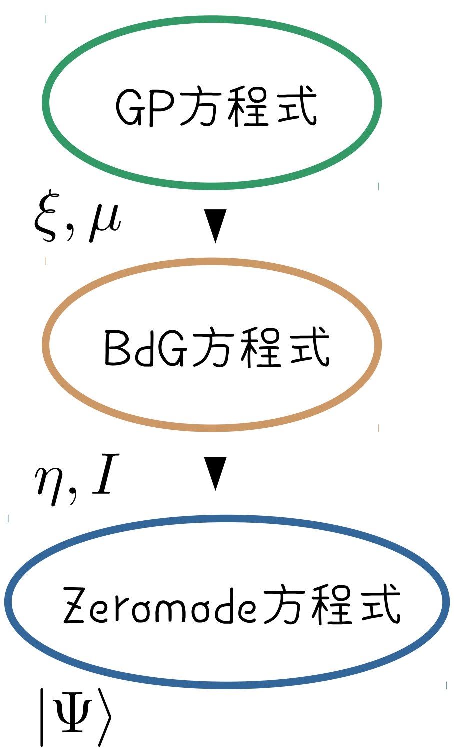
# 3次元有限温度系IZMFにおける
# Zeromode-BdG間相互作用を取り入れた
# 定式化に向けて

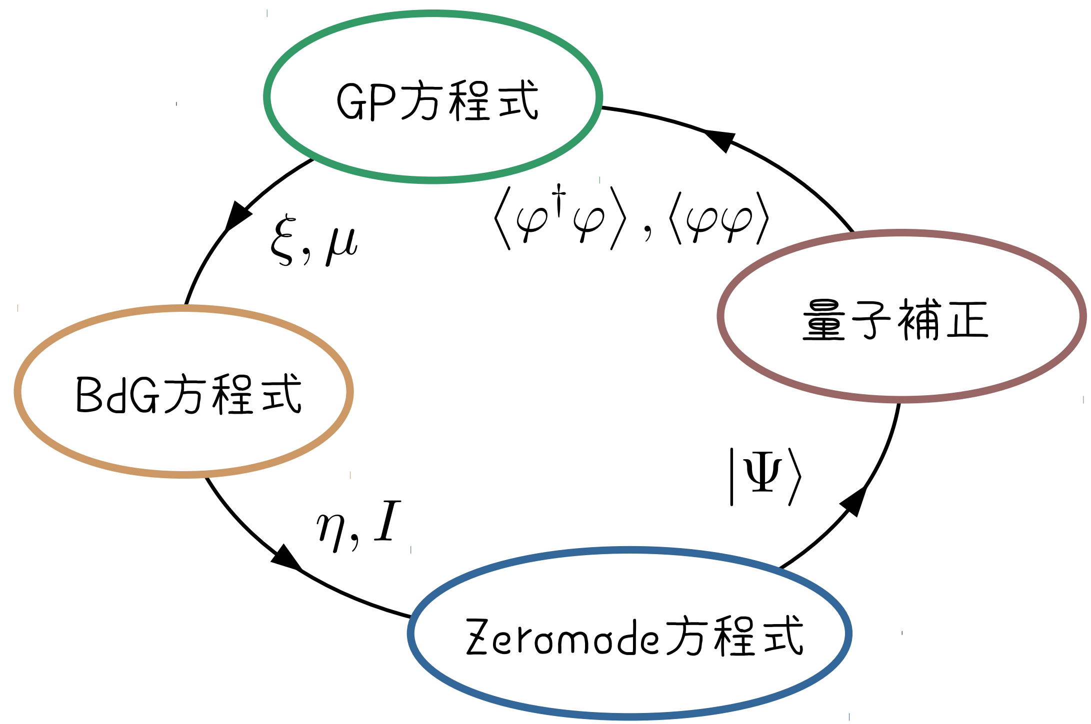
鳥居 優作

# 量子補正を取り入れた有限温度IZMF

## 自己無撞着

- 凝縮相・非凝縮相の相互作用効果としての量子補正項
- GP方程式に取り込まれ自己無撞着的に決定される



# 扱うモデル

3次元有限温度調和トラップ系

## 非摂動ハミルトニアン

- ゼロモード部と励起部に分かれる.

$$H_u = H_1 + H_2 + [H_3 + H_4]_{QP} = H_{u,z} + H_{u,ex}$$

$$H_{u,z} = -(\delta\mu + 4C)P + \frac{I - 4D}{2}P^2 + 2BQPQ + 2DP^3 + \frac{1}{2}AQ^4 - 2BQ^2 + CQP^2Q + \frac{1}{2}EP^4$$

$$H_{u,ex} = \int d\boldsymbol{x}\left[\varphi_{ex}^\dagger \mathcal{L}\varphi_{ex} + \frac{1}{2}\varphi_{ex}\mathcal{M}^*\varphi_{ex} + \frac{1}{2}\varphi_{ex}^\dagger\mathcal{M}\varphi_{ex}^\dagger\right]$$

$$\mathcal{L} = -\frac{\nabla^2}{2} + \frac{\boldsymbol{x}^2}{2} - \mu + 2g\big(\xi^2 + \langle\varphi^\dagger\varphi\rangle\big) \qquad \mathcal{M} = g\big(\xi^2 - \langle\varphi\varphi\rangle\big) \qquad \varphi = \varphi_z + \varphi_{ex}$$

- 真空もゼロモード部と励起部の直積

$$|0\rangle = |\Psi\rangle_z \otimes |n\rangle_{ex} \qquad H_{\mathrm{u,ex}}\,|\{n_\lambda\}\rangle_{\mathrm{ex}} = \sum_\lambda n_\lambda\omega_\lambda\,|\{n_\lambda\}\rangle_{\mathrm{ex}} \qquad H_{\mathrm{u,z}}\,|\Psi_\nu\rangle_{\mathrm{z}} = E_\nu\,|\Psi_\nu\rangle_{\mathrm{z}}$$

# 有限温度IZMFのいま

## 量子補正

- 量子補正は本来Heisenberg描像の期待値$\left\langle \varphi_H^\dagger \varphi_H \right\rangle$
- 現状では最低次のみ$\left\langle \varphi_H^\dagger \varphi_H \right\rangle = \langle U^{-1} \varphi^\dagger \varphi U \rangle \simeq \langle \varphi^\dagger \varphi \rangle$

$$\langle \varphi^\dagger \varphi \rangle = \langle \varphi_{ex}^\dagger \varphi_{ex} \rangle_{ex} + \langle \varphi_z^\dagger \varphi_z \rangle_z$$

## 熱力学関数

- 比熱も現状では非摂動部しか取ってない

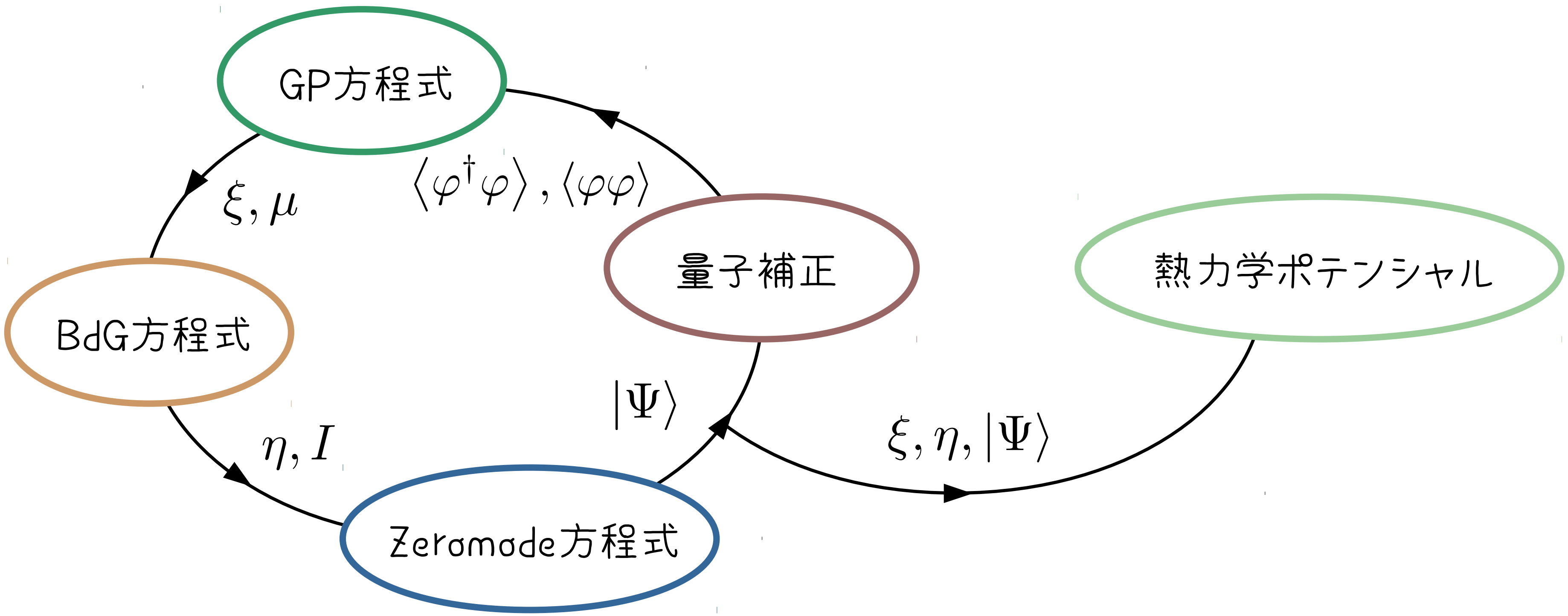
$$C_v = \frac{\partial \mathcal{E}_{\mathrm{total}}}{\partial T} = \frac{\partial \langle H_u \rangle}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \left( \sum_j \left\langle a_j^\dagger a_j \right\rangle_{\mathrm{ex}} + \langle H_{u,z} \rangle_z \right)$$

**ゼロモード部と励起部のカップリングはない**

# めざすところ

## 摂動計算

- 「量子補正」と「熱力学関数」
- 今回は**「熱力学関数」**について摂動計算
- グランドポテンシャル(分配関数)を通じて計算



# 計算の手順

**各方程式のつながり**　左の4者間でループを回し，収束したらΩを計算する

GP方程式

$$\left[h_0 - \mu + g|\xi|^2 + 2g\langle\varphi_H^\dagger\varphi_H\rangle\right]\xi + g\langle\varphi_H\varphi_H\rangle\xi^* = 0$$
$$\left[h_0 - \mu + 2g(|\xi|^2 + \left\langle\varphi_H^\dagger\varphi_H\right\rangle)\right]\eta + g(\xi^2 - \langle\varphi_H\varphi_H\rangle)\eta^* = I\xi$$

BdG方程式

$$\begin{pmatrix} \mathcal{L}_l & \mathcal{M} \\ -\mathcal{M}^* & -\mathcal{L}_l \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_{n,l} \\ v_{n,l} \end{pmatrix} = \omega_{n,l}\begin{pmatrix} u_{n,l} \\ v_{n,l} \end{pmatrix}$$

Zeromode方程式

$$H_{\mathrm{u,z}}\left|\Psi_\nu\right\rangle_{\mathrm{z}} = E_\nu\left|\Psi_\nu\right\rangle_{\mathrm{z}}$$

量子補正

$$\left\langle\varphi_H^\dagger\varphi_H\right\rangle \quad \langle\varphi_H\varphi_H\rangle$$

熱力学ポテンシャル

$$\Omega \simeq \Omega_0 - \frac{1}{\beta}\ln(1 - \beta\langle H_{\mathrm{int}}\rangle)$$

# 扱うモデル

## ハミルトニアン

- 摂動部をBdG-ZeromodeおよびBdG-BdGカップリング項に選ぶ

$$H = H_{u,z} + H_{u,ex} + H_{int}$$

$$H_{u,z} = -(\delta\mu + 4C)P + \frac{I-4D}{2}P^2 + 2BQPQ + 2DP^3 + \frac{1}{2}AQ^4 - 2BQ^2 + CQP^2Q + \frac{1}{2}EP^4$$

$$H_{u,ex} = \int d\boldsymbol{x}\left[\varphi_{ex}^{\dagger}\mathcal{L}\varphi_{ex} + \frac{1}{2}\varphi_{ex}\mathcal{M}^{*}\varphi_{ex} + \frac{1}{2}\varphi_{ex}^{\dagger}\mathcal{M}\varphi_{ex}^{\dagger}\right]$$

$$H_{int} = \frac{g}{2}\int d\boldsymbol{x}\left[\varphi_z^{\dagger}\varphi_z^{\dagger}\varphi_{ex}\varphi_{ex} + 4\varphi_z^{\dagger}\varphi_z\varphi_{ex}^{\dagger}\varphi_{ex} + \varphi_z\varphi_z\varphi_{ex}^{\dagger}\varphi_{ex}^{\dagger} + \varphi_{ex}^{\dagger}\varphi_{ex}^{\dagger}\varphi_{ex}\varphi_{ex}\right]$$

## 分配関数

$$Z_{u,z} = \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta H_{u,z}}\right] \qquad Z_{u,ex} = \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta H_{u,ex}}\right] \qquad Z_{int} = \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta H_{int}}\right]$$

# グランドポテンシャルの摂動展開

## 物理量の計算

- グランドポテンシャルを通じて物理量を計算

$$Z = Z_{\mathrm{u,z}} Z_{\mathrm{u,ex}} Z_{\mathrm{int}} \qquad \Omega = -k_B T \ln Z$$

$$N = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V} \qquad C_v = -T\left(\frac{\partial^2 \Omega}{\partial T^2}\right)_{\mu,V}$$

## 摂動展開

- T積の項をどれだけ取り込むかが近似の精度を決める
- 今回は一次まで

$$\begin{aligned} \Omega &= \Omega_0 - \frac{1}{\beta} \ln \left\langle T \exp\left[-\int_0^\beta ds H_{\mathrm{int}}(s)\right]\right\rangle \\ &\simeq \Omega_0 - \frac{1}{\beta} \ln(1 - \beta \langle H_{\mathrm{int}} \rangle) \end{aligned}$$

# グランドポテンシャルの摂動展開

## 摂動ハミルトニアン

$$H_{int} = \frac{g}{2}\int d\boldsymbol{x}\left[\varphi_z^\dagger\varphi_z^\dagger\varphi_{ex}\varphi_{ex} + 4\varphi_z^\dagger\varphi_z\varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex} + \varphi_z\varphi_z\varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex}^\dagger + \varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex}\varphi_{ex}\right]$$

$$\begin{aligned}\langle H_{int}\rangle &= \int d\boldsymbol{x}\Big[\left\langle\varphi_z^\dagger\varphi_z^\dagger\right\rangle_z\left\langle\varphi_{ex}\varphi_{ex}\right\rangle_{ex} + 4\left\langle\varphi_z^\dagger\varphi_z\right\rangle_z\left\langle\varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex}\right\rangle_{ex}\\ &+ \left\langle\varphi_z\varphi_z\right\rangle_z\left\langle\varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex}^\dagger\right\rangle_{ex} + \left\langle\varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex}\varphi_{ex}\right\rangle_{ex}\Big]\end{aligned}$$

## 2次期待値

$$\begin{aligned}\left\langle\varphi_z^\dagger\varphi_z^\dagger\right\rangle_z &= \left\langle\varphi_z\varphi_z\right\rangle_z = -\xi^2\left\langle Q^2\right\rangle_z + \eta^2\left\langle P^2\right\rangle_z\\ \left\langle\varphi_z^\dagger\varphi_z\right\rangle_z &= \xi^2\left\langle Q^2\right\rangle_z + \eta^2\left\langle P^2\right\rangle_z - i\xi\eta\\ \left\langle\varphi_{ex}\varphi_{ex}\right\rangle_{ex} &= \sum_j (2n_j+1)u_j v_j^*\\ \left\langle\varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex}\right\rangle_{ex} &= \sum_j\left[n_j(|u_j|^2+|v_j|^2)+|v_j|^2\right]\end{aligned}$$

$n_j$ はBose-Einstein分布

# グランドポテンシャルの摂動展開

4次期待値

$$
\begin{aligned}
\left\langle \varphi_{ex}^{\dagger}\varphi_{ex}^{\dagger}\varphi_{ex}\varphi_{ex}\right\rangle_{ex} \quad = \quad & \sum_{j_1,j_2,j_3,j_4}\Big[u_{j_1}^{*}u_{j_2}^{*}u_{j_3}u_{j_4}\left\langle a_{j_1}^{\dagger}a_{j_2}^{\dagger}a_{j_3}a_{j_4}\right\rangle_{ex} + u_{j_1}^{*}v_{j_2}u_{j_3}v_{j_4}^{*}\left\langle a_{j_1}^{\dagger}a_{j_2}a_{j_3}a_{j_4}^{\dagger}\right\rangle_{ex} \\
& +u_{j_1}^{*}v_{j_2}v_{j_3}^{*}u_{j_4}\left\langle a_{j_1}^{\dagger}a_{j_2}a_{j_3}^{\dagger}a_{j_4}\right\rangle_{ex} + v_{j_1}u_{j_2}^{*}u_{j_3}v_{j_4}^{*}\left\langle a_{j_1}a_{j_2}^{\dagger}a_{j_3}a_{j_4}^{\dagger}\right\rangle_{ex} \\
& +v_{j_1}u_{j_2}^{*}v_{j_3}^{*}u_{j_4}\left\langle a_{j_1}a_{j_2}^{\dagger}a_{j_3}^{\dagger}a_{j_4}\right\rangle_{ex} + v_{j_1}v_{j_2}v_{j_3}^{*}v_{j_4}^{*}\left\langle a_{j_1}a_{j_2}a_{j_3}^{\dagger}a_{j_4}^{\dagger}\right\rangle_{ex}\Big]
\end{aligned}
$$

Wickの定理で展開・整理

$$
\begin{aligned}
\left\langle \varphi_{ex}^{\dagger}\varphi_{ex}^{\dagger}\varphi_{ex}\varphi_{ex}\right\rangle_{ex} \quad = \quad & \sum_{j_1,j_2}\Big[\big(2|u_{j_1}|^2|u_{j_2}|^2 + u_{j_1}^{*}v_{j_1}v_{j_2}^{*}u_{j_2}\big)n_{j_1}n_{j_2} \\
+ \quad & \big(2\,\mathrm{Re}\left[u_{j_1}^{*}v_{j_1}u_{j_2}v_{j_2}^{*}\right] + 4|u_{j_1}|^2|v_{j_2}|^2\big)n_{j_1}(1+n_{j_2}) \\
+ \quad & \big(2|v_{j_1}|^2|v_{j_2}|^2 + v_{j_1}u_{j_1}^{*}u_{j_2}v_{j_2}^{*}\big)(1+n_{j_1})(1+n_{j_2})\Big]
\end{aligned}
$$

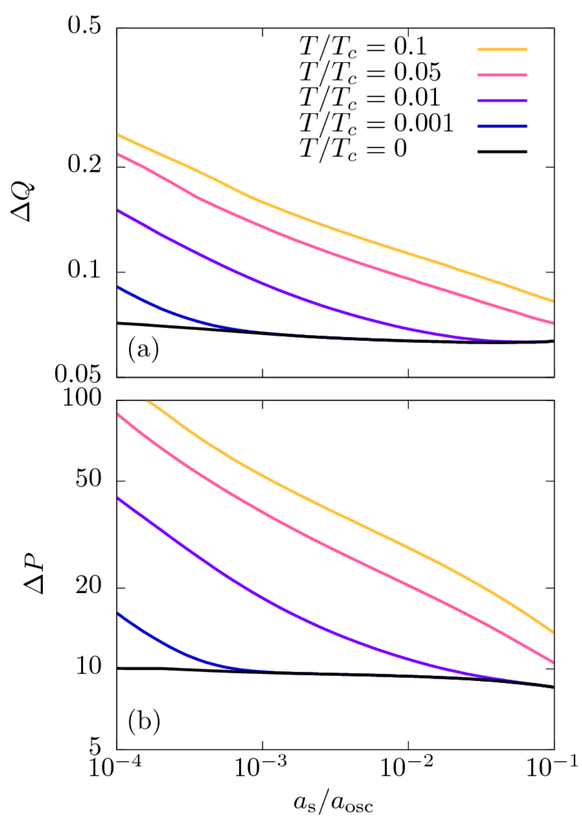
これでグランドポテンシャル摂動一次を計算する準備ができた

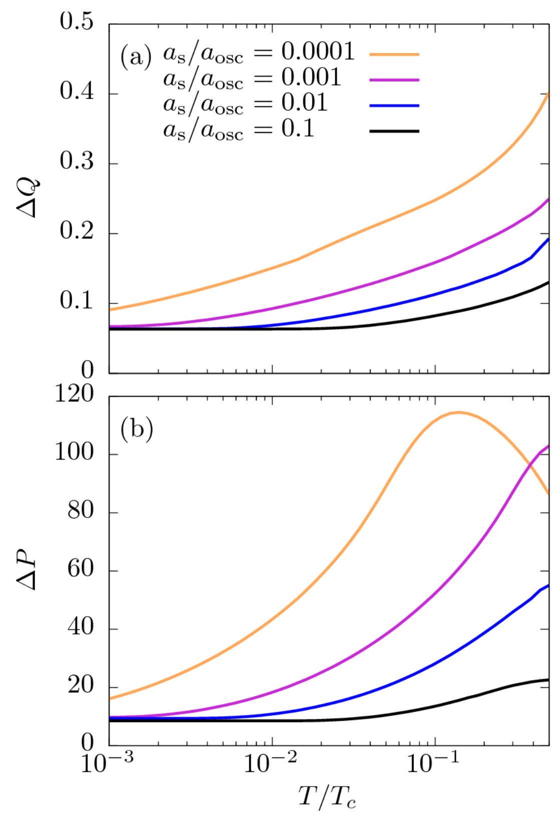
# 成果物

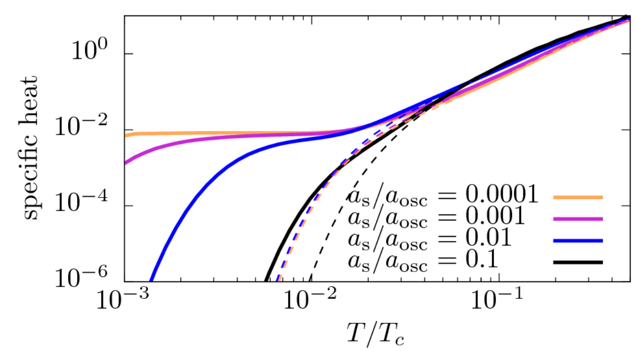
# 定式化以外に何をしたのか

## 3次元有限温度IZMFの数値計算

- Y.Nakamura et al, arXiv:1604.05900(2016)の数値計算.



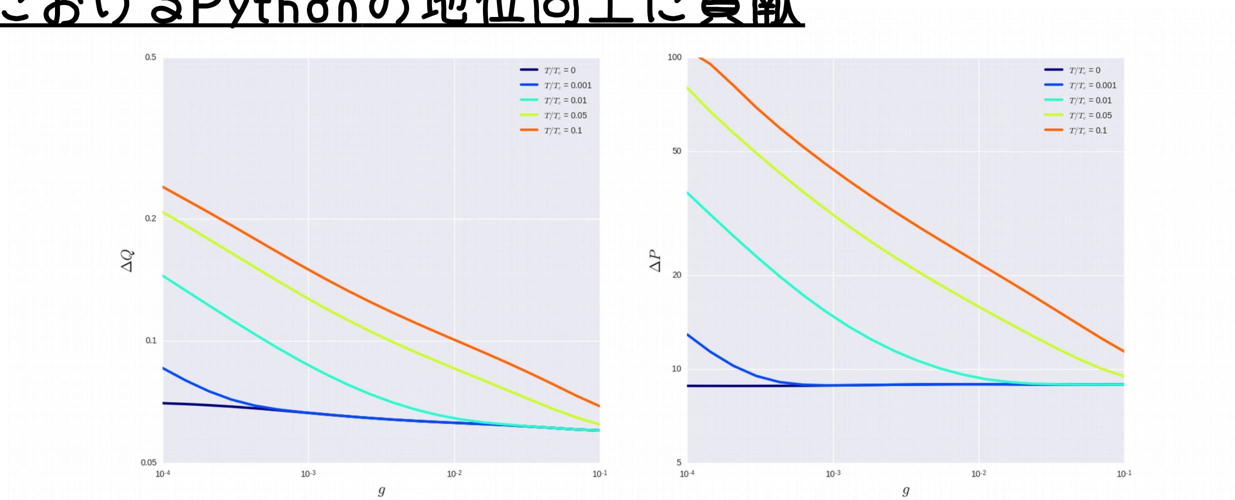



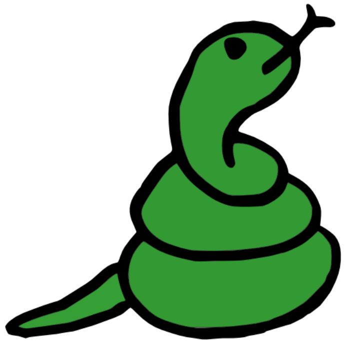



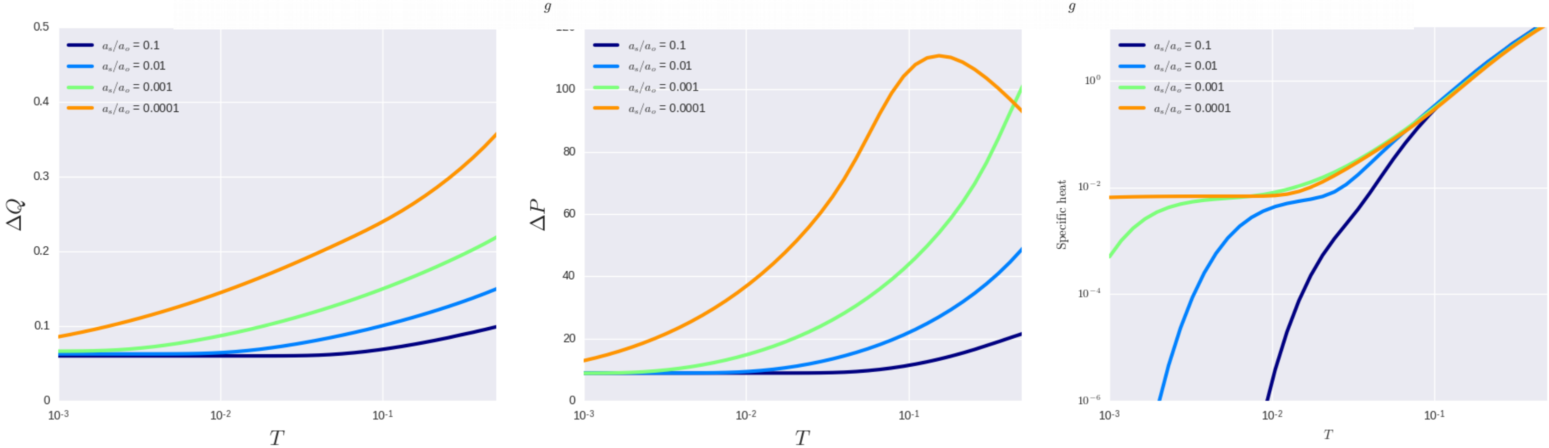
# 定式化以外に何をしたのか

## 3次元有限温度IZMFの数値計算

- Y.Nakamura et al, arXiv:1604.05900(2016)の数値計算再現. **蛇語で実装.**
- **<u>山中研におけるPythonの地位向上に貢献</u>**





# 今後

# 量子補正の摂動展開

## 摂動1次

$$\left\langle \varphi_{\mathrm{H}}^\dagger(x)\varphi_{\mathrm{H}}(x)\right\rangle \simeq \left\langle \varphi^\dagger(x)\varphi(x)\right\rangle - i\int ds\left\langle T\left[H_{\mathrm{int}}(s)\varphi^\dagger(x)\varphi(x)\right]\right\rangle$$

右辺第二項T積内は

$$\begin{aligned}
&\frac{g}{2}\int d\boldsymbol{y}\Big[\varphi_z^\dagger\mathcal{L}\varphi_{ex} + \varphi_{ex}^\dagger\mathcal{L}\varphi_z + \varphi_z\mathcal{M}^*\varphi_{ex} + \varphi_z^\dagger\mathcal{M}\varphi_{ex}^\dagger \\
&+ \xi^*(2\varphi_z^\dagger\varphi_z\varphi_{ex} + \varphi_z^\dagger\varphi_{ex}\varphi_{ex} + 2\varphi_{ex}^\dagger\varphi_z\varphi_{ex} + \varphi_{ex}^\dagger\varphi_z\varphi_z) \\
&+ \xi\ (2\varphi_z^\dagger\varphi_{ex}^\dagger\varphi_z + \varphi_z^\dagger\varphi_z^\dagger\varphi_{ex} + 2\varphi_z^\dagger\varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex} + \varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex}^\dagger\varphi_z) \\
&+ 2(\varphi_z^\dagger\varphi_z^\dagger\varphi_z\varphi_{ex} + \varphi_z^\dagger\varphi_{ex}^\dagger\varphi_z\varphi_z + \varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex}\varphi_z + \varphi_{ex}^\dagger\varphi_z^\dagger\varphi_{ex}\varphi_{ex}) \\
&+ \varphi_z^\dagger\varphi_z^\dagger\varphi_{ex}\varphi_{ex} + 4\varphi_z^\dagger\varphi_z\varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex} + \varphi_z\varphi_z\varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex}^\dagger + \varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex}^\dagger\varphi_{ex}\varphi_{ex}\Big] \\
\times\quad &\Big[\underline{\varphi_z^\dagger(x)\varphi_z(x)}_1 + \underline{\varphi_z^\dagger(x)\varphi_{ex}(x)}_2 + \underline{\varphi_{ex}^\dagger(x)\varphi_z(x)}_3 + \underline{\varphi_{ex}^\dagger(x)\varphi_{ex}(x)}_4\Big]
\end{aligned}$$

- 1次ですらめんどい．
- Hint(s) のs時間依存はゼロモード演算子にもかかる．s積分はどうなる？
- まだ十分に検討できてません．

# どこへ向かう？

## 数値計算の妥当性

- Zeromode-BdG, BdG-BdG相互作用を取り入れたとして，どんな寄与が予想されるか？
  → order estimateはできるか？
  → 比熱は持ち上がる？下がる？

- それとも，出てきた値をそのまま信用するしかないのか？
  → 物理的解釈は後付け？

## PRAのレフェリー

- Tcシフトに関する実験やシミュレーションと比較したがっていた.

- IZMFは(現状)低温・低相互作用領域の理論を提案.

- 前述の摂動展開で相互作用の大きい領域まで理論を拡張できるか？
  → 1次ではどうか？ 2次は絶望感漂う計算量.
  　→何かしらの方法でall-orderの足し上げ
  　　→ ゼロモードはWickの定理が成立しない. ヤバい.

# どこへ向かう？

## 修論までの行く末

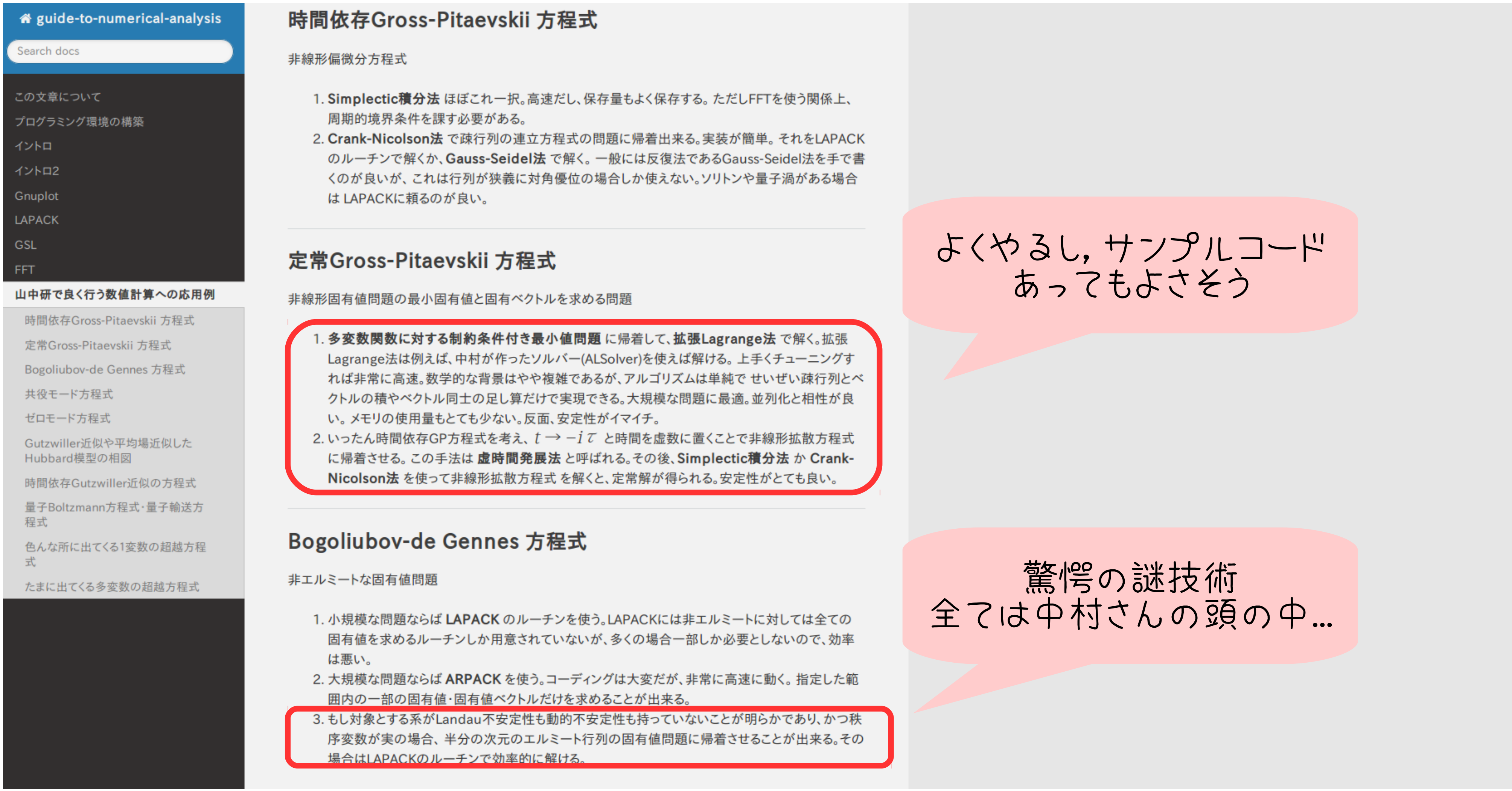
- 摂動1次についてやらなければいけないことはまだあるが，その先は…？
  →「修論までに」「山中研にとって」意味のあることをやりたい
  →「実験の説明」をモチベーションとするのは果たして…
    → それとは別に，ゼロモードについてもall-orderの足し上げができればすごい
      → が，そんなことが可能なのか！？

- **知識不足により可能・不可能，簡単・困難の想像すらできない**


先生・中村さんと相談しつつ
進めていきたいです

# 告知

# 数値計算手法の解説



guide-to-numerical-analysis

Search docs

この文章について
プログラミング環境の構築
イントロ
イントロ2
Gnuplot
LAPACK
GSL
FFT
山中研で良く行う数値計算への応用例
時間依存Gross-Pitaevskii 方程式
定常Gross-Pitaevskii 方程式
Bogoliubov-de Gennes 方程式
共役モード方程式
ゼロモード方程式
Gutzwiller近似や平均場近似したHubbard模型の相図
時間依存Gutzwiller近似の方程式
量子Boltzmann方程式・量子輸送方程式
色んな所に出てくる1変数の超越方程式
たまに出てくる多変数の超越方程式

## 時間依存Gross-Pitaevskii 方程式

非線形偏微分方程式

1. **Simplectic積分法** ほぼこれ一択。高速だし、保存量もよく保存する。ただしFFTを使う関係上、周期的境界条件を課す必要がある。
2. **Crank-Nicolson法** で疎行列の連立方程式の問題に帰着出来る。実装が簡単。それをLAPACKのルーチンで解くか、**Gauss-Seidel法** で解く。一般には反復法であるGauss-Seidel法を手で書くのが良いが、これは行列が狭義に対角優位の場合しか使えない。ソリトンや量子渦がある場合は LAPACKに頼るのが良い。

## 定常Gross-Pitaevskii 方程式

非線形固有値問題の最小固有値と固有ベクトルを求める問題

1. **多変数関数に対する制約条件付き最小値問題** に帰着して、**拡張Lagrange法** で解く。拡張Lagrange法は例えば、中村が作ったソルバー(ALSolver)を使えば解ける。上手くチューニングすれば非常に高速。数学的な背景はやや複雑であるが、アルゴリズムは単純で せいぜい疎行列とベクトルの積やベクトル同士の足し算だけで実現できる。大規模な問題に最適。並列化と相性が良い。メモリの使用量もとても少ない。反面、安定性がイマイチ。
2. いったん時間依存GP方程式を考え、$t \to -i\tau$ と時間を虚数に置くことで非線形拡散方程式に帰着させる。この手法は **虚時間発展法** と呼ばれる。その後、**Simplectic積分法** か **Crank-Nicolson法** を使って非線形拡散方程式 を解くと、定常解が得られる。安定性がとても良い。

## Bogoliubov-de Gennes 方程式

非エルミートな固有値問題

1. 小規模な問題ならば **LAPACK** のルーチンを使う。LAPACKには非エルミートに対しては全ての固有値を求めるルーチンしか用意されていないが、多くの場合一部しか必要としないので、効率は悪い。
2. 大規模な問題ならば **ARPACK** を使う。コーディングは大変だが、非常に高速に動く。指定した範囲内の一部の固有値・固有値ベクトルだけを求めることが出来る。
3. もし対象とする系がLandau不安定性も動的不安定性も持っていないことが明らかであり、かつ秩序変数が実の場合、半分の次元のエルミート行列の固有値問題に帰着させることが出来る。その場合はLAPACKのルーチンで効率的に解ける。

よくやるし，サンプルコード
あってもよさそう

驚愕の謎技術
全ては中村さんの頭の中…

//192.168.0.201/ホスティングディレクトリ/山中研でよく行う数値計算への応用例

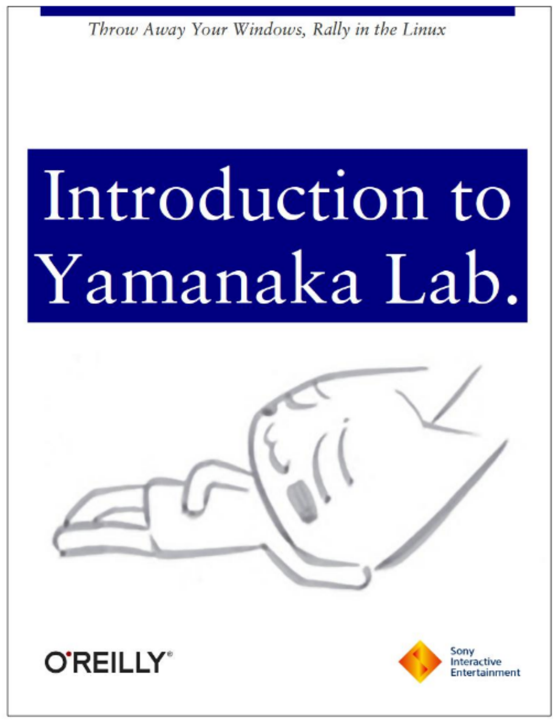
# 中村さん亡き今
# ソースコードを残さない山中研の
# 悪しき風習に苦しむあなたへ

Introduction to YamanakaLab. 0.1

About Emacs LaTeX LAPACK Python QFT Learning The Other Ubuntu Setup なかまたち

Search

## ほげほげ




Source

Back to top



\\Laplace\資料\Ubuntu環境構築\build\html\index.html

# 山中研でよくやる数値計算を

### 場の量子論の基礎

- 描像
- Fourier変換と一様系
- 相互作用描像とT積
- Bogoliubov-de Gennes方程式
- Wickの定理
- Gell-Mann and Lowの定理
- Thermo Field Dynamicsにおける熱的真空基礎の基礎

### Fetter-Walecka

- Second Quantization
- Green's Function
- Wick's Theorem
- Diagrammatic Analysis of Perturbation Theory
- Dython's Equation

### 数値計算 on Yamanaka Lab.

- 時間依存Schroedinger/Gross-Pitaevskii方程式
- 虚時間発展法によるGross-Pitaevskii方程式
- Bogoliubov-de Gennes方程式
- ZeroMode方程式
- Gross-Pitaevskii方程式と量子渦の分裂

### 研究

- 3次元一様系有限温度におけるInteracting ZeroMode Formulation
- IZMFにおけるゼロモードの緩和
- ZeroMode-BdGカップリングを取り入れたIZMF

Source　　Back to top

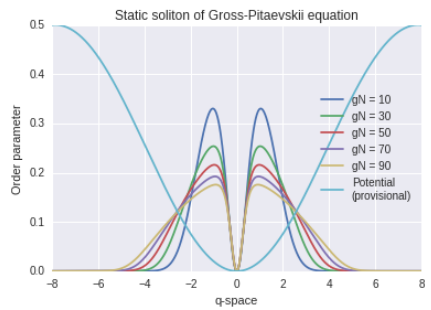


\\Laplace\資料\Ubuntu環境構築\build\html\index.html

# ソースコードといっしょに解説してます

```
        arr_Psi = arr_Psi*expV

        # Fourier transformation
        arr_Psi = fft(arr_Psi)

        # Multipling time propagator of kinetic term
        arr_Psi *= expK

        # Inverse fourier transformation
        arr_Psi = ifft(arr_Psi)

        # Correction of chemical potential mu
        mu -= (simps(arr_Psi**2, x) - 1)/(2*dt)

        # Normalization of order parameter arr_Psi
        arr_Psi /= np.sqrt(simps(np.real(arr_Psi**2), x))

        # Reconfigure expV
        expV = np.exp((-gN*arr_Psi**2)*dt)*pre_expV

    # Plot arr_Psi for present gN
    plt.plot(x, np.real(arr_Psi**2), label="gN = {0}".format(gN))

# Matplotlib configuration
plt.plot(x, V(x)/50, label="Potential\n(provisional)")
plt.ylim(0, 0.5)
plt.xlabel("q-space")
plt.ylabel("Order parameter")
plt.title("Static soliton of Gross-Pitaevskii equation")
plt.legend(loc = 'center right')
plt.show()
```

全編蛇語！




あとはもうほぼ前回と同じなので大丈夫でしょう. 今回は化学ポテンシャルの補正を時間発展ごとに加えなければなりません. 粒子数が保存しなければいけないので

$$N = \int dx\,|\xi(x,t)|^2$$

を満たさなければなりません. そんなわけで虚時間GP方程式の左から秩序変数の複素共役をかけて積分したとき,

$$i\int dx|\xi(x,t)|^2 = iN = \int dx[\xi^*\partial_x^2\xi + \mu|\xi|^2 - V(x)|\xi|^2 - gN|\xi|^4]$$

\\Laplace\資料\Ubuntu環境構築\build\html\index.html

# YamanakaLab.

GitHub

# JOIN US !

https://github.com/yamanaka-lab