「計算機実験 II」レポート課題 (2023/11/17 更新)

言語の指定がない課題については、Python や Julia などでプログラムを作成してもよい。ただし、その場合でも収束の様子などの解析はきちんと行うこと

課題は順次追加

[モンテカルロ]

1-1) 板状の物質による中性子の吸収/透過/反射をモンテカルロ法により計算するプログラムを作成せよ。吸収率 p_c、平均自由行程 λ^{-1} を適当な値に仮定した上で、板の厚さ D を増やしたときに、吸収率・透過率・反射率がどのように変化するか調べよ。エラーバー (統計誤差) についても評価すること

1-2) 二次元正方格子上のランダムウォークのシミュレーションを行うプログラムを作成せよ。各時刻で粒子は上下左右のいずれかの方向にランダムに進むとする。粒子の分布が時刻とともにどのように広がっていくか二次元ヒストグラムをプロットしてみよ。また、初期位置からの距離の平均値を計算・プロットし、時刻とともにどのように増加するか議論せよ。エラーバー (統計誤差) についても評価すること。さらに、粒子が一度訪れた場所には二度と訪れることはできないという制限を課すと、移動距離の時間依存性はどのように変化するか調べよ

1-3) マルコフ連鎖モンテカルロ法により、二次元正方格子イジング模型のエネルギーと比熱、磁化の二乗の期待値を計算せよ。モンテカルロステップ数をいくつか変えて実行し、物理量の期待値の振る舞いの変化を確認せよ (モンテカルロステップ数は 2 倍・4 倍・8 倍・・・など対数スケールで変化させるとよい)。さらに、システムサイズを $L = 4, 6, 8 \cdots$ と増やすと、これらの物理量の振る舞いがどのように変化するか調べよ。また、有限系のシミュレーション結果から、熱力学的極限における二次相転移の臨界温度と臨界指数を求める方法について調べよ

1-4) 二次元正方格子上の古典ハイゼンベルグ模型のマルコフ連鎖モンテカルロ法のプログラムを作成せよ。まず、三次元単位球面上に一様に分布するランダムベクトルの生成方法について考えよ。次にメトロポリス法のプログラムを作成し、エネルギー・比熱・磁化の二乗の期待値を計算、その温度依存性・サイズ依存性をプロットせよ。エラーバー (統計誤差) についても評価しプロットすること。(可能であれば、二次元正方格子上のイジング模型に対するモンテカルロ計算の結果との比較を行い、定性的な違いについて議論せよ)

[偏微分方程式の初期値問題・多体系の量子力学]

2-1) FTCS 法を用いて一次元拡散方程式を適当な初期条件に対して解け。パラメータ $r = D\Delta t/\Delta x^2$ を変化させて解の安定性・不安定性を確認せよ。FTCS 法は、$(N+1)\times(N+1)$ 対称三重対角行列 A を用いて $\mathbf{u}^{n+1} = A\mathbf{u}^n$ の形で表すことができる。数値対角化を用いて行列 A の固有値[*1] を計算し、r の値によって固有値の分布がどのように変化するかを調べ、安定性について議論せよ。(可能であれば、陰解法の場合について同様の解析を行え)

2-2) 二次元波動方程式を FTCS 法で解くプログラムを作成せよ。固定端条件と自由端条件の二通りの境界条件を設定し、境界での波の反射の様子を観察せよ。また、二次元空間中に波の速度 (あるいは屈折率) の異なる 2 つの領域を作り、境界で波の反射や屈折が起こることを確認せよ

[*1] 対称三重対角行列の対角化には LAPACK の `DSTEV` が使える

2-3) 一次元一粒子の時間依存シュレディンガー方程式を FTCS 法とクランク・ニコルソン法[*2]を用いて解く。初期状態として波束の波動関数 $\Psi(x) \sim \exp[-(x-x_0)^2/(4\sigma^2)+ip_0(x-x_0)]$ を考える。ポテンシャルがない場合 ($V=0$) に空間中を波束が伝搬していく様子を確認し、波動関数のノルム、位置・運動量・エネルギーの期待値の時間依存性を観察せよ。次に、中央にある高さのポテンシャル障壁を作り、壁の高さによって、透過率・反射率がどのように変化するかを調べよ

2-4) 一次元横磁場イジング模型

$$H = H_z + H_x = -J\sum_{i=1}^{N} \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x$$

の量子相転移を考える。σ_i^z を対角化する基底を考え、境界条件は周期境界条件とする。$N = 3, 4, 5, \cdots$ について、適当な初期状態を準備し、$\exp[-\tau H] \approx \{\exp[-(\tau/M)H_z]\exp[-(\tau/M)H_x]\}^M$ を掛けることで基底状態を求めよう。いくつかの $(\tau,\, M)$ の組に関して計算を行い、それぞれの N について基底状態エネルギーの収束を確認せよ。(典型的には、$\tau = N,\ \tau/M = 0.1$ 程度とすればよい。) また、得られた基底状態について、磁化の二乗の期待値

$$m^2 = \langle \Big(\frac{1}{N}\sum_i \sigma_i^z\Big)^2 \rangle$$

を計算し、$\Gamma/J < 1$ では有限の値、$\Gamma/J > 1$ ではゼロに収束することを確認せよ

2-5) 3 量子ビット加算器をシミュレーションするプログラムを作成せよ。$2^3 \times 2^3$ 通りの入力に対して、期待通りの結果が得られることを確認せよ。さらに、状態の線形結合を入力とした場合に加算結果の線形結合が出力されることを確認せよ

[*2] 実三重対角行列の連立一次方程式の求解には `DGTTRF` と `DGTTRS` を、複素三重対角行列の場合は `ZGTTRF` と `ZGTTRS` を使う