

計算物理学 II 第 7 回演習問題

関数副プログラム (関数)

以下の例題を Fortran または C 言語を用いてプログラム化しましょう。

第 7 回分のサンプルプログラム、データは Fortran, C 言語それぞれ

```
$ wget https://wwwnucl.ph.tsukuba.ac.jp/~hinohara/compphys2-23/src/fortran7.tgz
```

```
$ wget https://wwwnucl.ph.tsukuba.ac.jp/~hinohara/compphys2-23/src/c7.tgz
```

とすることでダウンロードできます。解凍は

```
$ tar zxvf fortran7.tgz
```

```
$ tar zxvf c7.tgz
```

関数副プログラム (関数)

- (12) 階乗 $N!$ を実数で計算する関数副プログラム (C 言語では関数) を作り、それを用いて N が 1 から 30 までの階乗を出力してください。

- (13) e^x の $x = 0$ でのテーラー展開は

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}$$

で与えられます。(12) で作った階乗を計算する関数副プログラム (関数) に加えて、 x と n を引数として n 次までのテーラー展開を計算する関数副プログラムを作成し、 x が -10 から 10 まで 0.5 刻みで組み込み関数 $\exp(x)$ の値と $10, 20, 30, 40$ 次までのテーラー展開の値を出力して比較してください。

- (14) A を $n \times n$ の行列とすると、行列指数関数は

$$e^A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!}$$

のようにべき級数によって定義されます。Pauli 行列として以下の 3 つの 2×2 の複素行列を定義します。

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

このとき、

$$e^{i\theta\sigma_k} = I \cos \theta + i\sigma_k \sin \theta \quad (k = x, y, z)$$

となることを以下の方法で数値的にチェックしましょう。

- 行列のべき乗 A^k を再帰的に計算する関数副プログラムを作成。
- これを使って左辺の行列指数関数をテーラー展開で計算する関数副プログラムを作成。

- 30 次までのテーラー展開で左辺を計算し、 θ が -180° から 180° まで 30° ごとに $k = x, y, z$ それぞれについて左辺と右辺の値を数値的にチェック。