Traitement quantique de l'information I (automne 2009)
Série 1: Complexité des systèmes à N-corps classique et quantique

Condidérez le système de N particules de masse m. Les particules sont soumises à une interaction mutuelle, caractérisée pare une force $F(\vec{r})$. Donc la force agissant sur la particule j-ème, due à la particule k-ème, est

$$\vec{F}_j = \vec{F}(\vec{r_j} - \vec{r_k})$$

En physique classique, la loi de Newton régit le mouvement des particules. L'accélération de la j-ème particule, au temps t, est donnée par

$$\vec{a_j} = \frac{1}{m}\vec{F}_j(t).$$

Nous voulons écrire une simulation numérique du système. A ce propos, nous allons considérer des pas discrets dans le temps, Δt. Nous voulons calculer les positions $\vec{r_j}(n\Delta t)$ des N particules au temps $t = n\Delta t$ pour $n = 0, 1, \ldots, n_{\max}$.

***

1. Ecrire un Flow-Chart de la simulation numérique
2. Estimer la complexité de l'algorithme en fonction du nombre N de particules.

Suggestion: On a

$$\begin{aligned}\vec{v_j}(t) &= \frac{d\vec{r_j}(t)}{dt}\\ \vec{a_j}(t) &= \frac{d\vec{v_j}(t)}{dt}\end{aligned}$$

***

En mécanique quantique, l'état d'un système de N particules est décrit par une "fonction d'onde" $\Psi(\vec{r_1}, \ldots, \vec{r_N}, t) \,:\, \mathbb{R}^{3N+1} \to \mathbb{C}$. L'évolution temporelle de Ψ est déterminée par un opérateur linéaire unitaire $U(t'-t) \,:\, t' > t$

$$\Psi(\vec{r_1}, \ldots, \vec{r_N}, t') = U(t'-t)\Psi(\vec{r_1}, \ldots, \vec{r_N}, t).$$

Répétez l'analyse des points (1) et (2). dans ce cas. Suggestion: Considérer l'espace aussi comme un ensemble d'éléments de volume discrets $\Delta\vec{r}$. En particulier: $\vec{r_j} = (n_x\Delta x, n_y\Delta_y, n_z\Delta_z)$. Se restraindre à une région finie de l'espace: $n_{x,y,z} = 0, 1, \ldots, n_{x,y,z,max}$. Dans ce cas, l'opérateur U est décrit par une matrice (de quelle dimension?).