計算物理学B

第13回

偏微分方程式 Part II

藤本 悠輝、野垣 康介
（藤本担当回）

質問等あればメールでも受け付けます：
yuki.fujimoto.phys__at__niigata-u.ac.jp
(__at__ を @ に変えてください)

講義予定

10/07 両名:四則演算
10/14 野垣:制御文(for, if)
10/21 野垣:関数
10/28 藤本:配列(numpy)
11/04 藤本:可視化(matplotlib)
11/11 野垣:数値微分
11/18 藤本:数値積分
〜中間レポート〜

12/09 野垣:モンテカルロ1
12/16 野垣:モンテカルロ2
12/23 藤本:常微分方程式1
01/13 藤本:常微分方程式2
01/20 藤本:偏微分方程式1
01/27 藤本:偏微分方程式2
02/03 野垣:最適化
〜期末レポート〜

あくまで予定なので変更の可能性あり

授業で用いるURL

Google Colab：

https://colab.research.google.com/?hl=ja

GitHub上の講義サイト:

https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B

今週の教材：

https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B/blob/main/week13

第13回 偏微分方程式その2

- 波動方程式(前回の実習の答え)
- 量子力学:ガウス波束のポテンシャルによる散乱問題

この講義は以下を参考に準備されています:
https://github.com/vlvovch/PHYS6350-ComputationalPhysics
「実践計算物理学」野本拓也 、是常隆、有田亮太郎 著(共立出版)
http://staff.ustc.edu.cn/~zqj/posts/Numerical_TDSE/

波動方程式

- (古典論の)波動方程式: $\dfrac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = v^2\dfrac{\partial^2\phi}{\partial x^2}.$

- 初期条件: $$\begin{aligned}\phi(t=0,x) &= \phi_0(x), &&\leftarrow \text{変位}\\ \phi_t'(t=0,x) &= \phi_0'(x). &&\leftarrow \text{速度}\end{aligned}$$

- 境界条件の指定の仕方は2通りある。
  - ディリクレ(Dirichlet)条件: $$\begin{aligned}\phi(t,x=0) &= \phi_{\text{left}}(t),\\ \phi(t,x=L) &= \phi_{\text{right}}(t),\end{aligned}$$
    ↑右辺0は定在波の節に対応
  - ノイマン(Neumann)条件: $$\begin{aligned}\phi_x'(t,x=0) &= \phi_{\text{left}}'(t),\\ \phi_x'(t,x=L) &= \phi_{\text{right}}'(t),\end{aligned}$$

  ↑微分で指定。右辺0は定在波の腹に対応

波動方程式

- （古典論の）波動方程式：$\dfrac{\partial^2\phi}{\partial t^2} = v^2\dfrac{\partial^2\phi}{\partial x^2}.$

- 初期条件：$\phi(t=0,x)=\phi_0(x),$ ← 変位
  $\phi_t'(t=0,x)=\phi_0'(x).$ ← 速度

- 境界条件の指定の仕方は2通りある。以降こっちを考える
  - ディリクレ(Dirichlet)条件：$\phi(t,x=0)=\phi_{\mathrm{left}}(t),$
    $\phi(t,x=L)=\phi_{\mathrm{right}}(t),$
    ↑右辺0は定在波の節に対応
  - ノイマン(Neumann)条件：$\phi_x'(t,x=0)=\phi_{\mathrm{left}}'(t),$
    $\phi_x'(t,x=L)=\phi_{\mathrm{right}}'(t),$
    ↑微分で指定。右辺0は定在波の腹に対応

波動方程式

- 波動方程式: $$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}.$$
- 1階微分で書き直す: $$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \psi(t, x),$$ $$\frac{\partial \psi}{\partial t} = v^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}.$$
- 初期条件: $$\phi(t=0, x) = \sin(2\pi x / L)\,,$$ $$\psi(t=0, x) = 0\,.$$
- 境界条件: $$\phi(t, x=0) = 0\,,$$ $$\phi(t, x=L) = 0\,.$$

波動方程式

- 波動方程式: $$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \psi(t,x),$$ $$\frac{\partial \psi}{\partial t} = v^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}.$$
- 有限差分で書き直す: $\dfrac{\partial^2 \phi(t,x)}{\partial x^2} \approx \dfrac{\phi(t,x+a) - 2\phi(t,x) + \phi(t,x-a)}{a^2}.$
- Crank-Nicolson法:

$$\psi(t=nh, x=ka) = \psi_k^n$$
$$\phi(t=nh, x=ka) = \phi_k^n$$

$$\phi_k^{n+1} = \phi_k^n + \frac{h}{2}\left[\psi_k^{n+1} + \psi_k^n\right],$$
$$\psi_k^{n+1} = \psi_k^n + \frac{r}{2}\left(\phi_{k+1}^{n+1} - 2\phi_k^{n+1} + \phi_{k-1}^{n+1}\right) + \frac{r}{2}\left(\phi_{k+1}^n - 2\phi_k^n + \phi_{k-1}^n\right),$$

$k = 1, \ldots, N-1$

前方差分と後方差分の平均

波動方程式

- （続き）第1式を第2式に代入すると、こうなる：

$$-rh\psi_{k+1}^{n+1} + 2(1+rh)\psi_k^{n+1} - rh\psi_{k-1}^{n+1} = 2\psi_k^n + 2r\left(\phi_{k+1}^n - 2\phi_k^n + \phi_{k-1}^n\right) + rh\left(\psi_{k+1}^n - 2\psi_k^n + \psi_{k-1}^n\right),$$

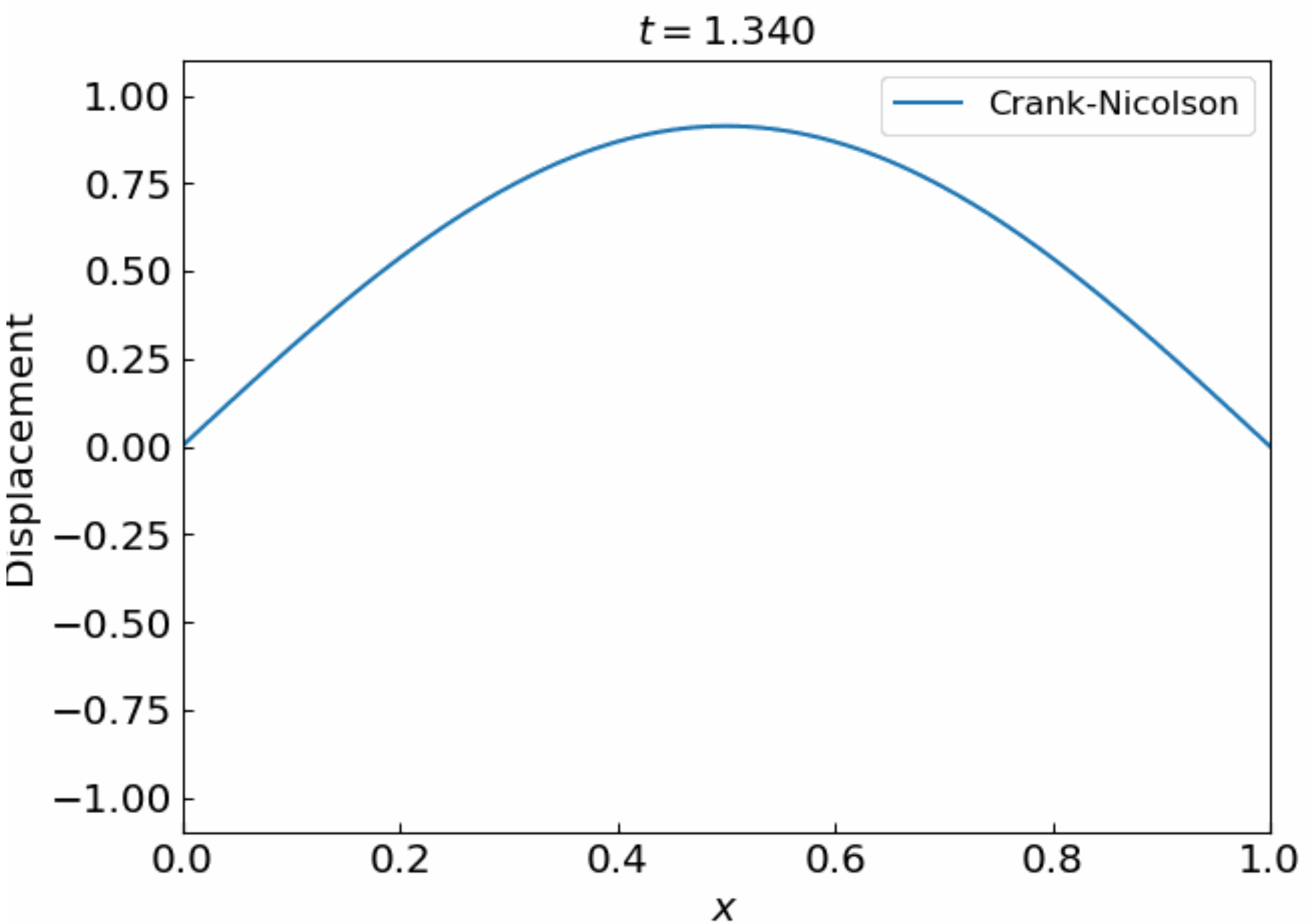
- 行列で書き直すと：

$$N-1\left\{\overbrace{\begin{pmatrix} -r & 2(1+r) & -r & & & & 0 \\ & -r & 2(1+r) & -r & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & -r & 2(1+r) & -r & \\ 0 & & & & -r & 2(1+r) & -r \end{pmatrix}}^{N+1}\right. \overset{\text{長さ}N+1}{\begin{pmatrix} \psi_0^{n+1} \\ \psi_1^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_{N-1}^{n+1} \\ \psi_N^{n+1} \end{pmatrix}} = \overset{\text{長さ}N-1}{\begin{pmatrix} v_1^n \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ v_{N-1}^n \end{pmatrix}}$$

$$v_k^n = 2\psi_k^n + 2r\left(\phi_{k+1}^n - 2\phi_k^n + \phi_{k-1}^n\right) + rh\left(\psi_{k+1}^n - 2\psi_k^n + \psi_{k-1}^n\right)$$

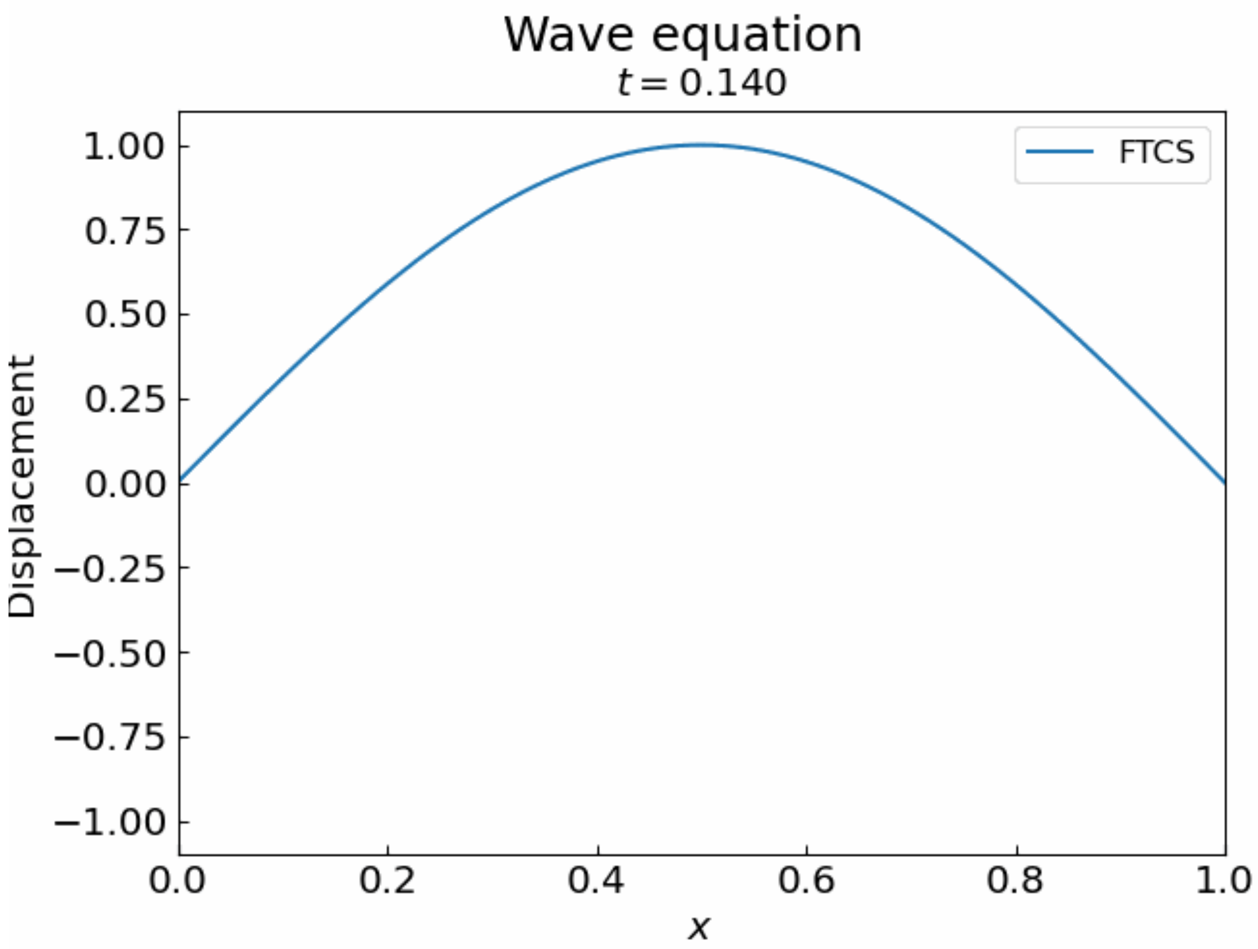
波動方程式の解

Crank-Nicolson法



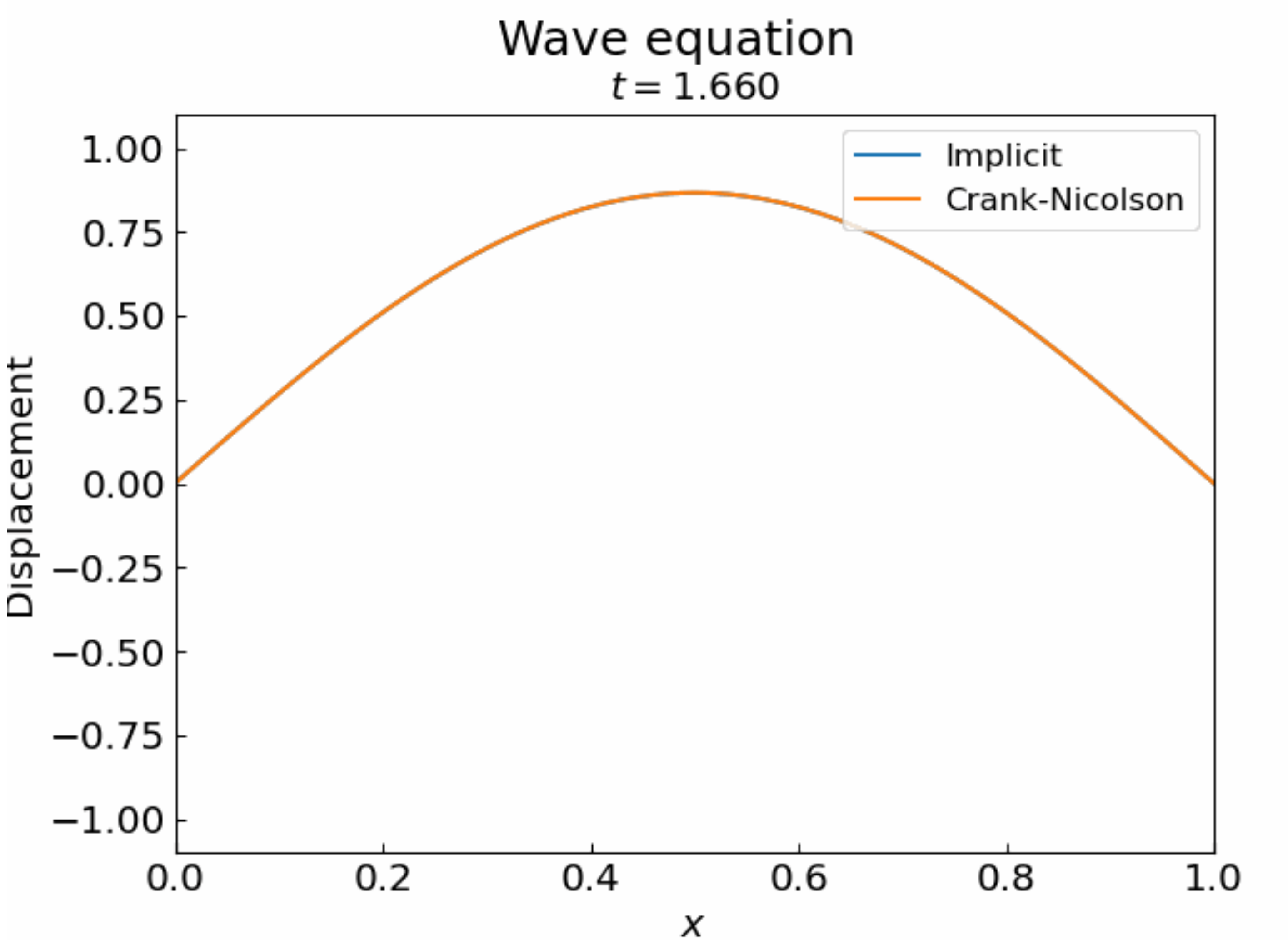
波動方程式の解

FTCS法



波動方程式の解

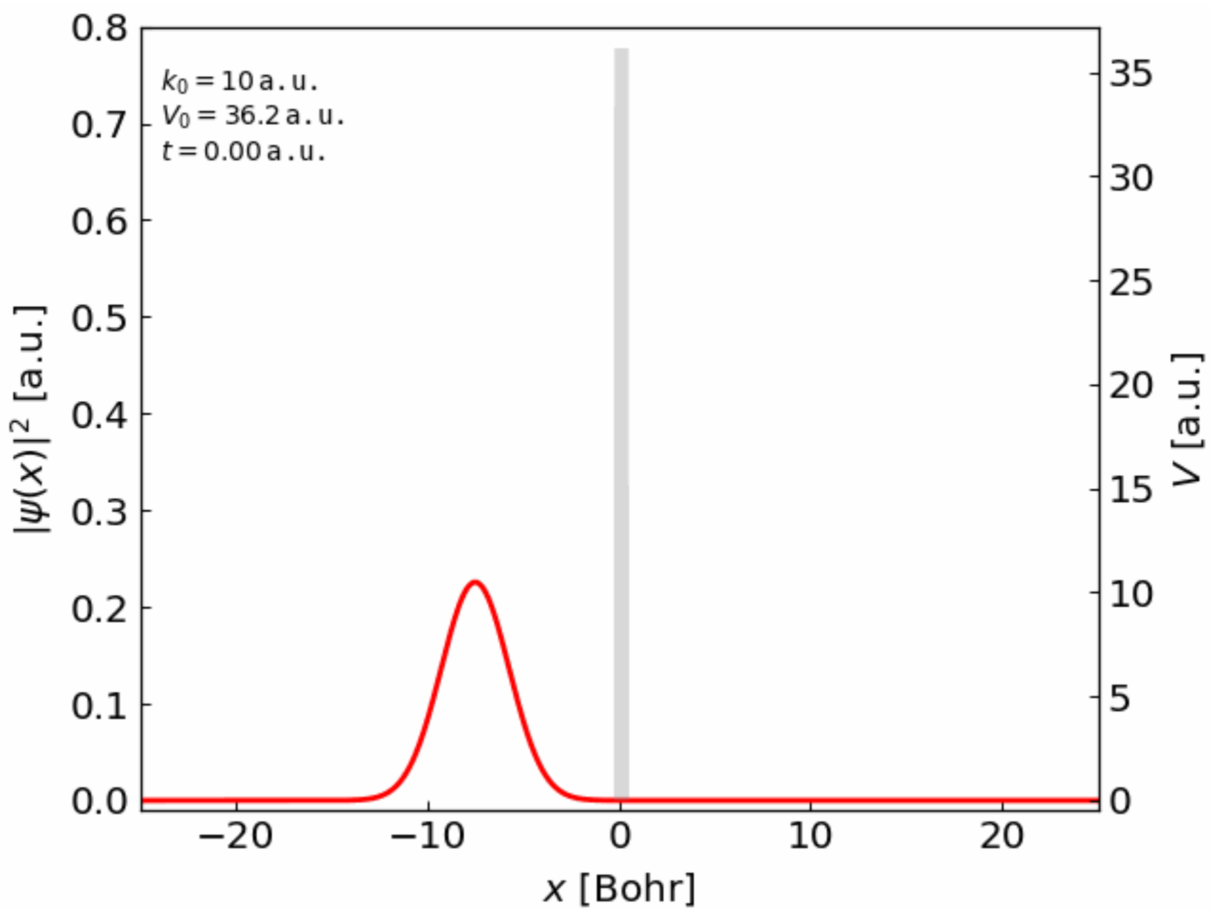
Crank-Nicolson法と陰解法の比較



波動方程式

- 異なる解法ごとの特性
  - FTCS法: tの刻み幅の値にかかわらず不安定
  - 陰解法: 安定だが、時間が大きくなるにつれ
    波動が指数関数的に減衰
  - Crank-Nicolson法:安定。
    かつ、増幅(不安定)・減衰もしない

シュレーディンガー方程式



以降ノートブックで説明

実習タイム

シュレーディンガー方程式のポテンシャルの高さや幅や形状を変更して解いてみよ。
そのほか、これまでの講義で疑問点があれば、それを質問するのでも良い