計算物理学 II 第 3 回レポート課題

提出期限：2024 年 12 月 19 日

以下の課題 1，2，3，4 に取り組み，その結果を LaTeX でレポートにまとめよ．なお，以下の点に留意せよ．

- レポートにはタイトルを付け，氏名，学籍番号，所属，レポート作成日を記載すること．
- レポート作成時に，この.pdf ファイルのソースファイル（`lecture6/report2/main.tex`）を活用しても構わない．
- 読みやすく，体裁の整ったレポート作成を心がけて欲しい．
- 作成したレポートの.pdf ファイルと**課題 1，課題 2，課題 4 で使用したソースコード（.py ファイル）**を manaba に提出すること．

1

以下の関数を考える．ただし，$x \in \mathbb{R}$ とする．

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{x^2+1}-x}. \tag{1.1}$$

この関数の値 $f(x)$ を計算するプログラムを以下の二通りの方法で書け．

1. 式 (1.1) の右辺である $1/(\sqrt{x^2+1}-x)$ そのものを戻り値とする関数を書く．
2. $f(x)$ の右辺を，

   $$f(x) = \frac{\sqrt{x^2+1}+x}{(\sqrt{x^2+1}-x)(\sqrt{x^2+1}+x)} = \sqrt{x^2+1}+x, \tag{1.2}$$

   と変形した上で，$\sqrt{x^2+1}+x$ を戻り値とする関数を書く．

この時，$x = 10^n$ $(n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7)$ に対して，上記の二通りの方法で $f(x)$ を計算し，計算結果とその結果に対する簡単な考察を与えよ．[*1]

2

以下の関数を考える．ただし，$x \in \mathbb{R}$ とする．

$$f(x) = \frac{1-\cos x}{x^2}. \tag{2.1}$$

[*1] 余力のある人は，$n = 8$ でのプログラムの挙動も調べてみよ．とあるエラーが起こるはずである．なぜそのようなエラーが発生するのかを考えてみよ．

(A) $f(x)$ のグラフを描け．

(Hint)

- 第 2 回演習で配布した Python スクリプト（`lecture2/src/sample_plot_functions.py`）を参考にすると良い．ただし，x の値は，$x = 0.1 \times i$ $(i = 1, 2, \cdots, 100)$ などとせよ．

(B) $x = 1.2 \times 10^{-8}$ における $f(x)$ の値を数値計算せよ．前問 **(A)** で描いたグラフを踏まえ，あるいは $\lim_{x\to 0} f(x)$ の極限値を考え，数値計算の結果が妥当かどうかを考察せよ．妥当でない結果が得られている場合には，正しい結果を得るためにどのような改善策があり得るかを考え，その改善策が有効かどうかを検証せよ．

3

以下の漸化式で定義される数列 $\{a_n\}_{n=1,2,\cdots}$ を考える．ただし，a_1 は正の整数とする．

$$a_{n+1} = \begin{cases} a_n/2 & \text{if } n \in 2\mathbb{Z}, \\ 3a_n + 1 & \text{if } n \notin 2\mathbb{Z}. \end{cases} \tag{3.1}$$

Collatz 予想によれば，任意の正の整数 a_1 に対して，$a_c = 1$ となるような整数 c が存在するとされている．

(A) $a_1 = 100$ の場合の整数値 c を求めよ．また，横軸を $n(= 1, 2, \cdots, c)$，縦軸を a_n として，数列 $\{a_n\}$ の値を図示せよ．

(B) 前問 **(A)** とは異なる a_1 を自分で設定し，横軸を $n(= 1, 2, \cdots, c)$，縦軸を a_n として，数列 $\{a_n\}$ の値を図示せよ．

4

二つのデータセット $x = (x_1, x_2, \cdots, x_n)$ と $y = (y_1, y_2, \cdots, y_n)$ に対し，以下の式で定義される r を Pearson(ピアソン) 相関係数と呼ぶ．

$$r = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{(n-1)\sigma_x \sigma_y} \tag{4.1}$$

ここで，$\bar{x}$ と $\bar{y}$ は x と y の平均であり，σ_x と σ_y は標準偏差である．r の値から，二つのデータセットの間の相関が分かる．例えば，$r = 1$ の場合，二つのデータは同じ方向に変化（片方が増加すればもう片方も増加）する．このことを正の相関があるという．反対に，$r = -1$ の場合，二つのデータは逆の方向に変化（片方が増加すればもう片方は減少）する．このことを負の相関があるという．また，$r = 0$ の場合，二つのデータの間には相関がないことを意味する．

`lecture8/report3/data` の中に `data1`，`data2`，`data3` という名前の三つの`.csv` ファイルが格納されている．これらの`.csv` ファイルにはあるルールに従って生成された乱数のデータが保存されている．そこで，各々の`.csv` ファイルに対して，一列目をデータセット x，二列目をデータセット y として式 (4.1) の Pearson 相関係数を計算せよ．さらに，データセット x とデータセット y を散布図として可視化し，Pearson 相関係数が正しく計算されていることを確認せよ．レポート

には，Pearson 相関係数と散布図を掲載し，それらがどの`.csv`ファイルから得られたものか明記すること．

(Hint)

- `lecture_material_8.pdf` の p.17 と同様にすれば，`.csv` ファイルからデータを取得するコードが書ける．
- Pearson 相関係数を計算するには平均と標準偏差の計算が必要である．これらの量を定義通り計算するコードを書いても良いが，`statistics` モジュールを `import` すれば，これらの量を即座に得ることができる．例えば，データセット x を `xList` というリストで管理した場合，`statistics.mean(xList)` で $\bar{x}$ を，`statistics.stdev(xList)` で σ_x を得ることができる．
- 散布図の作成には，`matplotlib.pyplot` モジュールを使うと良い．データセット x と y をそれぞれ `xList` と `yList` というリストで管理した場合，ソースコード 1 のようにすれば散布図を作成することができる．
- ソースコード 1 の 4 行目で，`ax.set_xlabel` の引数を`"X"`ではなく `r"$X$"`と書くことで LaTeX の表記を使うことができる．

ソースコード 1　散布図を描くための Python スクリプト例

```
1 fig = plt.figure()
2 ax = fig.add_subplot(1,1,1)
3 ax.scatter(xList, yList)
4 ax.set_xlabel("X")
5 ax.set_ylabel("Y")
6 fig.savefig("scatter.pdf")
```

アンケート

この項目は成績とは無関係です．こちら（クリック）の Google フォームよりアンケートにご協力ください．