「計算機実験 II」実習 2 (2023-11-21)

本日 20:00 までに ITC-LMS の「実習 2 (2023/11/21) 出席・アンケート」に回答してください

疎行列の扱いに関する補足: sparse.pdf

- 自習課題
  1. 密行列の対角化の復習 (計算機実験 I 講義 4)
  2. 連立一次方程式の求解の復習 (計算機実験 I 講義 3)
  3. 疎行列の扱いについて `tridiagonal.c`, `sparse.c`, `matfree.c` のソースコードを確認。コンパイル・実行[*1]
- レポート課題[*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[*3]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. 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
  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[*4]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
  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 (τ, 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

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

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

[*1] コンパイルには cmatrix.h が必要

[*2] レポート No.1 [2023/12/5 (火) 締切] では、実習 1 のレポート課題から 1 問、今回のレポート課題から 1 問の合計 2 問を選び解答

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

[*4] 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

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