

マルコフ連鎖モンテカルロ法による量子力学的視覚効果

福井正康

福山平成大学経営学部経営学科

概要 : 我々は College Analysis で幾何シミュレーションのプログラムを作成したが、今回はその中にマルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC) による乱数発生機能を追加し、その乱数により小さな球体を 3 次元上に表示する方法を考えた。これは量子力学の波動関数による粒子の位置の確率密度を、小さな球体の散布密度によって表現しようとする試みである。現実にはこのようなものが見えるわけではなく、学問的には 3 次元のこのような表示はあまり意味がない。これが量子的描像の表示法として、楽しく感じられるかどうか、判断は読者に任せる。

キーワード : College Analysis, 幾何シミュレータ, マルコフ連鎖モンテカルロ法, 量子力学

URL : <http://www.heisei-u.ac.jp/ba/fukui/>

1. はじめに

我々は College Analysis で幾何シミュレーションのプログラムを作成し、質点系の力学や重力、及び電磁力学を組み込んで来た。今回はその中にマルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC) による乱数発生機能を追加し、その乱数により、小さな球体を 3 次元上に数多く表示する方法を考えた。これは量子力学の波動関数による粒子の位置の確率密度を、小さな球体の散布密度によって表現しようとする試みである。散布点を粒子のようにボールで表すと、観測回数を多くした場合の観測値の具体的な例になっている。また、球体の半径を少し大きく、半透明にすると、画面上には雲のようなものが現れる。これには視線上に粒子がある確率を雲の色の濃さで表現しているという解釈が可能である。

現実にはこのようなものが見えるわけではなく、学問的には 3 次元のこのような表示は精密性に欠ける。これが量子的描像の表示法として、ある程度納得でき、楽しく感じられれば著者の意図は伝わったものと考ええる。

MCMC による乱数発生はすでに参考文献[1]の中で議論したが、今回は Metropolis-Hastings アルゴリズムによる 3 次元の乱数発生である。波動関数では直交座標よりむしろ極座標がよく利用されるので、波動関数中に使用できる座標系は直交座標系 (x, y, z) と極座標系 (r, θ, ϕ) にしている。2 つの座標系が混合して使われている場合も含む。

2. データの格納法と利用法

幾何シミュレーションの中で用いた MCMC 乱数発生では、描画が始まる前に、発生された乱数を格納し、描画ごとにその中から順番にデータを取り出して表示に利用する。データを格納する構造体は以下である。

```

Structure a3_mcmc
    Dim name As String      '乱数名
    Dim fnc As String      '密度関数（定数は除く）
    Dim pfnc As String     '密度関数逆ポーランド
    Dim no As Integer      '乱数の数
    Dim x1() As Double     'x 成分
    Dim x2() As Double     'y 成分
    Dim x3() As Double     'z 成分
    Dim init() as Double   'mcmc 初期値
End Structure

```

乱数発生の利用法は以下の書式に従う。

```
mcmc a, func(x,y,z), no [, x0, y0, z0]
```

`a` は発生した乱数の名前、`func(x,y,z)` は乱数の直交座標系における確率密度関数である。確率密度関数の変数名には基本的に直交座標の変数 `x, y, z` を使うが、極座標の変数 `r, th, ph` (r, θ, φ に相当) も混在させることができる。これらの極座標の変数は自動的に直交座標の変数 `x, y, z` に変換されるようになっている。また MCMC には、確率密度関数の定数倍の自由度があるので、規格化定数は不要である。

MCMC では初期値の与え方により、その後の計算が極端に遅くなる場合がある。これは初期値が分布の中心から遠く離れている場合で、状況によっては計算機の演算誤差により、計算値が 0 に判定され、計算が実行できなくなることもある。何もオプションを指定しなければ、初期値の値は 3 軸とも $-0.5 \sim 0.5$ の間の一様乱数 (RND-0.5 で指定) になっているが、乱数発生の中心を `x0, y0, z0` にずらす機能を加えてある。必要に応じて利用すると効率の良い乱数発生となる。

現在この乱数構造体を利用できる描画命令は `ball` だけであるが、他の命令に拡張することは容易である。利用法の例は以下である。

```

axis                '軸表示
range -10,10       '範囲の変更
mcmc a, exp(-r/2)*cos(th)*cos(ph), 10000 '名前 a で 10000 個の乱数を格納
loop 10000         '10000 回の繰り返し
    ball(ax,ay,az),0.1,&H0 '名前 a を先頭に付けて(ax,ay,az)で指定
endloop

```

ここに、乱数発生の密度関数は $f(x) \propto \exp(-r/2) \cdot \cos(\theta) \cdot \cos(\varphi)$ である。このプログラムの実行結果は図 1 のようになる。

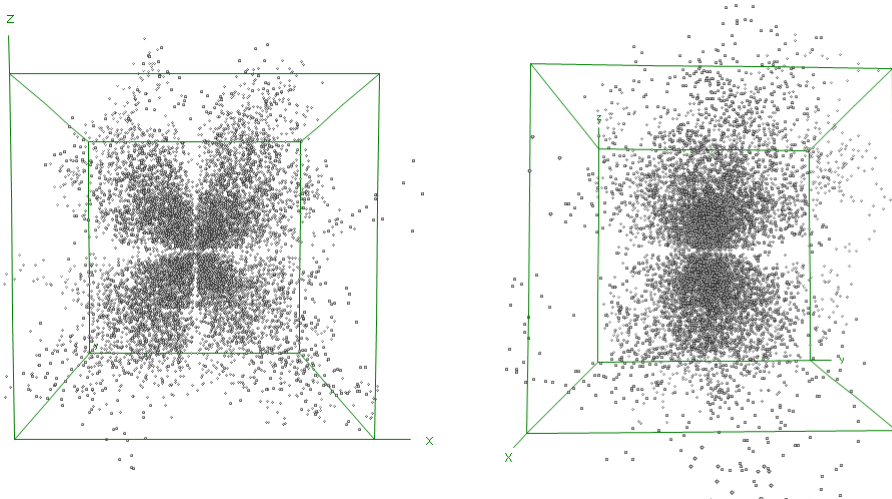


図1 $f(\mathbf{x}) \propto \exp(-r/2) \cdot \cos(\theta) \cdot \cos(\phi)$ の 10000 点散布図

左はy軸逆方向から見た図で、右はx軸方向から見た図である。点の数の上限はデフォルトで30000点であるが、maxball n の指定で数を増やすこともできる。この乱数発生にはどのような応用が可能であろうか。

3. 量子力学的描像への応用

量子力学では粒子の位置は確率でのみ表現され、観測するまで分からない。存在の確率密度は粒子の波動関数の絶対値の2乗 $f(t, \mathbf{x}) = |u(t, \mathbf{x})|^2$ で表される。

MCMC では任意の確率分布の乱数発生を可能にするため、量子力学で与えられる確率密度関数 $|u(t, \mathbf{x})|^2$ に対して粒子の存在確率の乱数表示が可能である。即ち、粒子の存在確率を点の密度で表すことができるはずである。さらに、粒子の半径を少し大きくして半透明にすると雲のような図が得られる。半透明の部分を重ねるとその部分は色が濃くなるので、色の濃さがある視点から見た方向の粒子の存在確率に近似的に比例すると考えてもよい。もちろん、乱数の個数が有限であるので、正確な値ではないが、個数を無限個に、半径と透明度を0に近づけた極限ではこの描像は正しい。この意味でMCMCによる乱数発生は、荒い精度であるが、密度関数を色の濃さで見ると近似法と考えられる。

厳密性に欠けて物理学としては問題があるが、この表現法は気軽に量子力学の雰囲気に触れることができるという意味で、啓蒙的な観点からは興味深いものがある。どのような表現になるか、実際の例を使って調べてみる。

中心ポテンシャルの定常的な波動方程式は以下となる^[2]。

$$-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 u + V(r)u = Eu$$

これは一般に極座標変換して以下で表される。

$$-\frac{\hbar}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] u + V(r)u = Eu$$

(1)

この方程式には変数分離形の以下の解があり、

$$u(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$$

波動関数 $R(r)$, $Y(\theta, \varphi)$ はそれぞれ以下の波動方程式を満たす。

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R = ER \quad (2)$$

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right] = l(l+1)\hbar^2 Y \quad (3)$$

ここに、 $l = 0, 1, 2, \dots$ である。

動径方向の波動方程式(2)の解はポテンシャル $V(r)$ の形で決まる。我々は例として水素原子の場合の密度関数を考える。ポテンシャルは陽子の周りの以下のクーロンポテンシャルを考える。

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

水素原子の動径方向の波動関数 $R_{nl}(r)$ は以下で与えられることが知られている。

$$R_{nl}(r) = -\left\{ \left(\frac{2}{nr_0} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{1/2} e^{-r/nr_0} (2r/nr_0)^l L_{n+l}^{2l+1}(2r/nr_0) \quad (4)$$

ここに $n = 1, 2, 3, \dots$, $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$

ここで、 $L_n^k(x)$ はラゲールの陪多項式で、以下で与えられる。

$$L_n^k(x) = \frac{d^k}{dx^k} \left\{ e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}) \right\} = \sum_{m=0}^{n-k} (-1)^{m+k} \frac{(n!)^2}{m!(m+k)!(n-m-k)!} x^m$$

方程式(3)の解 $Y(\theta, \varphi)$ を球面調和関数というが、それは以下となる。

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \sqrt{\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad (5)$$

ここに $l = 0, 1, 2, \dots$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$

ここで、 $P_l^{|m|}(z)$ はルジャンドルの陪多項式と呼ばれ、以下で与えられる。

$$P_l^{|m|}(z) = \frac{1}{2^l l!} (1-z^2)^{|m|/2} \frac{d^{l+|m|}}{dz^{l+|m|}} (z^2-1)^l = (1-z^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dz^{|m|}} P_l(z)$$

これらの定義を参考文献[3]の定義

$$\tilde{P}_l^{|m|}(x) = (-1)^{|m|} (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_l(x) \quad \text{参考文献[3]の定義}$$

$$\tilde{Y}_{l,m}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \tilde{P}_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad \text{参考文献[3]の定義}$$

と比較すると、次のような関係になる。

$$P_l^{m|}(z) = (-1)^{-|m|} \tilde{P}_l^{m|}(z)$$

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{(m-|m|)/2} \sqrt{\frac{(2l+1)}{4\pi}} \tilde{Y}_{lm}(\theta, \varphi)$$

我々のプログラムでは参考文献[3]の定義を使っている。

以上をまとめると、主量子数 n , 軌道 (方位) 量子数 l , 磁気量子数 m の水素原子の波動関数は (4)式と(5)式を使って以下となる。

$$u(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

我々の目的は粒子の存在確率を MCMC で乱数表示することであるので、定数倍については省略しても構わない。そのため以下の関係を得る。

$$|u(r, \theta, \varphi)|^2 \propto \left[e^{-r/nr_0} (2r/nr_0)^l L_{n+l}^{2l+1}(2r/nr_0) P_l^{|m|}(\cos \theta) \right]^2 \quad (6)$$

これらの波動関数がどのような形で表示されるか、またははっきりと視覚的に区別できるか興味深い。以後主量子数 $n \leq 3$ の場合について、図 2 から図 4 に、黒の背景に白い半透明な小さな円を 50,000 点打って示す。軸は $\pm 20 \times$ ボーア半径 r_0 である。2つ並んだ図は左側が y 軸負の方向から、右側が z 軸正の方向から見た図である。

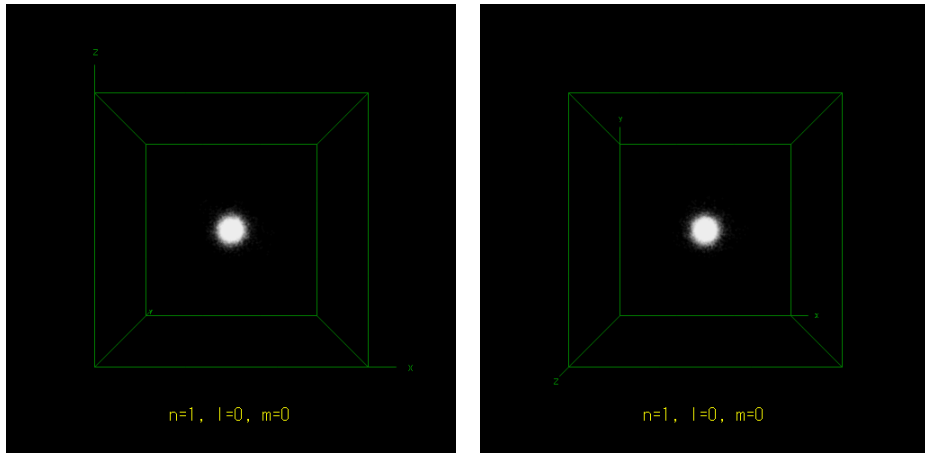


図 2 $n = 1, l = 0, m = 0$ のとき $|u|^2 \propto \left[e^{-r/r_0} \right]^2$

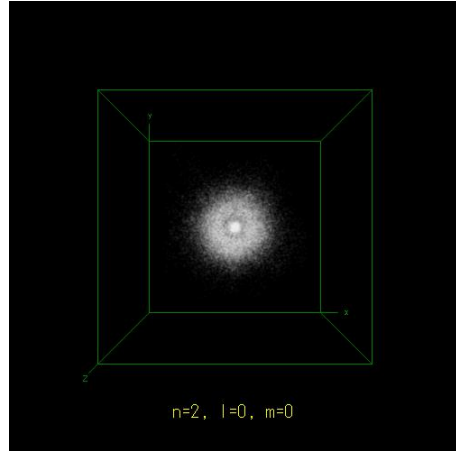
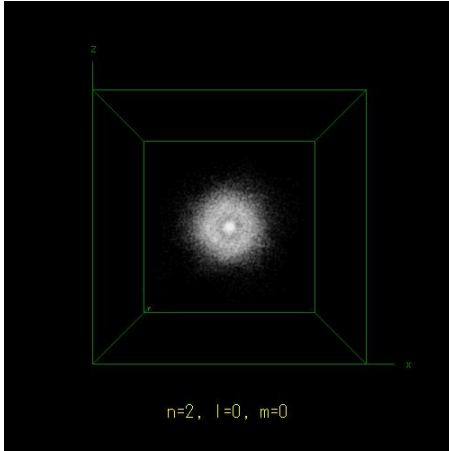


図 3a $n=2, l=0, m=0$ のとき

$$|u|^2 \propto \left[(2 - r/r_0) e^{-r/2r_0} \right]^2$$

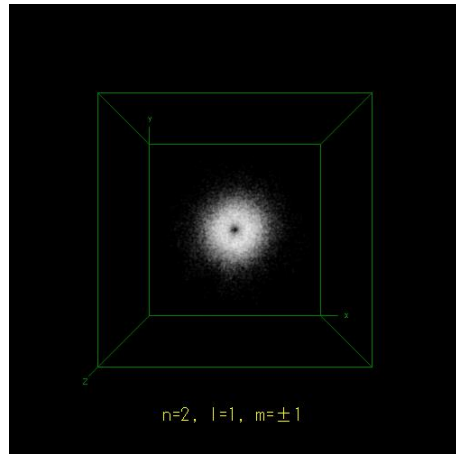
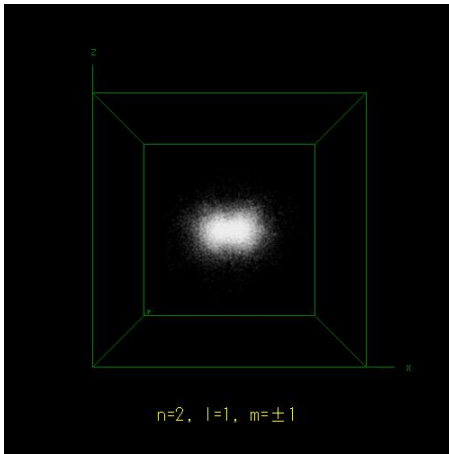


図 3b $n=2, l=1, m=\pm 1$ のとき

$$|u|^2 \propto \left[(r/r_0) e^{-r/2r_0} \sin \theta \right]^2$$

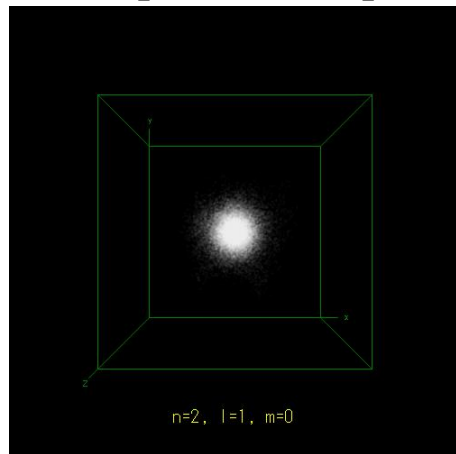
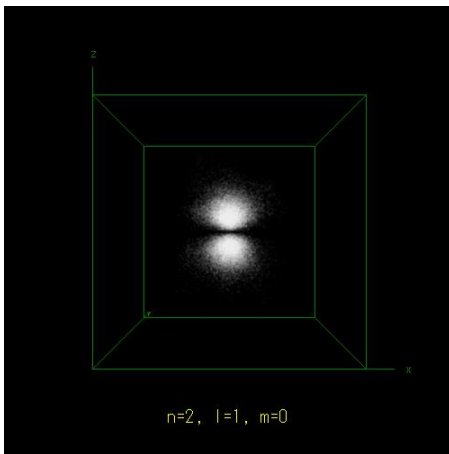


図 3c $n=2, l=1, m=0$ のとき

$$|u|^2 \propto \left[(r/r_0) e^{-r/2r_0} \cos \theta \right]^2$$

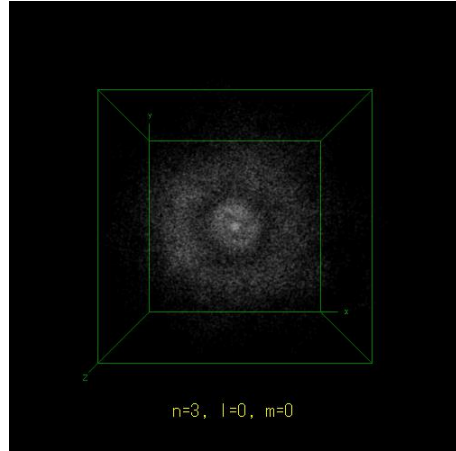
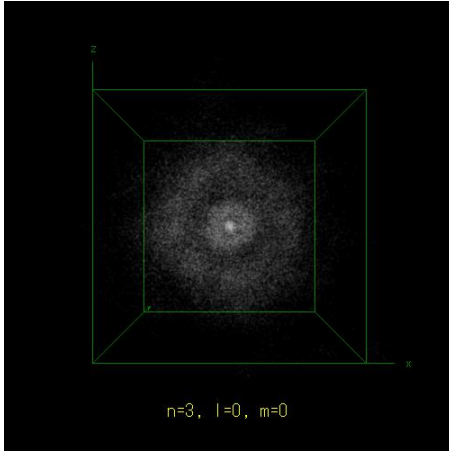


図 4a $n=3, l=0, m=0$ のとき

$$|u|^2 \propto \left[(3 - 2r/r_0 + 2r^2/9r_0^2) e^{-r/3r_0} \right]^2$$

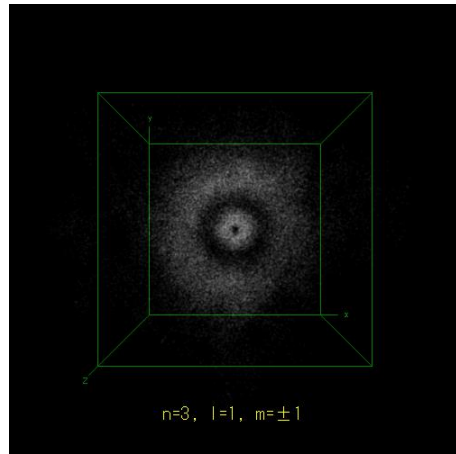
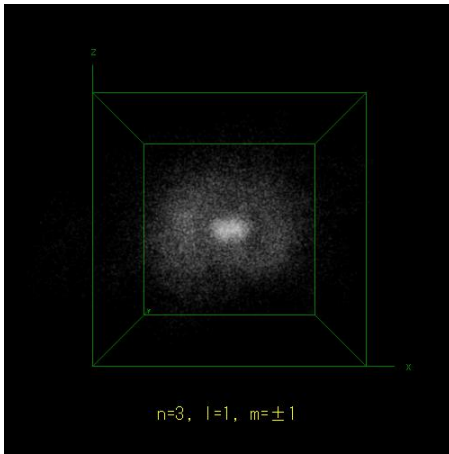


図 4b $n=3, l=1, m=\pm 1$ のとき

$$|u|^2 \propto \left[(2r/r_0 - r^2/3r_0^2) e^{-r/3r_0} \sin \theta \right]^2$$

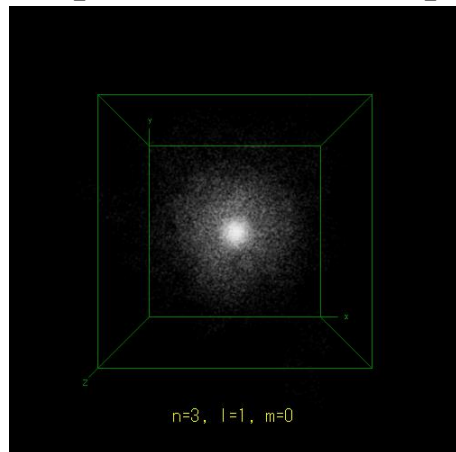
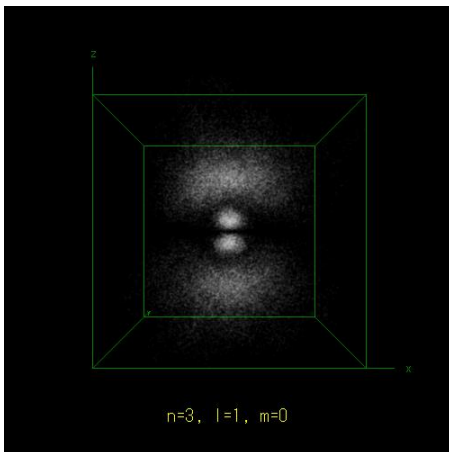


図 4c $n=3, l=1, m=0$ のとき

$$|u|^2 \propto \left[(2r/r_0 - r^2/3r_0^2) e^{-r/3r_0} \cos \theta \right]^2$$

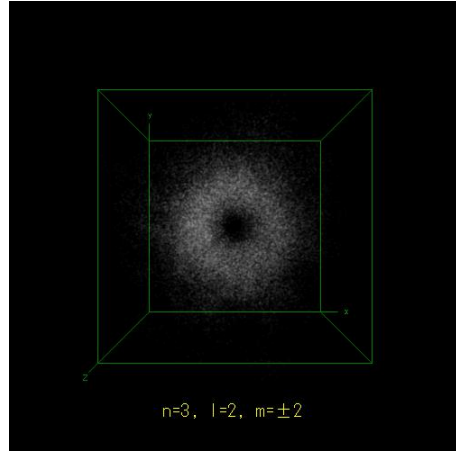
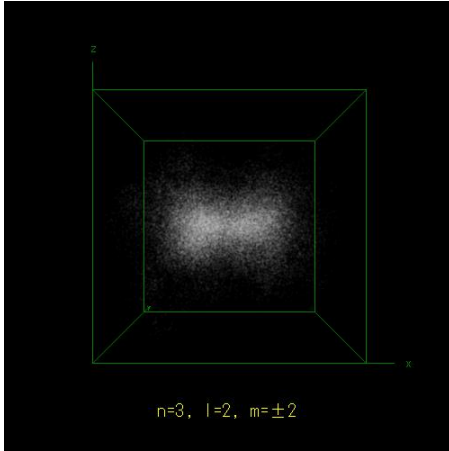


図 4d $n=3, l=2, m=\pm 2$ のとき

$$|u|^2 \propto \left[(r^2/r_0^2) e^{-r/3r_0} \sin^2 \theta \right]^2$$

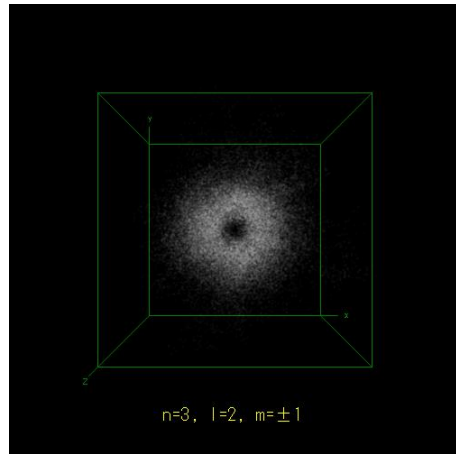
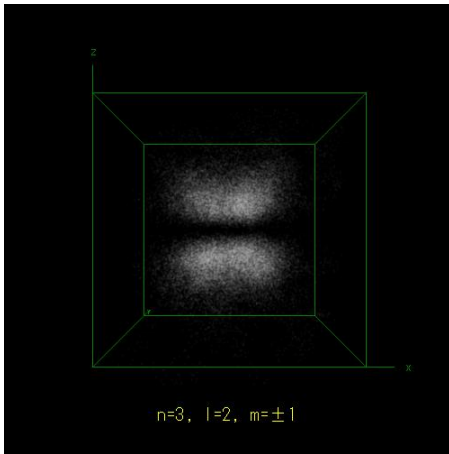


図 4e $n=3, l=2, m=\pm 1$ のとき

$$|u|^2 \propto \left[(r^2/r_0^2) e^{-r/3r_0} \sin \theta \cos \theta \right]^2$$

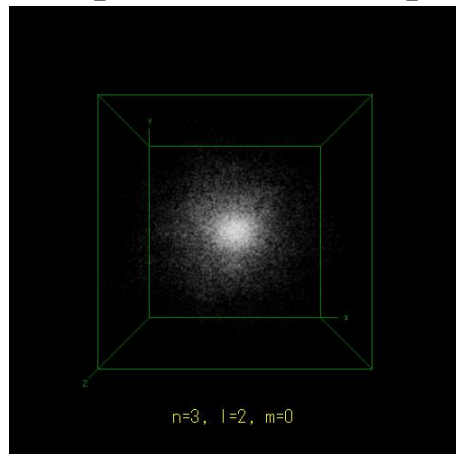
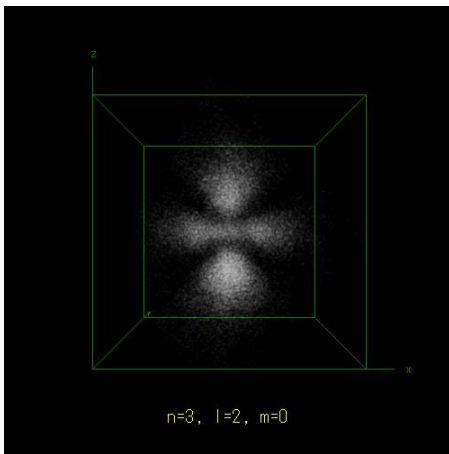


図 4f $n=3, l=2, m=0$ のとき

$$|u|^2 \propto \left[(r^2/r_0^2) e^{-r/3r_0} (3\cos^2 \theta - 1) \right]^2$$

これらの図を見るとそれぞれの量子状態の差がはっきりと表れている。主量子数の大きさに応じて領域は広がり、また磁気量子数の絶対値が大きい場合には z 軸の周りに広がっていることがよく分かる。

4. おわりに

我々は MCMC の乱数発生法を量子力学の視覚化に利用することを考え、幾何シミュレーションのプログラムの中に、MCMC による乱数発生のコマンドとその発生された乱数を ball の表示に利用する機能を組み込んだ。乱数発生数はここでは 50,000 点で図を描いたが、10,000 点くらいまで数を減らすことも可能である。その際は点の半径を少し大きくして、不透明度を上げると比較的きれいに表示される。これらの視覚的な効果はプログラム化する前に考えていた以上であり、簡単に 3 次元で描画でき、角度を変えて見ることができることは教育的にも価値があるものとする。

現在われわれのシミュレーションは、解かれた数式を用いて乱数発生を行っているが、本来は任意のポテンシャルに対して波動方程式を理論的または数的に解くことが重要であり、図を描画することの価値は興味以外にはあまりない。今後の幾何シミュレーションの進展のためには偏微分方程式の解法の導入が不可欠である。

任意乱数を利用した点の描画は、ここで述べた問題以外にも様々な利用法が考えられる。例えば銀河の描画などにもうまく利用できるかもしれないし、シミュレーションの初期設定等にも利用できそうである。今後のアニメーションやシミュレーションの可能性のために任意乱数の発生機構を組み込んだ意味は大きい。

謝辞

電子の確率的な描画法及びその解釈について福井敬司氏より適切な助言をいただきました。心より感謝致します。

参考文献

- [1] 社会システム分析のための統合化プログラム 2 1 - 乱数生成と検定 -, 福井正康・孟紅燕・呉夢・崔永杰, 福山平成大学経営研究, 第 10 号, (2014) 63-78.
- [2] 岩波基礎物理シリーズ 5 量子力学, 原康夫, 岩波書店, 1994.
- [3] College Analysis による物理シミュレーション 2 - 電荷と電場・電流と磁場 -, 福井正康, 福山平成大学経営研究, 第 9 号, (2013) 81-105.