

1. 理工学 ITC のワークステーション・ルームのワークステーションにログインし、作業用ディレクトリディレクトリ `~/comp-phys/j5` を作成する。作業はこのディレクトリで行う。

2. LAPACK のオンラインマニュアルとしてテキスト 100,114 頁の説明を読んでみる。

3. テキスト 95 頁の課題 6-A

(a) ディレクトリ `/home/kyozai/jy/comp-phys/sec6` の下のファイル `eigen1.f90` を作業用ディレクトリ `~/comp-phys/j5` にコピーする。

(b) テキスト 107–110 頁の説明、111 頁のプログラムのリストを読み、`eigen1.f` の各ブロックでの処理を理解する。特に、`dseig2` の使われ方に注意する (テキスト 105–106 頁の `dseig2` のオンライン・マニュアル参照)。

(c) 次に、テキスト 114–117 頁の説明、120 頁のプログラムのリストを読み、`dspev` の使われ方が、SSL 2 版とどのように違うかを理解する (テキスト 116–117 頁の `dspev` のオンライン・マニュアル参照)。

(d) `eigen1.f90` をコンパイル、リンクして実行ファイルを作る。

(e) 解析的な解との比較

- `eigen1.f90` を用いて $N = 10$ の場合に ω/ω_0 を計算し、結果をファイルに保存する。
- $N = 2n$ の場合の解析的な結果 (テキスト 89 頁)
 $\omega_j/\omega_0 = 2|\sin(\pi j/N)|$, $j = -n+1, -n+2, \dots, -1, 0, 1, \dots, n$ を計算するプログラムを作り、 $N = 10$ の場合に実行し、結果をファイルに保存する。
- `eigen1.f90` の結果と解析的な結果を比較する (目で見て対応と精度を確認する)。

(f) 状態密度の計算

- `eigen1.f90` を用いて $N = 200$ の場合に ω/ω_0 を計算し、結果をファイルに保存する。それらのヒストグラムから状態密度を求める。

▷ 角振動数 $\omega \sim \omega + d\omega$ の間のモードの数を $N(\omega)d\omega$ とするとき、この $N(\omega)$ を状態密度と呼ぶ (テキスト 95–97 頁参照)。

▷ 今の場合、 $N \rightarrow \infty$ に対する解析的な結果は $N(\omega) = \frac{N}{\pi} \frac{1}{\omega_0 \sqrt{1 - \omega^2/(4\omega_0^2)}}$ で与えられる (テキスト 97 頁)。

▷ $x = \omega/\omega_0$ とすると、`eigen1.f90` は N 個の x を出力する。 x の値を x_0 から始めて Δx ごとに区切って $x_i = x_0 + i\Delta x$, $i = 0, 1, 2, \dots$ とし、 $[x_i, x_{i+1})$ の間の x の個数 n_i を求める。 $\frac{n_i}{N\Delta x}$ が上記の $\frac{N(\omega)\omega_0}{N} = \frac{1}{\pi\sqrt{1 - (\omega/\omega_0)^2/4}}$ に対応する。

- ▷ ディレクトリ /home/kyozai/jy/comp-phys/sec6 の下のファイル hist.f90 を作業用ディレクトリ ~/comp-phys/j5 にコピーする。このプログラムは x の最小値 x_{\min} , 最大値 x_{\max} , その間を分割する個数 m , 入力ファイル名を入力すると、 $x_0 = x_{\min}$, $\Delta x = (x_{\max} - x_{\min})/m$, $x_i = x_0 + i\Delta x$ として、入力ファイルから (ファイルが終りになるまで) x を読み込んで、 n_i , $i = 0, 1, \dots, m$ を計算し、 $x_i + \frac{1}{2}\Delta x$, $n_i/(N\Delta x)$ を $i = 0, 1, \dots, m$ に対して出力する。
- ▷ hist.f90 をコンパイル、リンクして実行ファイルを作り、実行する。最小値を 0, 最大値を 2, 分割数を 20 とし、入力ファイルとして eigen1.f90 の出力ファイルを指定する。結果をファイルに保存する。
- ▷ 結果を柱状グラフで表示するには gnuplot 中で
`plot 'ファイル名' with boxes`
とタイプする。
- ▷ $N \rightarrow \infty$ に対する解析的な結果 (テキスト 90 頁) $\frac{N(\omega)\omega_0}{N} = \frac{1}{\pi\sqrt{1-x^2/4}}$,
 $x = \omega/\omega_0$ を線グラフで、hist.f90 の結果を柱状グラフで同時にプロットして比較する。そのためには、gnuplot 中で hist.f90 の結果を柱状グラフで表示した後、
`replot 1/(pi*sqrt(1-x**2/4))`
とタイプすればよい。プロットの範囲は `set xrange ...` で指定する。
- 分割数を 30, 40 等に変えて同様の計算をしてみよ。

4. テキスト 97-99 頁の課題 6-B

(a) テキスト 112-114 頁を参考に、eigen1.f90 を改造する。

- パラメーター入力 で $\gamma = M_2/M_1$ を変数 gamma に読み込み、検査するようになる。
- 行列要素の計算 の部分に関して
 - ▷ eigen1.f90 のこの部分は、すべての $i \geq j$ に対して $A_{i,j} = 2\delta_{i,j} - \delta_{i+1,j} - \delta_{i-1,j}$ を計算し、`rmatrx(k)` ($k = i * (i - 2)/2 + j$) に代入している。図 J5-1 の PAD 参照。
 - ▷ テキスト 113 頁にあるように、課題 6-B では、上記の $A_{i,j}$ のかわりに、 $\hat{A}_{i,j} = b_i A_{i,j} b_j$ を行列要素とすればよい。ただし、 i が奇数なら $b_i = 1$, i が偶数なら $b_i = \gamma^{-1/2}$ 。
 - ▷ そこで、以下のように、プログラムを変更すれば良い。図 J5-2 の PAD 参照。
 - * i が奇数、偶数のときの b_i の値をそれぞれ `bodd`, `beven` として設定しておく。
 - * i のループの中で、 i が奇数か偶数かに応じて `bodd` か `beven` を b_i を表す変数 `bi` に代入する。

* j のループの中で、 j が奇数か偶数かに応じて bodd か beven を b_j を表す変数 bj に代入する。

* rmatrx(k) に $A_{i,j}$ が代入された後で rmatrx(k) に b_i と b_j をかける。

(b) $N = 200$, $\gamma = 1, 2, 4, 8$ の場合に ω/ω_0 を計算し状態密度を求める。

5. レポート

- テキスト 95–99 頁の課題 6-A と課題 6-B のレポートとして以下のものを提出してください。

(a) 自分で書いたプログラムのソース・ファイルと説明

(b) 計算に用いたパラメター

(c) 課題 6-A で、 $N = 10$ の場合の eigen1.f90 の結果と解析的な結果の数値

(d) 課題 6-A で、状態密度 $N(\omega)\omega_0/N$ 対 ω/ω_0 に相当するヒストグラムと $N \rightarrow \infty$ に対する解析的な解のグラフを印刷したもの

(e) 課題 6-B で、状態密度 $N(\omega)\omega_0/N$ 対 ω/ω_0 に相当するヒストグラムのグラフを印刷したもの

(f) 考察と感想

- 余裕のある人は課題 6-C, 6-D のレポートも提出してください。

- 締切りは 1/26(水) です。pdf 形式で、keio.jp/授業支援/レポートから提出してください。

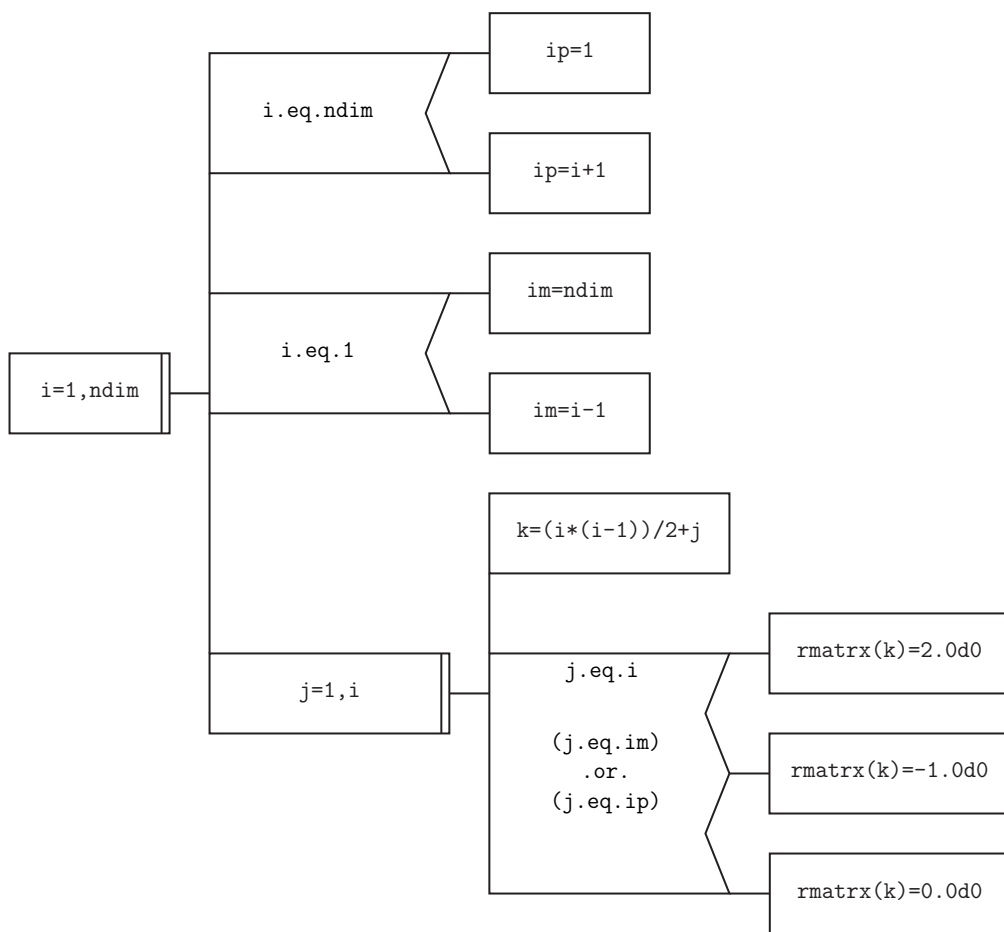


图 J5-1

