

計算物理学 IV レポート課題 1

時長隆乃介 202210807

課題 1

(1) ソースコード `src1.py` に基づいてプロットすると Figure 1 のようになる。

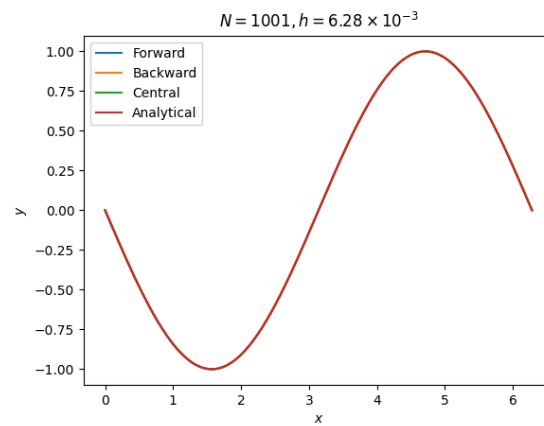


Figure 1: $\cos x$ の様々な有限差分法での微分比較

これらの誤差のみを比較すると、Figure 2 のようになる。

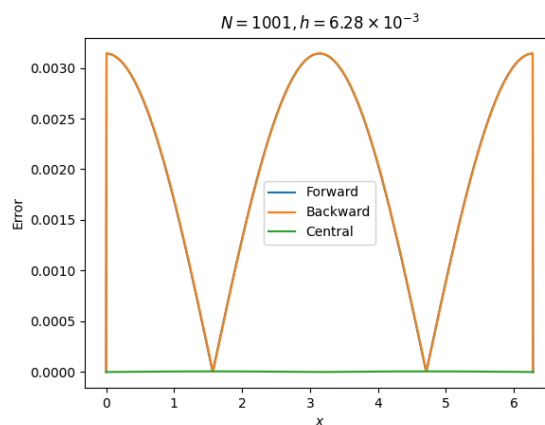


Figure 2: 誤差の比較

(2) 次に、ソースコード `src2.py` に基づいて厳密解と数値解の差をグリッド幅 h の関数としてプロットすると Figure 3 のようになる。

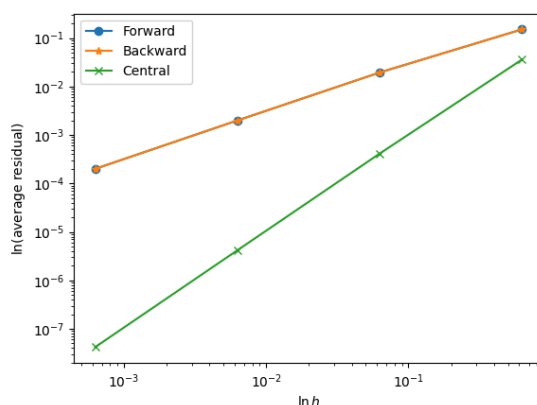


Figure 3: 厳密解と数値解の差

このプログラムを用いて、平均残差が 10^{-6} 以下になるときの Δx を見積もると Table 1 のようになる。

手法	Δx	$\log_{10}(\Delta x)$
前方差分	2.422×10^{-6}	-5.616
後方差分	2.422×10^{-6}	-5.616
中央差分	3.075×10^{-3}	-2.512

Table 1: 平均残差が 10^{-6} となる Δx の見積もり

課題 2

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} = \frac{\partial f'(x)}{\partial x}$$

$f'(x)$ に対する中央差分を用いて

$$\frac{\partial f'(x)}{\partial x} = \frac{f'(x+h) - f'(x-h)}{2h}$$

$f'(x+h)$ に対して前方差分、 $f'(x-h)$ に対して後方差分を用いると

$$\frac{f'(x+h) - f'(x-h)}{2h} = \frac{\{f(x+2h) - f(x)\}/2h - \{f(x) - f(x-2h)\}/2h}{2h}$$

$2h$ を h として置きなおすと

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

課題 3

(1) メッシュ分割数 $N = 1001$ 、有限区間 $[0, 2\pi]$ で考える。この場合、メッシュ幅 $h = 2\pi/(N - 1)$ である。ポテンシャル関数 $V(x) = 0$ として与式を書き下すと、一次元の時間に依存しないシュレディンガー方程式は

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E \psi(x)$$

厳密解

一般解は

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$$

で与えられる。与式に代入して

$$\frac{1}{2} k^2 = E \quad \therefore k = \pm \sqrt{2E}$$

境界条件 $\psi(0) = \psi(2\pi) = 0$ より

$$\psi(0) = A = 0$$

$$\psi(2\pi) = A \cos(2\pi k) + B \sin(2\pi k) = 0$$

したがって、非自明な解として

$$\sin(2\pi k) = 0, \quad 2\pi k = n\pi$$

$$k = \frac{n}{2}, \quad \therefore E = \frac{n^2}{8} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

対応する波動関数は

$$\psi_n(x) = B \sin\left(\frac{nx}{2}\right)$$

規格化条件より

$$B = \frac{1}{\sqrt{\pi}}, \quad \therefore \psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin\left(\frac{nx}{2}\right)$$

数値解

有限差分法を用いると、与式は

$$-\frac{1}{2} \frac{\psi(x+h) - 2\psi(x) + \psi(x-h)}{h^2} = E \psi(x)$$

ハミルトニアン行列 H は

$$H_{i,j} = -\frac{1}{2} \frac{\delta_{i,j+1} - 2\delta_{i,j} - \frac{1}{2}\delta_{i,j-1}}{h^2}$$

として

$$H \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \vdots \\ \psi(x_N) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \vdots \\ \psi(x_N) \end{pmatrix}$$

よって、行列 H の固有値 E と固有ベクトル ψ を求めることで数値解を得ることができる。

src3.py によって求めて、厳密解と共にプロットしたものが Figure 4 である。

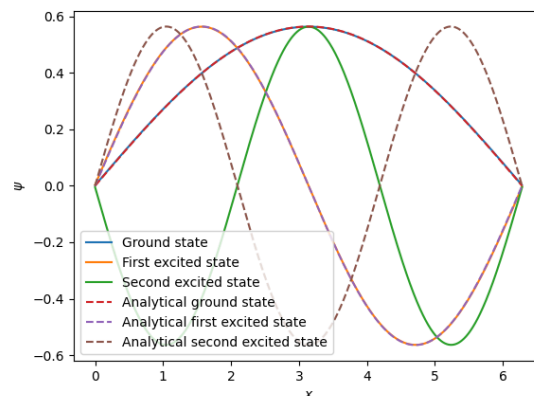


Figure 4: 厳密解と数値解の比較

なぜか第二励起状態では符号が反転している。たぶん eigenvectors の取り方が悪いのだと思う。

固有値は次の出力を得た。

```
numerical: [0.12450139 0.49800435 1.1205052 ]
analytical: [0.125, 0.5, 1.125]
```

(2)