計算物理学２　第２回演習

ver. 2018/4/19

以下の例題を Fortran もしくは C 言語を用いてプログラム化せよ。

四則演算

(1) 標準入力から実数 a と b を読み込み、その和、差、積、商を標準出力に出力。

・b にゼロを代入するとどうなりますか。

DO ループ

(2) $\sum_{k=1}^{N} k^2$ および $\sum_{k=1}^{N} k^3$ の N=1 から 30 までの値。

(3) N! (階乗)の値(N が 1 から 30 まで)

・N がいくつまで正確に計算できますか。

(4) 整数 N=1,...30 に対して単精度と倍精度で√N の値を出力(sqrt(x)関数を使う)。

配列

(5) 行列 A(1:3,1:3)と B(1:3,1:3)の積の計算(Fortran の場合は MATMUL を使う場合と使わない場合二通り)。

ただし A の行列要素 a_{ij} は $a_{ij} = e^{-|i-j|}$ b_{ij} は $b_{ij} = e^{|i-j|}$ とする。

(6) n が 5 までのルジャンドル多項式の直交性を以下の方法で評価しなさい。
まず区間[-1,1]を N-1 等分し、それぞれの座標を要素数 N の配列 x(1:N)にセットする。端点を x(1)=-1, x(N)=1 として残りの点 x(2), x(3), ..., x(N)も求めて値を配列にセット。
配列 P(1:N,0:5) を用意し、同じ [-1,1] 区間でルジャンドル多項式 $P_0(x)$, $P_1(x)$, $P_2(x)$,$P_3(x)$,$P_4(x)$,$P_5(x)$の値をセット。(例えば x=x(i)でのルジャンドル多項式 $P_2(x(i))$の値を配列 P(i,2)に代入) ただし n=0,1,2,3,4,5 のルジャンドル多項式は以下で与えられる。

$$
\begin{aligned}
P_0(x) =& 1 \\
P_1(x) =& x \\
P_2(x) =& \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \\
P_3(x) =& \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) \\
P_4(x) =& \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3) \\
P_5(x) =& \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15x)
\end{aligned}
$$

ルジャンドル多項式の配列を用いて、区分求積法で次の積分を計算する。

$$
I_{nm} = \int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)dx \sim \sum_{i=1}^{N-1} P_n(x(i))P_m(x(i))\Delta x
$$

Δx は N から計算できる。I_{nm} を 6x6 の行列として出力。

・N の値を 100, 1000,10000 と変えるとどうなるか。

・区分求積の和を N-1 までにした時と N までにした時で何が変わるか。

(7) 標準入力から２つの角度 a と b を実数で読み取り(単位：度)、cos(a+b)と sin(a+b)を３通りの方法で計算。

1. cos(a+b), sin(a+b)をそのまま出力(ラジアンに変換)。

2. 角度 a 回転させる２次元の行列、角度 b 回転させる行列を配列を使って作り、それらの行列の積を計算して cos(a+b)と sin(a+b)に対応する成分を出力。ただし角度θ回転させる回転行列は$\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$で与えられる。

3. 複素数 e^{ia} と e^{ib} の積を計算し、その実部と虚部から出力。