

D.C. Kim

Computational Physics for Undergraduates

with Python

January 10, 2023

Chung-Ang University

Contents

1	Python 기초	1
1.1	Linear Vector Spaces: Basics	1
2	이분 탐색	3
2.1	이분 탐색	3
2.2	삼분 탐색	4
	Glossary	5
	Solutions	7

Acronyms

Use the template *acronym.tex* together with the document class SVMono (monograph-type books) or SVMult (edited books) to style your list(s) of abbreviations or symbols.

Lists of abbreviations, symbols and the like are easily formatted with the help of the Springer-enhanced `description` environment.

ABC	Spelled-out abbreviation and definition
BABI	Spelled-out abbreviation and definition
CABR	Spelled-out abbreviation and definition

Chapter 1

Python 기초

이 책의 목적은 공리로부터 시작하여 양자 역학에 도입하는 것이다. 이 챕터의 목적은 필수적인 수학적 토대를 세우는 데 있다. 앞으로 필요할 모든 수학은 아마도 여러분이 알고 있다고 생각되는 벡터와 행렬에 대한 기본적인 아이디어로부터 출발하여 전개될 것이다. 수학에 있어 조금의 편안함을 제공하고 여기서 전개된 아이디어의 광범위한 적용 가능성을 보여주기 위해 고전 역학과 관련된 많은 예제와 연습 문제가 제공된다. 여러분이 이 챕터에 쏟은 노력은 충분히 가치가 있을 것이다: 여러분이 이 과정을 들어가는 준비에 도움이 될 뿐만 아니라 단편적으로 배웠을 많은 아이디어들을 통합할 것이다. 다른 챕터와 마찬가지로, 이 챕터를 제대로 공부하기 위해선 많은 문제를 풀어야 한다.

1.1 Linear Vector Spaces: Basics

이 절에서는 선형 벡터 공간(*linear vector spaces*)에 대해 도입할 것이다. 여러분은 기초 물리학에서 속도, 힘, 위치, 돌림힘 등의 크기와 방향을 담고 있는 화살표에 친숙할 것이다. 여러분은 어떻게 그것들을 더하고, 그것들에 스칼라를 곱하는지와 이러한 연산에 따른 규칙도 알고 있다. 예를 들어, 여러분은 스칼라곱이 분배 가능하다는 것을 안다: 두 벡터의 합과의 곱은 곱들의 합과 같다. 우리가 원하는 것은 이러한 단순한 경우를 기본적인 특징이나 공리의 집합으로 추상화하고, 같은 형식을 따르는 것들의 어떤 집합이 선형 벡터 공간이라고 말하는 것이다. 일반화하는 과정에서 어떤 성질을 유지할 지 결정할 때 영리함이 필요하다. 너무 많이 유지하면, 다른 예시가 없을 것이다; 너무 적게 유지하면 공리로부터 유도할 흥미로운 결과가 없을 것이다.

다음 목록은 수학자들이 벡터 공간의 필수 조건으로 현명하게 선택한 특징들이다. 여러분이 이것을 읽을 때, 이들을 화살표의 세계와 비교하고 이들이 정말 친숙한 벡터들이 갖는 특징과 같음을 확인하길 바란다. 하지만 모든 벡터에는 크기와 방향이 있어야 한다는 조건이 눈에 띄게 사라져 있다. 이는 우리가 처음 들었을 때 머리에 박힌 첫 번째이자 가장 두드러진 특징이었다. 따라서 여러분은 이 조건을 버리는 것이 아기가 목욕물과 함께 버려진 것과 같다고 생각할 수 있다. 하지만 벡터 공간이라는 제목

아래에서 다양한 아이디어가 통일되고 종합되는 것을 보면서 이러한 선택 뒤에 숨겨진 지혜를 이해할 충분한 시간을 갖게될 것이다.

Definition 1.1 다음 조건이 존재하는 선형 벡터 공간 \mathbb{V} 는 벡터라고 부르는 객체 $|1\rangle, |2\rangle, \dots, |V\rangle, \dots, |W\rangle, \dots$ 들의 집합이다.

1. $|V\rangle + |W\rangle$ 와 같이 쓰는 벡터 합을 형성하는 명확한 규칙,
2. 다음 특징을 가지며 $a|V\rangle$ 와 같이 쓰는 스칼라 a, b, \dots 의 곱에 대한 명확한 규칙.
 - 이러한 연산의 결과는 공간의 또 다른 원소이다. 즉, 닫혀있다: $|V\rangle + |W\rangle \in \mathbb{V}$.
 - 스칼라 곱은 분배 가능하다: $(a + b)|V\rangle = a|V\rangle + b|V\rangle$.
 -

Chapter 2

이분 탐색

2.1 이분 탐색

방정식

$$e^x + \ln x = 0 \quad (2.1)$$

을 풀어보자. $f(x) = e^x + \ln x$ 라 하면, $f(0) \rightarrow -\infty$ 이고, $f(2) > 0$ 이므로 중간값 정리에 의해 0과 2 사이에 $f(x) = 0$ 이 되는 어떤 $x = x_0$ 가 존재함은 분명하다. 하지만 x_0 를 우리가 아는 수로 표현하기는 어렵다. 이것은 아마 무리수이겠지만, 루트나 e , π 등으로는 표현할 수 없다.

x_0 의 실제값을 알기 위해 $f(x)$ 에 몇 가지 값들을 대입할 수 있다. 예를 들어, $f(1) = e > 0$ 이므로 $x_0 < 1$ 임을 알 수 있다. 한편 $f(0.1) < 0$ 이므로 $0.1 < x_0$ 임을 알 수 있다. 이를 적당히 반복하면 우리가 원하는 만큼의 정확도로 x_0 를 찾을 수 있을 것으로 기대할 수 있다.

이를 효율적으로 수행하는 알고리즘이 이분 탐색이다. 이분 탐색은 다음과 같은 과정으로 이루어진다.

1. 필요한 $f(x)$ 를 정의한다.
2. 구하고자 하는 x_0 의 범위 $a < x_0 < b$ 를 정한다. 이 구간 내에서 $f(x)$ 는 단조 함수여야 한다.
3. 다음 과정을 충분히 반복한다.
 - a. $c = \frac{a+b}{2}$ 에 대해 $f(c)$ 의 값을 구한다.
 - b. ($f(x)$ 가 증가 함수일 때,) $f(c) < 0$ 이면 해는 $c < x_0 < b$ 에 존재하고, $f(c) > 0$ 이면 해는 $a < x_0 < c$ 에 존재한다.
 - c. 따라서 각 경우에 따라 a 또는 b 를 c 로 변경한다.
 - d. a 또는 b 가 찾고자 하는 x_0 이다.

3번 과정에서 한 번 반복을 할 때마다 구간의 길이 $b-a$ 는 절반으로 줄어든다. 따라서 이 과정을 100번 반복하면 구간의 길이는 기존에 비해 $2^{100} \approx 10^{30}$ 배로 줄어든다. 이를 이용하여 실제로 $e^x + \ln x = 0$ 의 해를 찾으면, $x_0 \approx 0.2698741375734493$ 이다. 만약 더 많은 유효숫자에 대해 계산하고 싶다면, decimal 라이브러리를 사용해 정밀도를 높여 계산하는 것을 추천한다.

```
import math
def f(x):
    return math.exp(x) + math.log(x)
a, b = 0, 2
for i in range(100):
    c = (a + b) / 2
    if f(c) > 0:
        b = c
    else:
        a = c
```

2.2 삼분 탐색

이분 탐색에서는 단조 함수 $f(x)$ 에 대하여 $f(x) = 0$ 의 해를 찾을 수 있었다. 이분 탐색의 논리와 비슷한 방식으로, 이번에는 어떤 함수의 극값을 찾아볼 것이다.

Glossary

Use the template *glossary.tex* together with the Springer document class SVMono (monograph-type books) or SVMult (edited books) to style your glossary in the Springer layout.

glossary term Write here the description of the glossary term. Write here the description of the glossary term. Write here the description of the glossary term.

glossary term Write here the description of the glossary term. Write here the description of the glossary term. Write here the description of the glossary term.

glossary term Write here the description of the glossary term. Write here the description of the glossary term. Write here the description of the glossary term.

glossary term Write here the description of the glossary term. Write here the description of the glossary term. Write here the description of the glossary term.

glossary term Write here the description of the glossary term. Write here the description of the glossary term. Write here the description of the glossary term.

Solutions

Problems of Chapter ??

?? The solution is revealed here.

?? Problem Heading

(a) The solution of first part is revealed here.

(b) The solution of second part is revealed here.