計算機実験 II (L2) — 偏微分方程式と多体系の量子力学

藤堂眞治
wistaria@phys.s.u-tokyo.ac.jp

2023/10/27

講義日程 (予定)

- 全 8 回 (金曜 5 限 16:50-18:35)
  - 10 月 6 日 (金) 講義 1: 多体系の統計力学とモンテカルロ法
  - 10 月 13 日 (金) 実習 1
  - 10 月 20 日 (金) 休講 (物理学教室コロキウム)
  - 10 月 27 日 (金) 講義 2: 偏微分方程式と多体系の量子力学
  - 11 月 10 日 (金) 休講 (物理学教室コロキウム)
  - 11 月 17 日 (金) 講義 3: 少数多体系・分子動力学
  - 11 月 21 日 (火) 演習 2
  - 12 月 1 日 (金) 講義 4: 最適化問題
  - 12 月 8 日 (金) 実習 3
  - 12 月 15 日 (金) 休講 (物理学教室コロキウム)
  - 12 月 22 日 (金) 休講 (ニュートン祭)
  - 1 月 5 日 (金) 実習 4
  - 1 月 19 日 (金) 休講
  - 1 月 26 日 (金) 休講

初期値問題と境界値問題

- 初期値問題
  - 微分方程式において、ある 1 点に関する全ての境界条件 (初期値) が与えられているもの
  - 質点の運動など (時系列の問題)
- 境界値問題
  - 複数の点に関する境界条件が与えられているもの
  - 物体のゆがみの計算や静電場の計算など (空間的に解く問題)
- 初期値問題は初期値から逐次的に解くことが可能
- 境界値問題は初期値問題に比べて計算法が複雑

一次元拡散方程式 (放物型)

- 一次元拡散方程式: $u = u(x,t)$, $q = q(x,t)$

$$\frac{\partial u}{\partial t} - D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = q$$

  - 初期条件: $u(x,0) = f(x)$
  - 境界条件: $u(0,t) = u(1,t) = 0$
- 時間 t と位置 x に関して離散化

$$\begin{aligned}
u_j^n &= u(x_j, t_n) \\
q_j^n &= q(x_j, t_n) \\
t_0 &= 0, t_1 = \Delta t, t_2 = 2\Delta t, \cdots, t_n = n\Delta t, \cdots \\
x_0 &= 0, x_1 = \Delta x, x_2 = 2\Delta x, \cdots, x_N = N\Delta x = 1 \qquad (\Delta x = 1/N)
\end{aligned}$$

有限差分法

- t に関して前進差分を考える

$$\left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|_{(j\Delta x, n\Delta t)} = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

- x に関しては中心差分を考える

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{(j\Delta x, n\Delta t)} = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2)$$

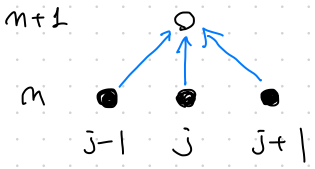
- 拡散方程式に代入して整理すると

$$u_j^{n+1} = u_j^n + r(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) + \Delta t q_j^n \qquad (r = D\frac{\Delta t}{\Delta x^2})$$

- FTCS (Forward-Time Centered Space) 法

FTCS 法

- $O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$ の陽解法



- 初期条件

$$u_j^0 = f(j\Delta x) \quad (j = 0, 1, \cdots, N)$$

- 境界条件

$$u_0^n = u_N^n = 0 \quad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

有限差分法の安定性

- (陽的) 有限差分法においては、Δt、Δx は小さければ小さいほどよいというわけではない
- 一次元拡散方程式の場合

$$\begin{cases} r \le 1/2 & \text{安定} \\ r > 1/2 & \text{不安定} \end{cases}$$

- Δx を半分にしたら、Δt は 1/4 にしなければならない
$\Rightarrow$ 計算量は 8 倍

Von Neumann の安定性解析

- $u(x,t)$ のフーリエ変換を導入する

$$u(x,t) = \sum_k v(k,t) e^{ikx}$$
$$u_j^n = \sum_k v_k^n e^{ik\Delta x \cdot j}$$

- FTCS 法の式に代入し、k の項を取り出すと

$$v_k^{n+1} = (1 + 2r(\cos k\Delta x - 1)) v_k^n$$

- 全ての k に対し発散しない (=係数の絶対値が 1 未満になる) ためには

$$|1 - 4r| < 0 \qquad \text{すなわち } r < \frac{1}{2}$$

一次元波動方程式 (双極型)

- 一次元波動方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \qquad u(x,0) = f(x), \frac{\partial u}{\partial t}(x,0) = g(x)$$

- t に関する中心差分

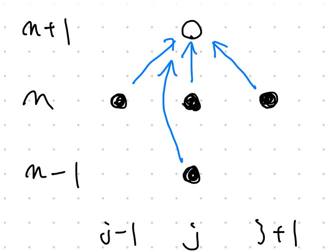
$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right|_{(j\Delta x, n\Delta t)} = \frac{u_j^{n+1} - 2u_j^n + u_j^{n-1}}{\Delta t^2} + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

- 代入して整理すると

$$u_j^{n+1} = 2u_j^n - u_j^{n-1} + \alpha^2 (u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \qquad \left(\alpha = c\frac{\Delta t}{\Delta x}\right)$$

波動方程式に対する FTCS 法

- $O(\Delta t^2) + O(\Delta x^2)$ の陽解法



- 初期条件

$$u_j^0 = f(j\Delta x) \quad (j = 0, 1, \cdots, N)$$

初期速度については $n = 0$ に関する中心差分を考えて

$$\frac{u_j^1 - u_j^{-1}}{2\Delta t} = g_j \quad \Rightarrow \quad u_j^1 = u_j^0 + \Delta t g_j + \frac{\alpha^2}{2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$

時間に依存するシュレディンガー方程式

- 時間に依存するシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}(x,t) = H(x,t)\Psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x,t)\right]\Psi(x,t)$$

  - 波動関数のノルム $\int |\Psi(x,t)|^2\,dx$ は保存
  - $V(x,t)$ が時間 t に依存しない場合、エネルギーの期待値は保存

$$\langle H\rangle = \frac{\int \Psi^* H\Psi\,dx}{\int |\Psi|^2\,dx}$$

- 以下では無次元化して $\hbar = m = 1$ とおく

時間に依存するシュレディンガー方程式

- シュレディンガー方程式の形式解 (V が時間に依存しない場合)

$$\Psi(x,t) = e^{-iHt}\Psi(x,0)$$

- t に関して前進差分

$$e^{-iHt} = [e^{-iH\Delta t}]^M \approx [1 - iH\Delta t]^M \qquad (\Delta t = t/M)$$
$$\Psi^{n+1} = (1 - i\Delta t H)\Psi^n$$

- H は対称 (エルミート) 行列 $\Rightarrow$ 時間発展演算子 $e^{-iH\Delta t}$ はユニタリー行列
- 差分近似 $(1 - i\Delta t H)$ はユニタリーではない

$$(e^{-iH\Delta t})^\dagger e^{-iH\Delta t} = e^{iH\Delta t}e^{-iH\Delta t} = 1$$
$$(1 - i\Delta t H)^\dagger (1 - i\Delta t H) = (1 + i\Delta t H)(1 - i\Delta t H) = 1 + \Delta t^2 H^2$$

クランク・ニコルソン法

- クランク・ニコルソン法

$$\Psi^{n+1} = \frac{1 - i\frac{\Delta t}{2}H}{1 + i\frac{\Delta t}{2}H}\Psi^n$$

- (数値精度の範囲で) ユニタリー行列であるので、ノルムは保存
- $(1 + i\frac{\Delta t}{2}H)^{-1}$ を掛ける $\Rightarrow$ 連立一次方程式を解く必要がある
  - まず、$\Psi = (1 - i\frac{\Delta t}{2}H)\Psi^n$ を計算
  - 次に、$(1 + i\frac{\Delta t}{2}H)\Psi^{n+1} = \Psi$ を解く (連立一次方程式)
- 陰解法の一種

拡散方程式に対する陰解法

- 時刻 t 関して後退差分を使う

$$\left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|_{(j\Delta x, n\Delta t)} = \frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t)$$

- x に関する中心差分と組み合わせ、$n \to n+1$ と書き直すと

$$u_j^{n+1} = u_j^n + r(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1})$$

  u^{n+1} が両辺に現れる $\Rightarrow$ 陰解法
- $O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$
- r の値によらず常に安定

拡散方程式に対するクランク・ニコルソン法

- さらに、時間方向にきざみ幅 $\Delta t/2$ の中心差分を使うと

$$\left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|_{(j\Delta x, n\Delta t)} = \frac{u_j^{n+\frac{1}{2}} - u_j^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2)$$

- x に関する中心差分と組み合わせ、$n \to n + \frac{1}{2}$ し、さらに $u_j^{n+\frac{1}{2}}$ を $(u_j^{n+1} + u_j^n)/2$ で近似すると

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{r}{2}(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1} + u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$

あるいは

$$u_j^{n+1} - \frac{r}{2}(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) = u_j^n + \frac{r}{2}(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)$$

$\Rightarrow$ クランク・ニコルソン法 $[O(\Delta t^2) + O(\Delta x^2)]$

横磁場イジング模型

- ハミルトニアン ($2^N \times 2^N$ 行列)

$$H = H_z + H_x = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z - h \sum_i \sigma_i^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x$$

- σ_i^x、σ_i^z: パウリ行列 (2×2 行列)

$$\left(\sigma_i^z\right)^2 = \left(\sigma_i^x\right)^2 = I$$
$$[\sigma_i^z, \sigma_i^x] \neq 0$$

- J: スピン間の相互作用 ($J > 0$: 強磁性、$J < 0$: 反強磁性)
- h: 縦磁場 (準位間のエネルギー差 $= 2h$)
- Γ: 横磁場 (トンネリング)
- 以降、σ_i^z を対角化する基底 ($|\uparrow\rangle_i$, $|\downarrow\rangle_i$) で考える

横磁場イジング模型

- 2 サイト系

$$H = -J\sigma_1^z\sigma_2^z - h(\sigma_1^z + \sigma_2^z) - \Gamma(\sigma_1^x + \sigma_2^x)$$

- 行列要素

$$\begin{aligned}
\langle\uparrow\uparrow|H|\uparrow\uparrow\rangle &= -J - 2h \\
\langle\uparrow\uparrow|H|\uparrow\downarrow\rangle &= -\Gamma \\
\langle\uparrow\uparrow|H|\downarrow\downarrow\rangle &= 0 \\
&\vdots
\end{aligned}$$

量子相転移

- $h = 0$ の場合
  - $\Gamma \to 0$: $|\uparrow\uparrow\cdots\uparrow\rangle$、あるいは $|\downarrow\downarrow\cdots\downarrow\rangle$ が基底状態 (二重縮退)
  - $J \to 0$: σ_i^x の固有状態 $(|\uparrow\rangle_i + |\downarrow\rangle_i)$ の積が基底状態 (全ての状態の重ね合わせ)
- 一次元系

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

$\Gamma = J$ で量子相転移 (熱ゆらぎではなく量子ゆらぎによる相転移)

横磁場イジング模型の時間発展

- 時間依存シュレディンガー方程式の形式解

$$\Psi(t) = e^{-iHt}\Psi(0)$$

  - 有限差分法、クランク・ニコルソン法
- 鈴木・トロッター分解 ($\Delta t = t/M$)

$$\begin{aligned} e^{-iHt} &= \left[e^{-iH\Delta t}\right]^M \approx \left[e^{-iH_z\Delta t}e^{-iH_x\Delta t}\right]^M \\ &= \left[e^{i\Delta t J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i^z\sigma_j^z}e^{i\Gamma\sigma_1^x\Delta t}e^{i\Gamma\sigma_2^x\Delta t}\cdots e^{i\Gamma\sigma_N^x\Delta t}\right]^M \end{aligned}$$

(さらに $e^{-iH\Delta t} \approx e^{-iH_z\Delta t/2}e^{-iH_x\Delta t}e^{-iH_z\Delta t/2}$ と対称に分解すると近似の次数が上がる)

- $[\sigma_i^x]^2 = I$ より

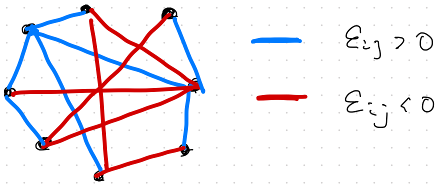
$$e^{i\Gamma\sigma_i^x\Delta t} = I\cos(\Gamma\Delta t) + i\sigma_i^x\sin(\Gamma\Delta t)$$

量子アニーリング

- 離散最適化問題

$$H = -J \sum_{i<j} \epsilon_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z$$

の基底状態配位と基底状態エネルギーを求めたい



量子アニーリング

- 横磁場を導入

$$H = -J \sum_{i<j} \epsilon_{ij} \sigma_i^z \sigma_j^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x$$

- 古典極限 $(J = 1, \Gamma = 0)$
  - 求めたい基底状態
- 量子極限 $(J = 0, \Gamma = 1)$
  - 2^N 個の全ての状態の重ね合わせ
- 量子アニーリング
  - $J + \Gamma = 1$ を保ったままで、$\Gamma = 1$ から $\Gamma = 0$ まで「ゆっくり」と減少させながら時間発展させる

$$J = 1 - \Gamma = t/T \qquad (0 \le t \le T)$$

  - $T \to \infty$ の極限で確率 1 で基底状態に収束

量子コンピュータと量子ゲート

- (ゲート型) 量子コンピュータ
  N 量子ビットに対して、量子ゲートにより状態を操作
  - 「量子ビット」= 2 準位系 ($S = 1/2$ スピン) $|0\rangle = |\uparrow\rangle, |1\rangle = |\downarrow\rangle$
  - 「量子ゲート」= 少数量子ビットに対するユニタリ変換
- 1 量子ビットゲート
  - X ゲート (量子 NOT)

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma^x$$

  - Rz ゲート (z 軸まわりの回転)

$$Rz(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-i\theta/2} & 0 \\ 0 & e^{i\theta/2} \end{pmatrix} = e^{-i\theta\sigma^z/2}$$

  - アダマールゲート

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma^x + \sigma^z)$$

量子ビットゲート

- 2 量子ビットゲート
  - CX ゲート (制御 NOT)

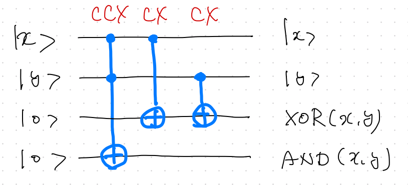
$$CX = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- 3 量子ビットゲート
  - CCX ゲート (トフォリゲート)

$$CCX = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

量子加算器

- 1 量子ビットの加算 ⇒ CCX ゲートと CX ゲートで実現できる



- CCX ゲートは、H ゲート、Rz ゲート、CX ゲートの組み合わせで表現できる
- 任意の量子回路は、H ゲート、Rz ゲート、CX ゲートの組み合わせで表現できる (万能量子ゲート)

量子加算器

- 3 量子ビット加算器