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。

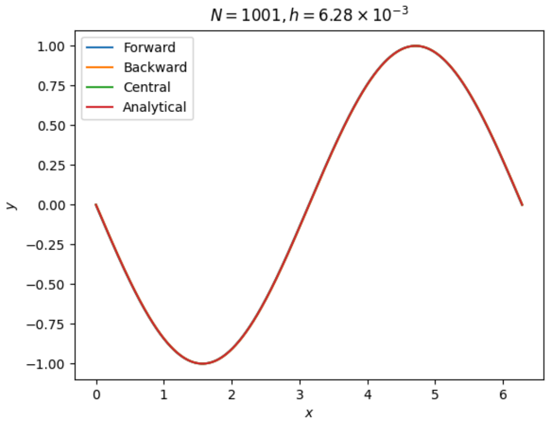

Figure 1: $\cos x$ の様々な有限差分法での微分比較

これらの誤差のみを比較すると、Figure 2 のようになる。

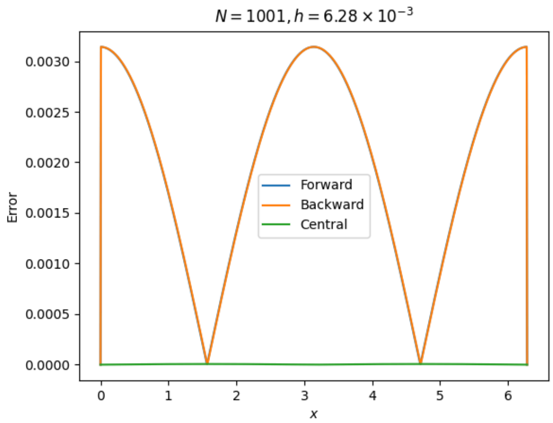

Figure 2: 誤差の比較

(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。

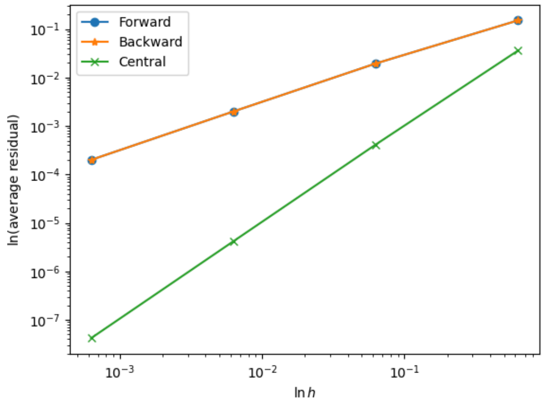

Figure 3: 厳密解と数値解の差

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 $[-\pi, \pi]$ 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

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

境界条件 $\psi(-\pi) = \psi(\pi) = 0$ より

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

したがって、非自明な解が存在するためには

$$AB(\sin(\pi k)\cos(-\pi k) - \cos(\pi k)\sin(-\pi k)) = AB\sin(2\pi k) = 0$$
$$\sin(2\pi k) = 0,\ 2\pi k = n\pi$$
$$k = \frac{n}{2},\ \ \therefore E = \frac{n^2}{8}\ (n = 1, 2, 3, ...)$$

対応する波動関数は

$$\psi_n(x) = A_n\cos\left(\frac{nx}{2}\right) + B_n\sin\left(\frac{nx}{2}\right)$$

規格化条件より

$$\int_{-\pi}^{\pi}\psi_n^2(x)dx = 1$$

したがって

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}}\cos\left(\frac{nx}{2}\right)(n \text{ is odd}) \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sin\left(\frac{nx}{2}\right)(n \text{ is even}) \end{cases}$$

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。

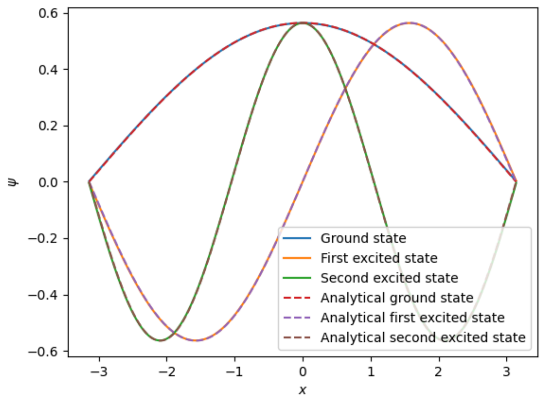

Figure 4: 厳密解と数値解の比較

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) 直交性

$$\int_0^{2\pi} \psi_m(x)\psi_n(x)dx = \delta_{m,n}$$

を確かめる。

計算結果を Table 2 に示す。

m, n	integral
$1, 1$	`1.0000000000000013`
$1, 2$	`-1.4022782690712481e-15`
$1, 3$	`6.160732358642283e-16`
$2, 2$	`1.0`
$2, 3$	`1.1333952581951525e-16`
$3, 3$	`0.9999999999999998`

Table 2: 直交性の確認