計算物理学２　第３回演習

ver. 2018/4/24

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。

IF 文

（８）実数 a を標準入力から読み込み、その絶対値を出力(IF 文を使って書く)

（９）３つの実数 a, b, c を標準入力から読み込み、最大値と最小値を出力(IF 文を使って書く)

（１０）実数 a を標準入力から読み込み、その平方根を出力。これを DO 文で繰り返す。読み込んだ a が負の数であればプログラムを終了する。

（１１）$ax^2+bx+c=0$ の係数 a, b, c(倍精度実数とする)を標準入力から読み取り、解 x を出力。a=0 の場合、a=b=0 の場合、b^2-4ac の正負などを正しく場合分けする。解が複素数になる場合は複素数解を表示。

関数副プログラム

（１２）階乗 N!を実数で計算する関数副プログラムを作り、それを用いて N が 1 から 30 までの階乗を出力

（１２'）階乗 N!を実数で再帰的に計算する関数副プログラムを作り、それを用いて N が 1 から 30 までの階乗を出力

（１３）e^x の x=0 でのテーラー展開は

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

で与えられる。（１２）で作った階乗を計算する関数副プログラムに加えて、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。

（１４）行列指数関数はべき級数によって定義される

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

ここで A は n x n の行列である。
Pauli 行列として以下の３つの 2x2 の複素行列を定義する。

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

このとき、

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

となることが知られている。ただし I は 2x2 の単位行列である。以下の方法でこの左辺と右辺が数値的に一致することを示す。

・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

・これを用いて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が数値的に一致することを示す。