2004年度 応用数学 第4回レポート課題

2/15(火)までに3号館381号室に提出してください。

問題1

$A = (a_{ij})$ を $n \times n$ の実対称行列とし, $\lambda_i (i = 1, \dots, n)$ をその固有値, $\mathbf{v}_i$ を対応する固有ベクトルとする。このとき, 次のことを示せ。

- (1) λ_i はすべて実数である。
- (2) $\lambda_i \neq \lambda_j$ のとき, $\mathbf{v}_i$ と $\mathbf{v}_j$ とは直交する。
- (3) $\text{Tr}(A) \equiv \sum_{i=1}^n a_{ii}$ とするとき, $\text{Tr}(A) = \sum_{i=1}^n \lambda_i$ (ヒント: A を対角化し, 公式 $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$ を使うこと。)

問題2

時間に依存しない(無次元化された)Schrödinger 方程式

$$\left\{ -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

を考える。いま, ポテンシャル $V(x)$ として $0 \leq x \leq 1$ で 0 , それ以外の場所で $+\infty$ となる井戸型ポテンシャルを考えると, 上式は次の偏微分方程式の固有値問題

$$-\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad (0 \leq x \leq 1), \quad \psi(0) = 0, \quad \psi(1) = 0 \quad (2)$$

となる。これについて次の問に答えよ。

- (1) 離散的な点 $x_i = \frac{i}{N} (i = 0, 1, \dots, N, N \text{ はある自然数})$ での関数値 ψ_i を考える。式(2)を中心差分を用いて近似し, $\psi_i (i = 1, 2, \dots, N-1)$ の満たす式を求めよ(ヒント: 熱伝導方程式の右辺に対する差分近似を参考にせよ)。
- (2) $\psi = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{N-1})$ とすると, 小問(1)の方程式は行列形式で $H\psi = E\psi$ と書ける。この行列 H を求めよ。
- (3) 行列の固有値問題 $H\psi = E\psi$ を解析的に解き, 最小固有値 E_0 を求めよ(ヒント: 陽的差分法の行列の固有値が解析的に与えられることを利用せよ)。
- (4) 固有値問題(2)を解析的に解き, 最小固有値を求めよ。また, $N \rightarrow \infty$ としたとき, E_0 がこの固有値に収束することを示せ。

問題3

巡回ヤコビ法のプログラムを書け。言語は何でもよいが, そのまま計算機にかけられる完全なプログラムにせよ。