

基底量子モンテカルロ法を用いた調和振動子系の計算

(江戸川大学¹, 産業技術総合研究所²) 八木 徹¹, 長嶋 雲兵²

Basis Quantum Monte Carlo calculation of the harmonic oscillator system

(Edogawa University¹, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology²)

Toru YAGI¹, Umpei Nagashima²

【序】Basis Quantum Monte Carlo (BQMC) 法は量子 Monte Carlo 方的一种であり、系の状態を反対称化した基底関数を導入して記述する[1]。一般に用いられている拡散量子 Monte Carlo 法では、節面の情報を記述するためにガイド関数を利用する。しかし、BQMC 法では、ガイド関数を用いずに、多電子系の反対称性問題を取り扱うことが可能となっている。これまでに我々は、BQMC 法のシミュレーション過程を改良して、1 次元及び 3 次元の調和振動子内におけるフェルミ粒子の系に対する計算を行い、より高い精度での結果を得ることができた[2]。また、Importance Sampling を導入することにより、さらなる BQMC 法の精度向上を実現した[3]。

本発表では、Importance Sampling 付き BQMC 法の計算を実行し、その結果について示す。具体的には、調和振動子型のポテンシャル内に存在する 2 個のフェルミ粒子についての計算を行い、エネルギーと分散、および波動関数を求める。

【方法】以下、同スピンを持つ 2 個のフェルミ粒子の系を考える。BQMC 法では、空間を間隔 b の格子に分割し、格子上の点 x_j に中心を持つ Gauss 型の関数を導入する。

$$\varphi_j(x) = \exp\left(-\frac{(x-x_j)^2}{2b^2}\right)$$

この関数を反対称化した基底関数を用いて、波動関数を以下のように表す。

$$\Psi(x^{(1)}, x^{(2)}) = \sum_{i>j} c_{ij} [\varphi_i(x^{(1)})\varphi_j(x^{(2)}) - \varphi_j(x^{(1)})\varphi_i(x^{(2)})]$$

ここで、座標 x の上付きの添字(1)と(2)はそれぞれ粒子を区別する番号を表す。BQMC 法は、この波動関数の定常状態を求める手法である。

我々は、より効率が良く、精度の高い Monte Carlo シミュレーションを実施するために、BQMC 法に Importance Sampling を導入した。まず、ガイド関数を次式のように定める。

$$\Psi_G(x^{(1)}, x^{(2)}) = \sum_{m>n} c_{mn}^G [\varphi_m(x^{(1)})\varphi_n(x^{(2)}) - \varphi_n(x^{(1)})\varphi_m(x^{(2)})]$$

ここで c_{mn}^G は展開係数であり、事前の BQMC 計算で得られる定数である。このガイド関数を用い、関数 f を次式のように定める。

$$f(x^{(1)}, x^{(2)}, t) = \Psi_G(x^{(1)}, x^{(2)}) \Psi(x^{(1)}, x^{(2)}, t)$$

この関数 f の時間発展を BQMC 法と同様に記述し、定常状態を求める式を得た。

【結果】 調和振動子型のポテンシャル内にある 2 個のフェルミ粒子の系について計算を行い、結果を検証した。はじめに通常の BQMC 計算を行い、系の波動関数を求めた。得られた波動関数を図 1 に示す。BQMC 法では、和の制限により、 $x_2 > x_1$ の領域における波動関数が得られている。

この波動関数をガイド関数として、同じ系に対する Importance Sampling 付きの BQMC 計算を実施した。表に、得られたエネルギーの値を示す。通常の BQMC 計算と、Importance Sampling 付きの BQMC 計算のいずれにおいても 10^6 ステップの配置に対する平均値を求めている。

Importance Sampling により、通常の BQMC の計算よりも高い精度で平均値を計算できている。また、各時間ステップに対するエネルギーの推移を図 2 と 3 に示す。通常の BQMC に比べて Importance Sampling を行うことで、エネルギーの変動が抑えられていることが分かる。

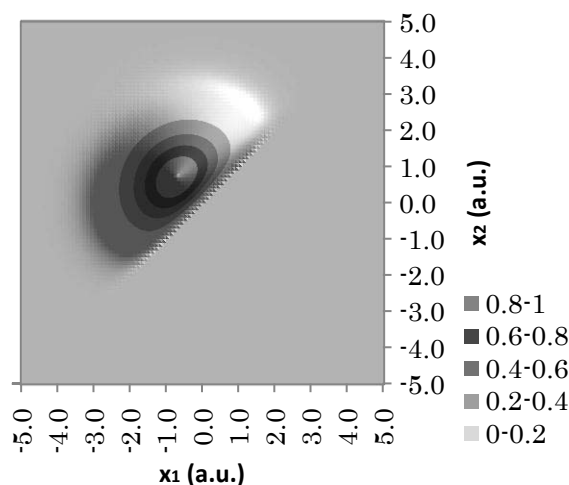


図 1 BQMC 法の波動関数

表 エネルギー(hartree)

	Energy	σ
Normal BQMC	2.001947	1.26×10^{-3}
Importance Sampling BQMC(1)	1.999975	3.45×10^{-4}
Exact	2.0	-

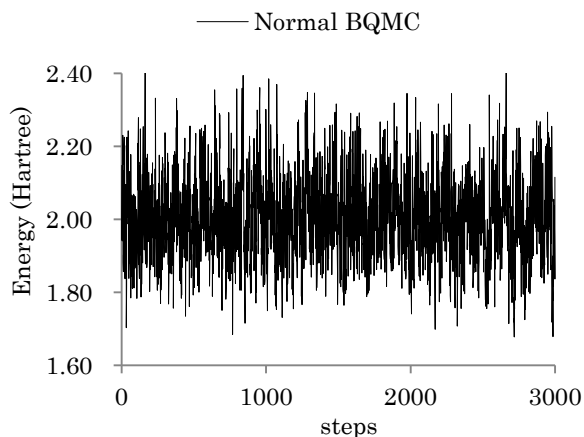


図 2 BQMC 法のエネルギー変化

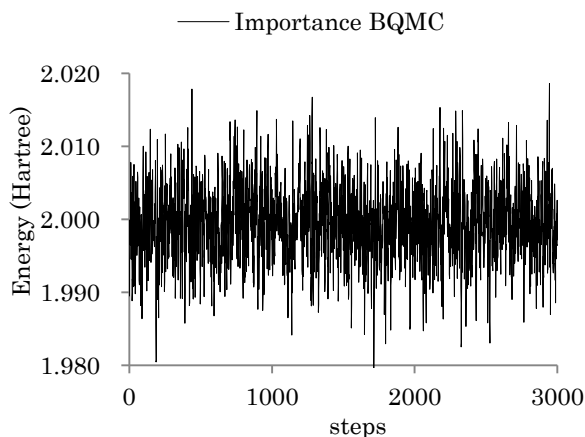


図 3 Importance Sampling 付き BQMC 法のエネルギー変化

上記結果に加え、3次元系についての計算・解析結果を含めて詳細を発表する予定である。

【参考文献】

- [1] Öksüz I, *J. Chem. Phys.*, Vol. 81, No. 11, pp. 5005-5012 (1984)
- [2] Toru YAGI, Umpei Nagashima, *J. Comput. Chem. Jpn.*, **8**, 119-126 (2009)
- [3] Toru YAGI, Umpei Nagashima, *J. Comput. Chem. Jpn.*, in press