正エネルギーの振る舞いを示す．

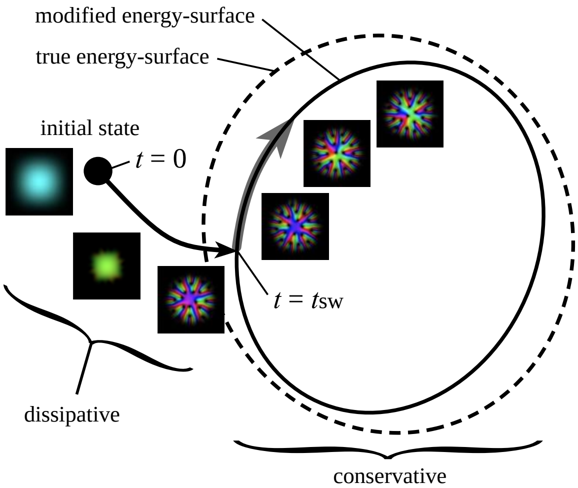

図３：TDGP 方程式ベースの数値計算の概略図．シミュレーションの開始時刻 t=0 からしばらくは散逸モードでありこの期間系はエネルギー散逸が生じており修正エネルギーは厳密に単調減少する．スイッチング時刻 t_{sw} 以降は保存モードとなりこれ以降系の修正エネルギーは厳密に保存される．なお修正エネルギーと真のエネルギーの差は空間離散化のための空間刻み幅の２乗のオーダーであり十分小さい．

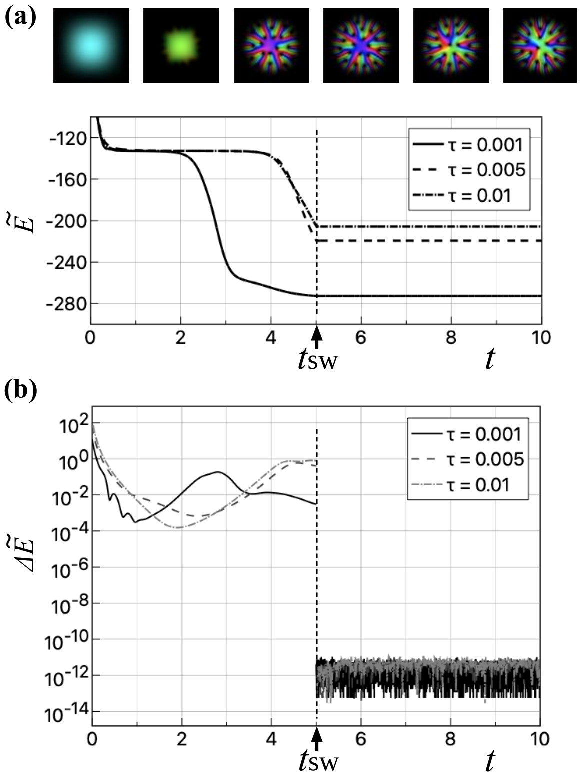

図４：TDGP 方程式ベースの数値計算における修正エネルギーの振る舞い．散逸モードでは厳密に単調減少し保存モードでは厳密に保存されることが示されている．様々な時間刻み幅で検証を行った．ここで言う「厳密」とは数値計算においては丸め誤差オーダーの精度の変動であることを意味する．理論的には文字通り厳密であることが示されている．

1 次元 TDGP 方程式は解析解：ダークソリトン解を持つ．本研究ではゲージ場存在下でのダークソリトン解を構成し，これを AFI の数値誤差検証に利用した．なおダークソリトンの運動は超伝導体や超流体における量子渦の運動に対応させることができる．比較のため RK4 を用いた．図５に結果を示す．ここでは４次の AFI と４次の RK の数値誤差を調べた．

この結果によれば数値誤差は RK の方が小さい．しかしながら，ここに示されているように，AFI は数値的に極めて安定であり CFL 基準以上でも機能している．一方 RK は CFL 基準よりもかなり小さな時間刻み幅で不安定化することがわかる．

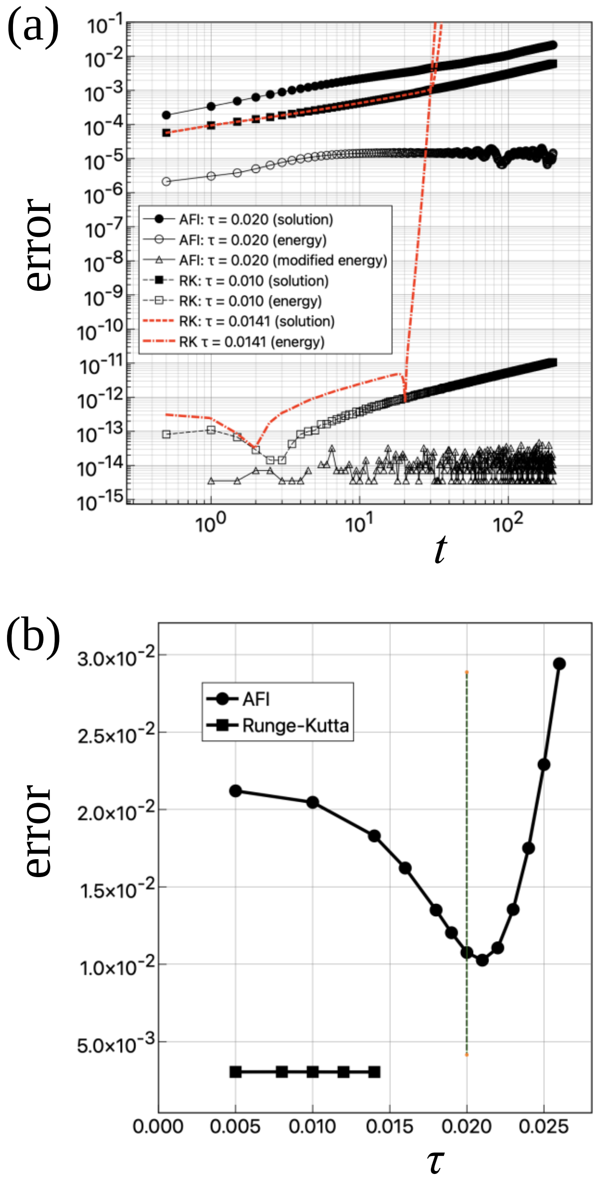

図５：数値誤差の評価．(a)誤差の時間的振る舞い．(b)誤差の時間刻み幅（τ）依存性．τ=0.020 における縦方向の点線は CFL 基準を示す．

以上，まとめると本研究において提案された AFI は安定性と構造保存の観点から極めて良い特性を有することが明らかとなった．この AFI により大規模量子シミュレーションを様々なパラメータで繰り返し試行することが容易になる．それゆえ本手法は，大電流超伝導送電線のための材料設計，超高速超低消費電力の超伝導デバイスの開発，量子コンピュータのためのデバイスの最適設計，磁場（ゲージ場）に関わる新奇量子デバイスの開発や超流体の量子渦構造の数値的研究による乱流現象の解明など，量子工学・物理学の分野に大きく貢献することが期待される．

５．主な発表論文等

〔雑誌論文〕　計2件（うち査読付論文　2件／うち国際共著　0件／うちオープンアクセス　0件）

１．著者名 Matsuno Tetsuya、Otabe Edmund Soji、Mawatari Yasunori	４．巻 89
２．論文標題 Explicit Integrators Based on a Bipartite Lattice and a Pair of Affine Transformations to Solve Quantum Equations with Gauge Fields	５．発行年 2020年
３．雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	６．最初と最後の頁 054006～054006
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.89.054006	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

１．著者名 Matsuno Tetsuya、Otabe Edmund Soji、Mawatari Yasunori、Tabata Ryo	４．巻 92
２．論文標題 Explicit Structure-Preserving Integrators for Dissipative and Conservative Nonlinear Time Dependent Schr?dinger Equations with Gauge Fields	５．発行年 2023年
３．雑誌名 Journal of the Physical Society of Japan	６．最初と最後の頁 074004～074004
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.7566/JPSJ.92.074004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 －

〔学会発表〕　計6件（うち招待講演　0件／うち国際学会　0件）

１．発表者名 松野哲也，小田部荘司，馬渡康徳，田端 亮
２．発表標題 量子渦シミュレーションのための陽的構造保存数値積分法
３．学会等名 日本物理学会第77回年次大会
４．発表年 2022年

１．発表者名 松野哲也，東陽一，馬渡康徳，小田部荘司
２．発表標題 時間依存ボゴリューボフ-ドジャン方程式のための エネルギー保存数値積分法
３．学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
４．発表年 2021年

1．発表者名 松野 哲也，小田部 荘司，馬渡 康徳
2．発表標題 超伝導体における電磁現象のシミュレーションのための陽的数値積分法
3．学会等名 日本物理学会2020年秋季大会
4．発表年 2020年

1．発表者名 松野 哲也，小田部 荘司，馬渡 康徳
2．発表標題 陽的数値積分法AFIによる時間依存シュレディンガー方程式の数値計算における保存量の振る舞い
3．学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4．発表年 2021年

1．発表者名 上田 天馬，川畑 唯一，闇 洪，小田部 荘司，松野 哲也，馬渡 康徳
2．発表標題 新たな陽的数値積分法を用いた2次元の超伝導体内の量子化磁束運動の可視化
3．学会等名 第68回応用物理学会春季学術講演会
4．発表年 2021年

1．発表者名 松野哲也，小田部荘司，馬渡康徳
2．発表標題 量子渦の運動を記述する時間依存グロス・ピタエフスキー方程式のための幾何学的数値積分法
3．学会等名 第70回応用物理学会 春季学術講演会
4．発表年 2023年

〔図書〕　計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

Affine integrator for the Fermi-Pasta-Ulam system
https://www.youtube.com/watch?v=sSj8XwTS2qQ
The Affine Integrator for the TDGP equation 3D
https://www.youtube.com/shorts/ePjuYCKy3Ns
The Affine Integrator for the TDGP equation
https://www.youtube.com/watch?v=1IW6twBvmvE
The Affine integrator for the TDGL equation
https://www.youtube.com/watch?v=BDVNePEE8pg
Andreev reflections by the SNS boundary
https://www.youtube.com/watch?v=etROHNb1WJ8

6．研究組織

	氏名 （ローマ字氏名） （研究者番号）	所属研究機関・部局・職 （機関番号）	備考
研究分担者	小田部　荘司 (Otabe Soji) (30231236)	九州工業大学・大学院情報工学研究院・教授 (17104)	

7．科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕　計0件

8．本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関