1　問題 1（拡散方程式の数値解）

拡散方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x,t) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x,t) \quad (L = 10) \tag{1.1}$$

を初期条件

$$u_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}(x-5)^2} \tag{1.2}$$

の下で数値的に解く。以下の 4 つの場合を考えよ。

(1)

オイラー陽解法

$$u_j^{n+1} - u_j^n \simeq \frac{\Delta t}{\Delta x^2}(u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) \tag{1.3}$$

で境界条件は Dirichlet 境界条件 $u_L = u_R = 0$ を用いて数値的に解け。
刻み幅は $\Delta t = 0.01$, $\Delta x = 0.5 (N = 20)$ とせよ。

(2)

オイラー陽解法 (**??**) で境界条件は Neumann 境界条件 $J_L = J_R = 0$ を用いて数値的に解け。
刻み幅は $\Delta t = 0.01$, $\Delta x = 0.5 (N = 20)$ とせよ。

(3)

クランク・ニコルソン法

$$u_j^{n+1} - u_j \simeq \frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x^2}(u_{j-1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j+1}^{n+1}) + \frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x^2}(u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) \tag{1.4}$$

で境界条件は Dirichlet 境界条件 $u_L = u_R = 0$ を用いて数値的に解け。
刻み幅は $\Delta t = 0.01$, $\Delta x = 0.05 (N = 200)$ とせよ。

(4)

クランク・ニコルソン法 (**??**) で境界条件は Neumann 境界条件 $J_L = J_R = 0$ を用いて数値的に解け。
刻み幅は $\Delta t = 0.01$, $\Delta x = 0.05 (N = 200)$ とせよ。

いずれの場合も $t = 1, 2, 3, 4, 5 (n = 100, 200, 300, 400, 500)$ における $u(x,t)$ の値を出力すること。また、得られた $u(x,t)$ の値をそれぞれ一つの図（横軸 x, 縦軸 u）に図示せよ。

2　問題 2（Fisher 方程式）

拡散方程式に非線形項 $f(u) = u(1-u)$ を加えた偏微分方程式（Fisher 方程式）

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u(1-u) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{2.1}$$

を考える。この方程式は遺伝学における優性遺伝子の空間伝播を表現するために提案された。初期条件

$$u_0(x) = \frac{1}{(1+e^{bx-5})^2} \tag{2.2}$$

境界条件 $(L = 200)$

$$u(0,t) = 1 \tag{2.3}$$

$$u(L,t) = 0 \tag{2.4}$$

の下で $b = 0.25, 0.5, 1.0$ の場合に Fisher 方程式をオイラー陽解法

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = f(u_j^n) + \frac{u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n}{\Delta x^2} \tag{2.5}$$

を用いて数値的に解け。ただし、刻み幅は $\Delta x = 0.05 (N = 4000)$, $\Delta t = 0.001$ とし、$t = 10, 20, 30, 40, (n = 10000, 20000, 30000, 40000)$ の $u(x,t)$ の値を出力すること。また、得られた $u(x,t)$ の値を b の値ごとに一枚の図（横軸 x, 縦軸 u）に図示せよ。

また、得られた結果について考察せよ。（例えば b の値を様々に変えたときに振る舞いはどのように変わるかを見るなど。）

3　問題 3（1 次元調和振動子の Schrödinger 方程式）

量子力学において、1 次元調和振動子のダイナミクスは、次の Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{k}{2}x^2\right)\psi(x,t) \tag{3.1}$$

に従う。$\psi(x,t) = \psi_R(x,t) + i\psi_I(x,t) (\psi_R, \psi_I \in \mathbb{R})$ のように波動関数を実部と虚部に分けると、それぞれの従う方程式は

$$\hbar \frac{\partial \psi_R}{\partial t}(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{k}{2}x^2\right)\psi_I(x,t) \tag{3.2}$$

$$-\hbar \frac{\partial \psi_I}{\partial t}(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{k}{2}x^2\right)\psi_R(x,t) \tag{3.3}$$

となり、2 つの拡散型方程式の組で表される。この際、粒子の位置の確率密度は $P(x,t) \equiv |\psi(x,t)|^2 = \psi_R(x,t)^2 + \psi_I(x,t)^2$ で与えられる。

今、パラメータを $\hbar = 1$, $m = 1$, $k = 1$ とし、初期条件

$$\psi(x,0) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{\frac{1}{4}}} e^{-2(x-5)^2} \tag{3.4}$$

の下で Schrödinger 方程式を数値的に解くことを考える。ただし、空間領域は $[-L/2, l/2]$ とし、境界条件は周期境界条件

$$\psi\left(\frac{L}{2}, t\right) = \psi\left(-\frac{L}{2}, t\right) \tag{3.5}$$

とする。

数値的に解く際には Visscher のスキーム [3] と呼ばれる、実部と虚部の時間発展を半ステップだけずらして解く陽解法を用いる。即ち、離散化された波動関数の実部、虚部をそれぞれ $\{R_j^n\},\{I_j^n\}$ と書くと、$1 \le j \le N(L = N\Delta x)$ に対して時間発展は

$$\begin{aligned} R_j^{n+1} &= R_j^n + \Delta t \left(-\frac{1}{2} \frac{I_{j-1}^n - 2I_j^n + I_{j+1}^n}{\Delta x^2} + \frac{1}{2} x_j^2 I_j^n \right) & (3.6) \\ I_j^{n+1} &= I_j^n - \Delta t \left(-\frac{1}{2} \frac{R_{j-1}^{n+1} - 2R_j^{n+1} + R_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{1}{2} x_j^2 R_j^{n+1} \right) & (3.7) \end{aligned}$$

と記述される。ただし、

$$x_j \equiv \left(j - \frac{1}{2} \right) \Delta x - \frac{L}{2} \tag{3.8}$$

であり、境界条件は全ての n で

$$R_0^n = R_N^n \tag{3.9}$$

$$R_{N+1}^n = R_1^n \tag{3.10}$$

$$I_0^n = I_N^n \tag{3.11}$$

$$I_{N+1}^n = I_1^n \tag{3.12}$$

と表される。また、初期条件は $1 \le j \le N$ で

$$\begin{aligned} R_j^0 &= \frac{1}{2} \left[\psi \left((j-1)\Delta x - \frac{L}{2}, 0 \right) + \psi \left(j\Delta x - \frac{L}{2}, 0 \right) \right] & (3.13) \\ I_j^0 &= -\Delta t \left(-\frac{1}{2} \frac{R_{j-1}^0 - 2R_j^0 + R_{j+1}^0}{\Delta x^2} + \frac{1}{2} x_j^2 R_j^0 \right) & (3.14) \end{aligned}$$

と表される。$N = 400,\ \Delta x = 0.05(L = 20),\ \Delta t = 0.001$ の下でこの系を数値的に解き、$t = 1,2,3,4,5,6,7,8(n = 1000,2000,3000,4000,5000,6000,7000,8000)$ における確率密度 $\left(R_j^n\right)^2 + I_j^n I_j^{n-1}(1 \le j \le N)$ の値を出力せよ。また、得られた確率密度 $\left(R_j^n\right)^2 + I_j^n I_j^{n-1}$ の値を一つの図（横軸は x_j）に図示せよ。