RT 2024: Domače naloge

Denis Golež

1. **Numerično reševanje harmonskega in anharmonskega nihala**
   Napiši program za numerično reševanje enačbe gibanja $\ddot{\theta}+a\theta=0$ s končnimi časovnimi koraki δt. Uporabi Eulerjevo in Runge-Kutta metodo in razumi kako je frekvenca nihanja odvisna od parametra a. Ugotovi, kako upada amplituda nihanja s časom zaradi numeričnih napak pri končnem δt pri obeh metodah (namig: katera krivulja opisuje ovojnico?). Pokaži, da natančnost integracije primerno skalira s korakom za obe metodi. Je numerična rešitev za periodo nihanja odvisna od δt? Napiši še program za numerično reševanje enačbe gibanja $\ddot{\theta} + a\sin(\theta) = 0$. Kako je perioda odvisna od amplitude nihanja ?

2. **Problem plenilcev in plena**
   Preprost opis dinamike populacije plenilcev in plena predstavljajo Lotka-Voltera enačbe

$$\frac{dx}{dt} = \alpha x + \beta xy \qquad \frac{dy}{dt} = \gamma y + \delta xy,$$

   kjer je x populacija plena in y populacija plenilcev. Uporabi Eulerjevo in Runge-Kutta metodo in razumi kakšen je pomen parametrov $\alpha, \beta, \gamma, \delta$? Kaj se zgodi, če nastaviš $\beta = 0$ in kaj če je le-ta majhen? Kakšna je dinamika v nasprotnem primeru, kjer je β največji parameter?

3. **Nicholson–Bailey problem**
   Preprost opis dinamike populacije gostiteljev in parazitov predstavlja Nicholson–Bailey problem

$$H(t+1) = kH(t)\exp^{-aP(t)} \qquad P(t+1) = cH(t)(1-\exp(-aP(t))),$$

   kjer je $H(t)$ populacija gostitelja in $P(t)$ populacija parazitov. Reši sistem diferenčnih enačb in razumi kakšen je pomen prostih parametrov a, c, k?

4. **Simulacija nehomogene verige sklopljenih nihal** Opiši sistem $N = 1000$ z vzmetmi povezanih nihal, ki jih opišemo z enačbami (razdelek 1.10) Imejmo sistem $N = 1000$ z vzmetmi povezanih nihal, ki jih opišemo z enačbami (razdelek 1.10)

$$-K(\psi_n - \psi_{n-1}) - K(\psi_n - \psi_{n+1}) = m_n\ddot{\psi}_n,$$

   za $n = 1, \ldots, N$, dodatno pa velja še $\psi_{N+1} = 0$ in $\psi_0 = A\sin(\omega t)$. Mase nihal m_n so lahko različne. Na začetku vsa nihala mirujejo, $\psi_n(t=0) = \dot{\psi}_n(t=0) = 0$ za $n = 1, \ldots, N$.

   a) Napiši program, ki bo računal časovno dinamiko sistema nihal z metodo končnih korakov (razdelek 1.1). Preizkusi ga za primer enakih mas, $m_n \equiv m$. Kaj se zgodi z valovanje, ko pride do desnega roba? Za lažje računanje izberi $K = m = 1$, primerni vrednosti za ω in A pa poišči sam!

b) Kaj se zgodi, če obravnavamo isti problem, a se mase nihal razlikujejo? Zapiši $m_n = 1 + \delta m_n$, kjer dodatne mase δm_n naključno izžrebaš v nekem izbranem intervalu $[-a : a]$. Kaj se zgodi s povečevanjem širine intervala $2a$?

5. **Deutsch-Jozsa algoritem** V jeziku Qiskit zapiši implementacijo Deutsch-Jozsa algoritma za N kubitov. Oceni in preveri kaj je maksimalni N, ki ga lahko izvedeš na svojem računalniku. Izvedi algoritem na pravem kvantnem računalniku v oblaku (IBM Quantum Experience) ali pa v simulatorju (Qiskit Aer) z realističnim modelom dekoherence. Postopek večkrat ponovi in ugotovi kakšen kako je rezultat odvisen od dekoherence in velikosti sistema.

6. **Bernstein-Vazirani algoritem** Pouči se o algoritmu Bernstein-Vazirani in ga primerjaj z Deutsch-Jozsa algoritmom. Oceni in preveri kaj je maksimalni N, ki ga lahko izvedeš na svojem računalniku. V jeziku Qiskit zapiši implementacijo Bernstein-Vazirani algoritma za N kubitov. Izvedi algoritem na pravem kvantnem računalniku v oblaku (IBM Quantum Experience) ali pa v simulatorju (Qiskit Aer) z realističnim modelom dekoherence. Postopek večkrat ponovi in ugotovi kakšen kako je rezultat odvisen od dekoherence in velikosti sistema.

7. **Simons problem** Pouči se o problemu Simons in ga primerjaj z Deutsch-Jozsa algoritmom. V jeziku Qiskit zapiši implementacijo Bernstein-Vazirani algoritma za N kubitov. Izvedi algoritem na pravem kvantnem računalniku v oblaku (IBM Quantum Experience) ali pa v simulatorju (Qiskit Aer) z realističnim modelom dekoherence. Postopek večkrat ponovi in ugotovi kakšen kako je rezultat odvisen od dekoherence in velikosti sistema.

8. **Strelska metoda** Problem lastnih vrednost zapišemo kot $A\vec{v} = \lambda\vec{v}$ za matriko A, vektor $\vec{v}$ in lastno vrednost λ. Schroedigerjeva enačba za kvantni delec je enačba tega tipa (razdelki od 5.3 do 5.7)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

Za parabolično jamo znamo ta problem rešiti točno, glej razdelek 5.9.3. Sedaj potencial malček deformiramo $V(x) = \frac{K}{2}X^2 + \frac{B}{4}X^4$, kjer sta K in B prosta parametra in $B \ll K$.

Možen numeričen način reševanja tega problema je strelska metoda, kjer si izberemo točko $x_0 < 0$ in uganemo vrednost $\psi(x_0)$ in $\psi'(x_0)$. Za dani začetni vrednosti integriramo Schroedigerjevo enačbo in ugotovimo, da rešitev pri velikih vrednostih $x \gg 0$ divergira proti $+\infty$ ali $-\infty$. S popravljanjem vrednosti odvoda v začetni točki $\psi'(x_0)$ poskušamo doseči, da zadostimo robnemu pogoju $\psi(x \gg 0) = 0$. Začetno vrednost lahko popravljaš z bisekcijo ali Newtnovo metodo. Namig: V kolikor je x_0 dovolj daleč od ničle pričakujemo, da bo vrednost $\psi(x_0) \approx 0$.

Nalogo si poenostavimo tako, da za $B = 0$ uporabimo znane vrednosti za lastne energije E, torej

$$E = \hbar\omega(n + 1/2),$$

kjer je $\omega = \sqrt{k/m}$ in $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$ so cela števila. Potem uporabiš točno rešitev kot začetni pogoj za problem z $B \neq 0$. Za lažjo analizo lahko postavite $K = M = 1$.

Razišči odvisnost osnovnega stanja sistema in lastne vrednosti od parametra B. Kaj se zgodi v limiti $B \gg 1$.

9. **Simulacija spina v časovno odvisnem polju**

   V razdelku 3.21 učbenika je zapisana splošna rešitev za časovno odvisnost stanja spina v konstantnem (po času) magnetnem polju v smeri osi z. Podobno lahko izpeljemo tudi rešitev za polje v smeri osi x. Časovno odvisno polje lahko obravnavamo tako, da takšne rešitve uporabimo za kratke časovne intervale Δt.

   a) Izpelji splošno rešitev za gibanje spina v polju, ki kaže v smeri osi x.

   b) Na ta način obravnavaj dinamiko spin v časovno spremenljivem polju, kjer za čas T deluje polje v smeri osi z, nato pa za čas bT deluje polje v smeri osi x, nato pa se cikel ponovi. b je neka majhna konstanta.

   c) Razišči gibanje spina po dolgem času v odvisnosti od vrednosti parametra b.

10. **Lastna stanja molekule - Lennard-Jones potencial**

    Interakcijo med molekulami lahko opišemo z Lennard-Jones potencialom $V(x) = \epsilon[(\frac{\sigma}{x})^{12} - (\frac{\sigma}{x})^6]$, kjer je x razdalja med dvema delcema in ϵ, σ sta prosta realna parametra.

    a) Izpelji v kateri točki je minimum potenciala in kakšna je vrednost energije v klasičnem opisu. Kaj je pomen prostih parametrov?

    b) Numerično najdi lastne funkcije in lastne vrednosti za kvantni delec (Schroedigerjeva enačba). Sistem reši tako, da diskretiziraš prostor in diferencialni operator in nastaviš problem lastnih vrednosti. Slednjega numerično diagonaliziraš, npr. linalg.eigh v Numpy.

11. **Lastna stanja molekule - Morse potencial**

    Interakcijo med molekulami lahko opišemo z Morse potencialom $V(x) = D_e[1-\exp^{-a(x-x_0)}]^2$, kjer je x razdalja med dvema delcema in D_e, a in x_0 so prosti realni parametri.

    a) Izpelji v kateri točki je minimum potenciala in kakšna je vrednost energije v klasičnem opisu. Kaj je pomen prostih parametrov?

    b) Numerično najdi lastne funkcije in lastne vrednosti za kvantni delec (Schroedigerjeva enačba). Sistem reši tako, da diskretiziraš prostor in diferencialni operator in nastaviš problem lastnih vrednosti. Slednjega numerično diagonaliziraš, npr. linalg.eigh v Numpy.

12. **Simulacija ionske pasti**

    Električni potencial, ki ga čutijo ioni v pasti, lahko zapišemo kot

$$\phi_{dc} = U_0[z^2 - (x^2 + y^2)]/2 \qquad \phi_{ac} = (V_0 \cos(\omega t) + U_r)(1 + (x^2 - y^2)/R^2)/2$$

a) Izračunaj silo na ion v vseh treh smereh.

b) Numerično simuliraj gibanje iona v tem časovno odvisnem potencialu. Poišči vrednosti parametrov U_0, V_0, ω, U_r in R, da ion ostane ujet v pasti.

13. **Schmidtov razcep**

Schmidtov razcep ja operacija, pri kateri vektor iz produktnega prostora zapišemo kot linearno kombinacijo vektorjev iz posameznih prostorov:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i |u_i\rangle \bigotimes |v_i\rangle,$$

kjer je n dimenzija posameznega prostora ($n = 2$ za kubit), $|u_i\rangle$ in $|v_i\rangle$ pa vektorja iz posameznih prostorov. Če je v vsoti prisoten le en člen potem je stanje separabilno, drugače je vsaj delno prepleteno. Napiši program, ki generira naključen par kubitov $|\psi\rangle = \alpha|00\rangle + \beta|01\rangle + \gamma|10\rangle + \delta|11\rangle$ za amplitude $\alpha, \beta, \gamma, \delta$, ki so naključno izbrane na intervalu $[0 : 1]$. Stanje normaliziraj, izračunaj Schmidtov razcep in določi entropijo stanja, ki je definirana kot $S = -\sum_{i=1}^{N} |\alpha_i|^2 \log(|\alpha_i|^2)$. Določi histogram vrednosti S za 10000 realizacij.