中部大学

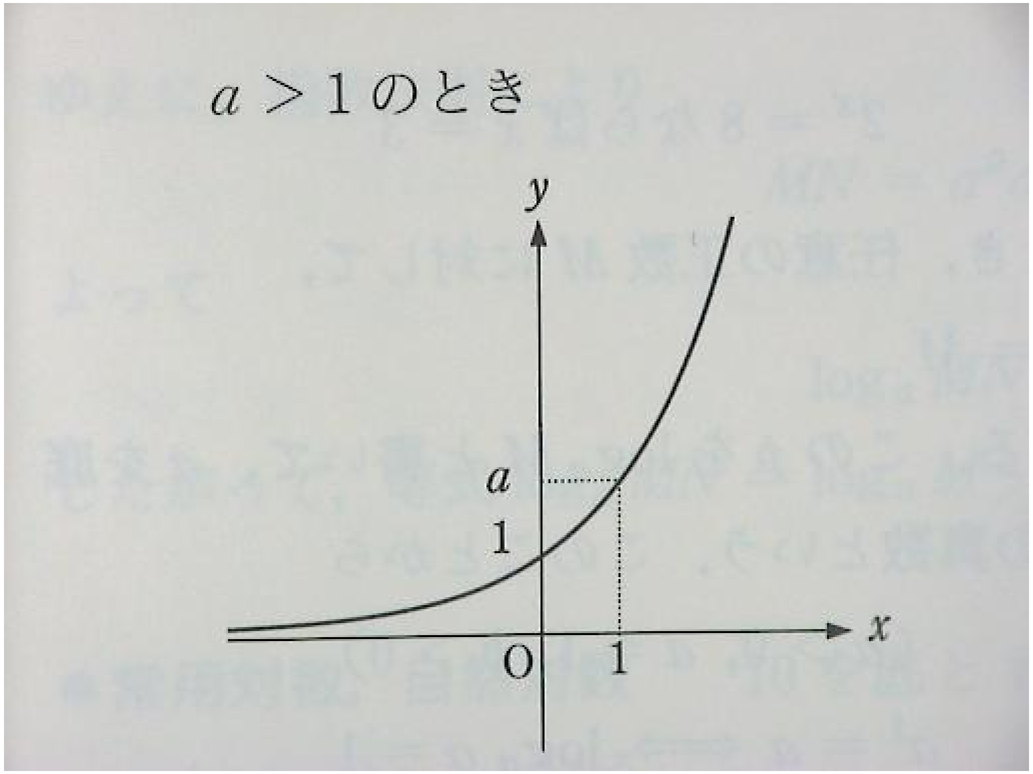
交換しない数の指数関数

中部大学　工学部　理学教室

小林　礼人

http://pauli.isc.chubu.ac.jp/~hiroto/

指数関数



指数関数 $y = e^x$ について、

指数法則 $e^{x+y} = e^x e^y$ が成り立つ

例 : $e^{2+1} = e^3 = e \times e \times e = (e \times e) \times e = e^2 \times e^1$

より一般的に $f(x+y)=f(x)f(y)$

と書き、これを y で微分して

$y=0$ とすると $f'(x)=f(x)f'(0)$

となるから、（定数倍を除いて）

微分方程式 $\dfrac{df}{dx}=f$ を得る

これは変数分離形であるから

$\dfrac{df}{f} = dx$ より $\log|f| = x + C$

すなわち（定数倍を除いて）

$f = e^x$ が導ける

微分方程式 $\dfrac{df}{dx} = f$ を満たす

関数を指数関数と定義しても良い。

対数 $\log$ を知らなかったとしても

級数解 $f = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots$ を仮定

級数解を仮定すれば微分方程式より

$$(n+1)a_{n+1} = a_n$$ となり

（定数を除いて）

$$f = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \cdots + \frac{1}{n!}x^n + \cdots$$ を得る

e^{at} の微分は $\dfrac{d}{dt}e^{at} = ae^{at}$

であるから、微分方程式

$\dfrac{d}{dt}x(t) = ax(t)$ の解は

$x(t) = e^{at}x(0)$ で表される

ベクトル $\vec{v}$ についての微分方程式

$$\frac{d}{dt}\vec{v}(t) = A\vec{v}(t)$$

（ A は行列）の解はどのように表されるのであろうか

$$e^x = 1 + x + \frac{1}{2}x^2 + \cdots + \frac{1}{n!}x^n + \cdots$$

を指数関数の定義とし

$$e^{tA} = 1 + tA + \frac{1}{2}t^2 A^2 + \cdots$$

を考える

$$\frac{d}{dt}e^{tA} = \frac{d}{dt}\left(1 + tA + \frac{1}{2}t^2A^2 + \cdots\right)$$

$$= A + tA^2 + \frac{1}{2}t^2A^3 + \cdots$$

$$= A\left(1 + tA + \frac{1}{2}t^2A^2 + \cdots\right) = Ae^{tA}$$

微分方程式

$$\frac{d}{dt}\vec{v}(t) = A\vec{v}(t)$$ の解は

$$\vec{v}(t) = e^{tA}\vec{v}(0)$$ で表される

例：（時間に依存する）
シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t)=H\psi(t)$$

形式解 $$\psi(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}tH}\psi(0)$$

統計力学における密度行列

$$\rho = e^{-\frac{1}{kT}H}$$

も指数関数で表される

行列の指数関数

$$e^{tA} = 1 + tA + \frac{1}{2}t^2A^2 + \cdots + \frac{1}{n!}t^nA^n + \cdots$$

すべての n について A^n を計算する方法は実用的でない

→ 対角化

A : エルミート行列

U : ユニタリー行列

$$U^{+}AU = \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{pmatrix}$$

$$\Lambda^2 = \begin{pmatrix} {\lambda_1}^2 & & & 0 \\ & {\lambda_2}^2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & {\lambda_n}^2 \end{pmatrix}$$

$$\Lambda^p = \begin{pmatrix} \lambda_1{}^p & & & 0 \\ & \lambda_2{}^p & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n{}^p \end{pmatrix}$$

$$A^n = (UU^+)A^n(UU^+) = U(U^+A^nU)U^+$$

$$= U(U^+AU)^nU^+ = U\Lambda^nU^+$$

対角化すれば指数関数も容易に求められる

$$e^{tA} = (UU^+)e^{tA}(UU^+) = U(U^+e^{tA}U)U^+$$

$$= Ue^{tU^+AU}U^+ = Ue^{t\Lambda}U^+$$

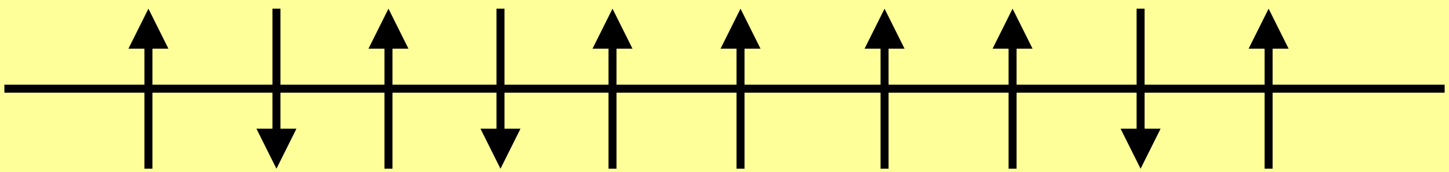
$$e^{t\Lambda} = \begin{pmatrix} e^{t\lambda_1} & & & 0 \\ & e^{t\lambda_2} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & e^{t\lambda_n} \end{pmatrix}$$

行列の指数関数の計算

＝ほとんどが対角化の計算

数値対角化の手法は多数ある

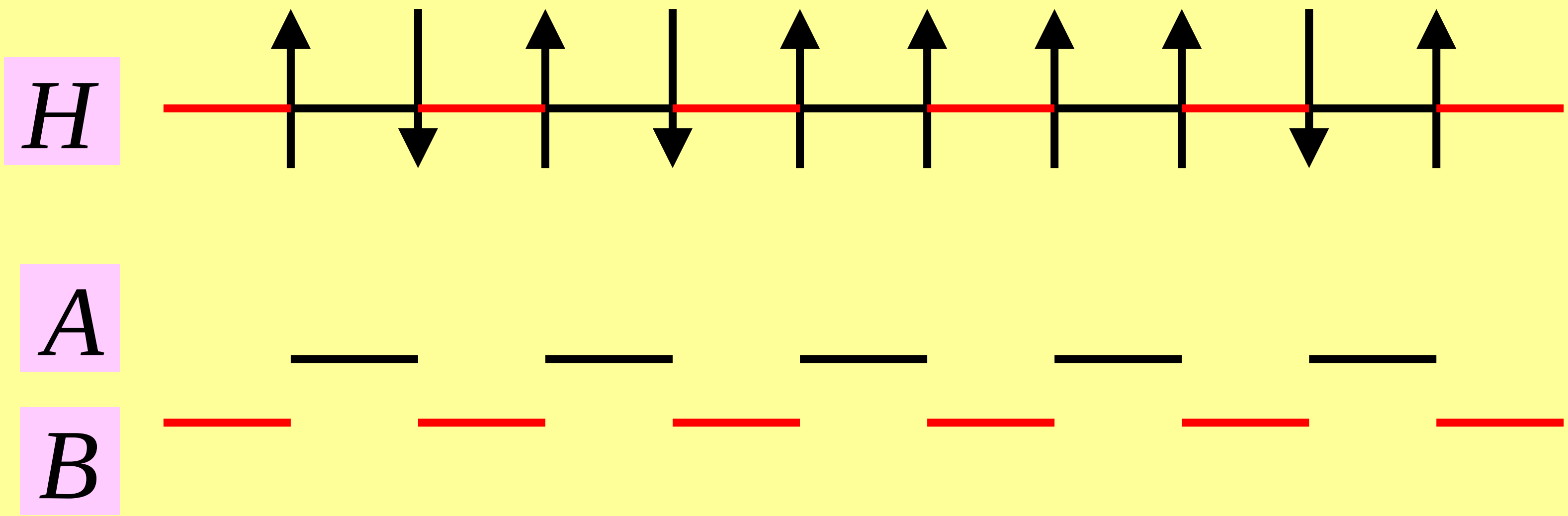
S=1/2 のスピンがN個ある系



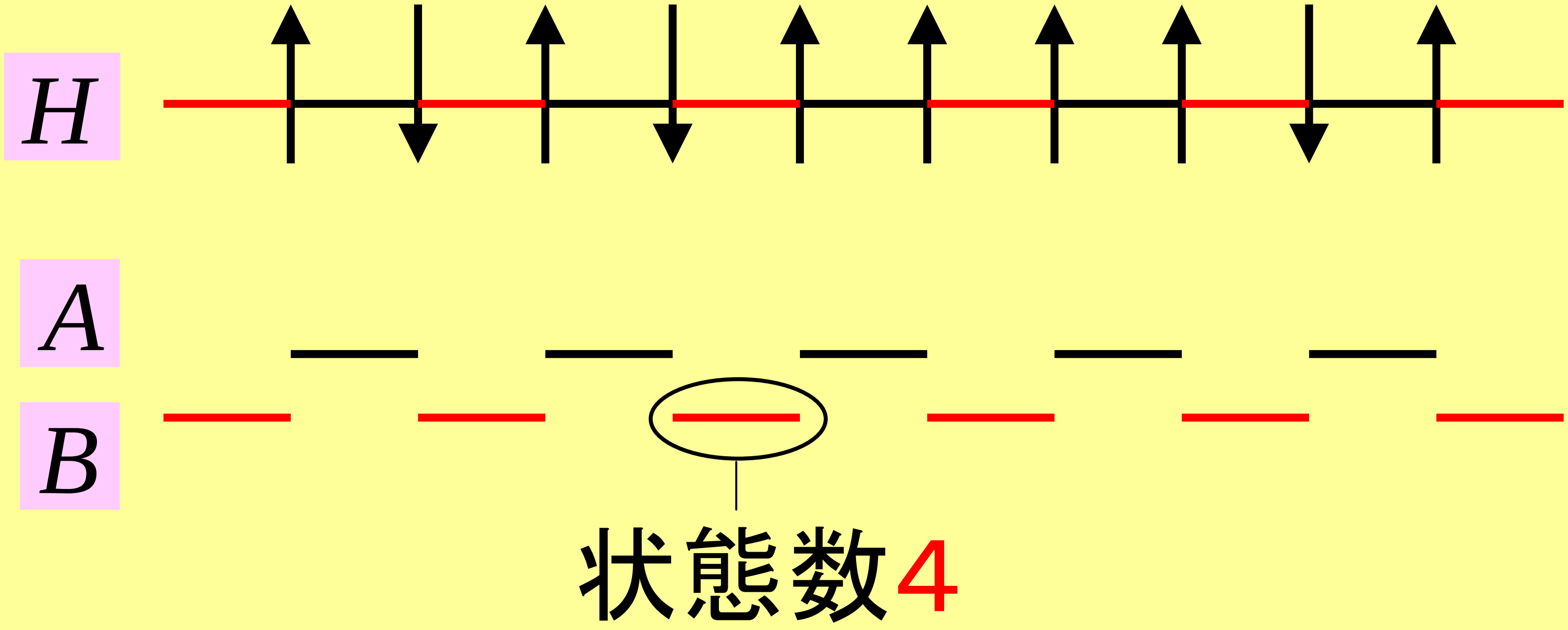
状態数 2^N 個

（行列要素 2^{2N} 個）

偶数番目と奇数番目のボンドに分ける



偶数番目と奇数番目のボンドに分ける



A 、B :それぞれ対角化可能

$$e^{xH} = e^{x(A+B)}$$

A 、B :非可換 $AB \neq BA$

$$e^{x(A+B)} \neq e^{xA} e^{xB}$$

$$e^{xA} = 1 + xA + \frac{1}{2}x^2A^2 + \cdots$$

$$e^{xB} = 1 + xB + \frac{1}{2}x^2B^2 + \cdots$$

$$e^{xA}e^{xB} = \left(1 + xA + \frac{1}{2}x^2A^2 + \cdots\right)\left(1 + xB + \frac{1}{2}x^2B^2 + \cdots\right)$$

$$= 1 + xA + xB + \frac{1}{2}x^2A^2 + \frac{1}{2}x^2B^2 + x^2AB + \cdots$$

$$e^{x(A+B)} \neq e^{xA}e^{xB}$$

$$e^{x(A+B)} \neq e^{xA} e^{xB}$$ ではあるが

Trotter の公式が成り立つ

$$e^{x(A+B)} = \lim_{n\to\infty}\left(e^{\frac{x}{n}A} e^{\frac{x}{n}B} \right)^n$$

中部大学

状態和の計算

$$Z = Tr\, e^{xH} = Tr\, e^{x(A+B)};\ x = -\frac{1}{k_B T}$$

有限のnからn無限大への外挿

$$Z = Tr\, e^{xH} = \lim_{n \to \infty} Tr\left(e^{\frac{x}{n}A} e^{\frac{x}{n}B} \right)^n$$

状態和Zと自由エネルギーFとの関係

$$F = -k_B T \log Z$$

$$= -k_B T \log Tr\, e^{-\frac{1}{k_B T}H}$$

＜トレース不等式＞

$$Tr\, e^{x(A+B)} \le Tr\, e^{xA} e^{xB}$$

S. Golden: Phys. Rev. B **137** (1965) 1127.
K. Symanzik: J. Math. Phys. **6** (1965) 1155.
C.J. Thompson: J. Math. Phys. **6** (1965) 1812.

トレース不等式の拡張

$$Tr\ e^{x(A+B)} \le Tr\left(e^{\frac{x}{n}A} e^{\frac{x}{n}B} \right)^n$$

M. Suzuki: J. Stat. Phys. **43** (1986) 883.

＜＜q-変形＞＞

$$[A,B]_q = AB - qBA = 0$$ ：q−可換

$$e^{A+B} = ? \qquad e^{A}e^{B} = ?$$

中部大学

次回予告（2007年春学期）

「熱と温度はどう違う？」