「計算機実験 II」実習課題 (EX3) 2019-12-06

- サンプルプログラム: `example-2-L3.zip`
- 準備練習

  1. 復習 (計算機実験 I L2, EX2): 調和ポテンシャル $V(x) = x^2/2$ 中の 1 粒子の運動方程式を、4 次の Runge-Kutta 法で解け。初期値は適当に設定してよい。十分時間刻み幅を小さくすると、位相空間上で軌道が閉じ、厳密解と一致することを確認せよ。また、エネルギーが保存していることも確認せよ
  2. 上のプログラムを非調和ポテンシャル $V(x) = -x^2/2 + x^4/4$ の場合に拡張せよ
  3. `transfer_matrix.c` は、転送行列 $\mathbf{T}$ から tr $\mathbf{T}^L$ を計算することで $L \times M$ 正方格子イジング模型の自由エネルギーを計算するプログラムである。内部では、2^M 次元のベクトル $\mathbf{v}$ に対角行列 $D^{1/2}$ を掛ける関数 `product_D`、$\mathbf{v}$ に疎行列 U を掛ける関数 `product_U`、それらを組み合わせて 2^M 次元のベクトル $\mathbf{v}$ に転送行列 $\mathbf{T}$ を掛ける関数 `product_T` を使っている。講義資料 `lecture-2-3.pdf` p.10 で定義された転送行列を掛ける操作となっていることを確認せよ[1]

- 基本課題

  1. `exact_counting.c` は、スピン配位をすべて数え上げることにより、二次元正方格子イジング模型の分配関数を計算するプログラムである。温度 `temperature` を低くしたり、システムサイズ `L` を大きくすると、桁あふれにより答えが `inf` となってしまう。そのような場合でも正しく計算が行えるよう、プログラムを修正せよ (参考: 講義資料 `lecture-2-3.pdf` p.7)
  2. `transfer_matrix.c` では、最初に転送行列 $\mathbf{T}$ を作り、行列・行列積により $\mathbf{T}^L$ を計算しているが、行列を陽に生成せずに 2^M 個の基底ベクトルにそれぞれ $\mathbf{T}$ を L 回掛けて、それぞれの対応する成分を足し合わせる方法で転送行列を計算するようにプログラムを変更せよ。システムサイズを増やしていった時の計算時間やメモリ使用量の増加はどのように改善されるか? (参考: 講義資料 `lecture-2-3.pdf` p.13)[2]
  3. `transfer_matrix.c` 内の関数 `product_T` とべき乗法を用いて、転送行列 $\mathbf{T}$ の最大固有値を求め、長さ L が無限の系の自由エネルギー密度を計算せよ (参考: 講義資料 `lecture-1-4.pdf` p.16)。なお、温度 $T = 2$、幅 $M = 4$ の時の自由エネルギー密度の厳密な値は、-2.0757223592$\cdots$ である
  4. Nose-Hoover 熱浴を用いた分子動力学法により、調和ポテンシャルあるいは非調和ポテンシャル中の 1 粒子のカノニカル分布を調べる。講義 L3 では、熱浴を 1 つの自由度 (s) で実現する方法を説明したが、調和振動子のような場合には、そのような単純な熱浴ではエルゴード性が破れてしまうことがわかっている。この問題を解決する方法の 1 つとして Nose-Hoover Chain 法がある。この方法では、熱浴にもう一つの自由度 (r とそれに共役な運動量 p_r) を追加した運動方程式

$$
\begin{aligned}
\frac{dx}{dt} &= \frac{p}{m} \\
\frac{dp}{dt} &= -\frac{\partial V}{\partial x} - \frac{p_s}{Q} p \\
\frac{dp_s}{dt} &= \frac{p^2}{m} - k_B T - \frac{p_r}{Q} p_s \\
\frac{dp_r}{dt} &= \frac{p_s^2}{Q} - k_B T
\end{aligned}
$$

  を解くことで、現実系のカノニカル分布を実現する[3]。$m = 1$, $Q = 1$, $k_B T = 1$ として、4 次の Runge-Kutta 法で運動方程式を解き、その位相空間上での軌道を確認せよ (時間刻み $\Delta = 0.01$ で $t = 10^4$ 程度まで計算せよ)。また、座標 x と運動量 p のヒストグラムを作成し、カノニカル分布となっているかどうか確認せよ

---

[1] 桁あふれを防ぐために、それぞれのボンドのボルツマン重みがあらかじめ $\exp(1/T)$ (T は温度) で割ってあることに注意
[2] 実行中のメモリ使用量は `top` コマンドでモニタすることができる
[3] 熱浴 s の温度をさらにもうひとつの熱浴 r で制御している

- 応用課題

  1. 数え上げあるいは転送行列により計算されたイジング模型の分配関数を温度に関して数値微分することで、内部エネルギー、比熱を計算してみよ。EX2 のモンテカルロの結果と一致するか比較せよ
  2. イジング模型の転送行列に外部磁場の項を付け加え、磁場下での分配関数を計算できるように修正せよ。また、数値微分により帯磁率を求め、その温度依存性・システムサイズ依存性から、相転移の場所を見積もってみよ
  3. 転送行列の最大固有値からは、幅 M で長さが無限の格子の自由エネルギーが求められるが、第 2 固有値はどのような情報を持っているか？第 2 固有値の振る舞いから相転移点や臨界指数を議論することは可能か？ [ヒント: 現象論的くりこみ群 (Phenomenological Renormalization)]
  4. Nose-Hoover 熱浴、Nose-Hoover Chain 法以外にも、Kinetic-Moment 法、Langevin 法などさまざまな手法がある。それらの原理と特徴について調べよ

- レポート課題

  基本課題 1,2,3,4 の中から 2 問選びレポートを作成出せよ (それ以外の基本課題、応用課題はオプションであるがこれらも解いて提出した場合には加点の対象)。実習 4 (EX4) のレポート課題とあわせて、一つのレポートとして提出すること。提出締め切りは 1 月 10 日 (金) とする。ITC-LMS から提出すること