計算物理学 II 第 1 回レポート課題

提出期限：2025 年 11 月 7 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（`lecture4/report1/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 ファイルを manaba に提出すること．

1

好きな方程式を一つ書け．また，その式がどういう方程式なのか簡潔な説明を書け．例えば，式の中の記号の意味，項の意味，どのような分野で使われているか，それを解くと何が分かるか，などを書いてもらえれば良い．

2

第 2 回演習で配布した Python スクリプト（`lecture2/src/sample_plot_functions.py`）を使って，

$$f(x) = \exp\left[(x\sin(\alpha x))^2\right] \tag{2.1}$$

のグラフを描け．ただし，グラフの作成にあたっては，以下の点を満たすようにすること．

- `sample_plot_functions.py` で定義されている「関数」`make_plot` では二つの関数を同時にプロットできる．そこで, 式 (2.1) の関数について, (i) $\alpha = 1$ の場合, および (ii) $1 < \alpha \leq 10$ の場合の二つをプロットせよ．(ii) の場合については，$1 < \alpha \leq 10$ の範囲内で具体的な α の値を一つ各自で決めること．なお，選んだ α の値は必ずレポート中に明記せよ．
- 式 (2.1) の関数を `sample_plot_functions.py` でプロットするためには，`cys` と `dys` の中身を編集する必要がある．例えば，(i) の場合，式 (2.1) の関数をスクリプト上で実装するには，「`np.exp(0.5*(x*np.sin(x))**2)`」と書けば良い．
- `make_plot` の `plt.title` を編集し，グラフのタイトルに式 (2.1) を書け．スクリプト上で LaTeX 表記を使う場合,「`r'$ここに数式を書く$'`」の記法に留意せよ（配布したスクリプト中の `plt.xlabel` や `plt.ylabel` の行で既にこの記法が使われている）．
- `make_plot` の `plt.plot` の `label` を編集し，「$\alpha = 1$」のように α の値をグラフ上に明記せよ．
  - （任意）配布したスクリプトでは,「`'r-'`」（赤い実線），「`'b--'`」（青い破線）を用いて

いるが，各自で matplotlib で使える線の種類や色を調べ，見やすいように自由に変更して良い．

- make_plot の plt.title，plt.xlabel, plt.ylabel において，fontsize はすべて「12」にせよ．
- make_plot でコメントアウトされている plt.xlim を有効にし，plt.xlim(0,10) と変更せよ．これにより，作成されるプロットの x 軸の範囲が「0」から「10」までに固定される．
- make_plot の plt.figure から plt.savefig までの間で，「plt.yscale('log')」の一文を加え，y 軸を対数スケールに変更せよ．なお，Python スクリプトではインデント（空白）も意味を持つため，「plt.yscale('log')」の一行を挿入する際には，行頭が他の「plt」から始まる文と揃うようにせよ．

なお，(ii) で選んだ α の値によっては，グラフが滑らかに描かれない場合がある．その場合，下記の修正を試みよ．

- sample_plot_functions.py では，cys と dys の中で関数の値が計算されているが，これらの関数の値は cxs，dxs で指定された x 軸の値でのみ計算される．配布したスクリプトでは，0.0，0.1，$0.2, \cdots, 9.9$ のように，0.1 刻みで分割された 100 個の x 軸の値が設定されている．もし，プロットしたい関数が激しく振動する場合には，x 軸の刻み幅を十分に小さく取ることで，その x 依存性を高解像度で可視化できるはずである．例えば，0.01 刻みで分割された 1000 個の x 軸の値に修正してみると良い．

また，LaTeX でレポートにまとめる際には，以下の点を満たすようにすること．

- y 軸を対数スケールに変更したことでどのような恩恵があったかを記述せよ（例えば，対数スケールを使わない場合と比較してみよ）．
- x 軸の刻み幅を変更した場合，それによってどのような恩恵があったかを記述せよ．
- 「LaTeX 入門」の 6 節を参照し，図には「課題 2 の関数のプロット」というキャプションをつけること．
- 「LaTeX 入門」の 7 節を参照し，\label と \ref を使って，「図 ∗（図の番号）は ○○○ を表している．」といった文を本文中に書くこと．

3

第 2 回演習で，日本の総人口の推移を表す図を gnuplot で作成した．その時に使った人口推移のデータファイルには，各都道府県の人口推移のデータも含まれている．このデータファイル（lecture2/data/population.dat）を使い，好きな都道府県を一つ選んで，その都道府県の人口推移を表す図を作成せよ．図の作成にあたっては，以下の点を満たすようにすること．

- 図の横軸を西暦とし，縦軸を人口とすること．
- 人口は，総数，男性，女性の三つを同じ図にプロットし，それぞれに異なるシンボルと色を用いること．
- 何の図か一目で分かるように，軸のラベルと凡例 (key) を付けること．

また，LaTeX でレポートにまとめる際には，以下の点を満たすようにすること．

- 「LaTeX 入門」の 6 節を参照し，図の挿入時にキャプションをつけること．
- 「LaTeX 入門」の 7 節を参照し，\label と \ref を使って，「図 ∗（図の番号）は ○○○ の人

口の推移を表している.」といった文を本文中に書くこと.

- 「LaTeX 入門」の 9 節を参照し，使用したデータファイルの出典を参考文献として記載すること．\cite を使って，「図 ∗（図の番号）は国勢調査 [∗（参考文献の番号）] のデータに基づく.」といった文を本文中に書けば良い．また，参考文献情報については，このレポートと共に配布された.bib ファイルを使って良い（lecture4/report1/bib/ref.bib）.

4

次のような d 次元の運動量空間上の関数を考えよう.

$$f(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{|\boldsymbol{k}|^2 + a^2} \tag{4.1}$$

ここで，$\boldsymbol{k} = (k_1, k_2, \cdots, k_d)$ は d 次元のベクトルであり，$|\boldsymbol{k}|^2 = \sum_{i=1}^{d} k_i^2$ である．a は正の実数とする．以下の手順に沿って，式 (4.1) の Fourier 変換,

$$g(\boldsymbol{r}) = \left(\prod_{i=1}^{d} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k_i \right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} f(\boldsymbol{k}) \tag{4.2}$$

を計算しよう．なお，$\boldsymbol{r} = (r_1, r_2, \cdots, r_d)$ は d 次元の位置ベクトルで，$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} = \sum_{i=1}^{d} k_i r_i$ である.

(A) 以下の等式を示せ.

$$\frac{1}{q} = \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-tq} \tag{4.3}$$

(B) 式 (4.3) を使うと，式 (4.2) は,

$$g(\boldsymbol{r}) = \left(\prod_{i=1}^{d} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k_i \right) \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-t\left(|\boldsymbol{k}|^2 + a^2\right) + \mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{4.4}$$

と書き換えることができる．ここで，積分の順序を交換し，各 k_i に関する積分を先に実行しよう．式 (4.4) の各 k_i 積分が

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k_i\ \mathrm{e}^{-tk_i^2 + \mathrm{i}k_i r_i} = \sqrt{\frac{\pi}{t}} \exp\left[-\frac{r_i^2}{4t} \right] \tag{4.5}$$

となることを示せ．ただし，以下の Gauss 積分は既知として良い.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\ \mathrm{e}^{-\alpha k^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \tag{4.6}$$

(C) 式 (4.5) を使うと，式 (4.4) は,

$$g(\boldsymbol{r}) = \pi^{d/2} \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}t\ t^{-d/2} \exp\left[-a^2 t - \frac{|\boldsymbol{r}|^2}{4t} \right] \tag{4.7}$$

となる．この積分は第 2 種変形 Bessel 関数 $K_\nu(z)$ を使って表すことができる．その積分表示は,

$$K_\nu(z) = \frac{1}{2} \left(\frac{z}{2} \right)^{\nu} \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}t\ t^{-\nu-1} \exp\left[-t - \frac{z^2}{4t} \right] \tag{4.8}$$

である．このとき，式 (4.7) が，

$$g(\boldsymbol{r}) = 2\pi^{d/2} a^{d-2} \left(\frac{2}{a|\boldsymbol{r}|} \right)^{d/2-1} K_{d/2-1}(a|\boldsymbol{r}|) \tag{4.9}$$

となることを示せ．

(D) $|\boldsymbol{r}|$ が十分大きい場合，$K_{d/2-1}(a|\boldsymbol{r}|)$ は，

$$K_{d/2-1}(a|\boldsymbol{r}|) \sim \frac{\mathrm{e}^{-a|\boldsymbol{r}|}}{\sqrt{a|\boldsymbol{r}|}} \tag{4.10}$$

の漸近形で書ける．$|\boldsymbol{r}|$ が十分大きい場合，$g(\boldsymbol{r})$ の $|\boldsymbol{r}|$ 依存性が以下で与えられることを示せ．

$$g(\boldsymbol{r}) \sim \frac{1}{|\boldsymbol{r}|^{(d-1)/2}} \mathrm{e}^{-a|\boldsymbol{r}|} \tag{4.11}$$

式 (4.11) は **Ornstein-Zernike（オルンシュタイン-ゼルニケ）の公式**と呼ばれ，二粒子の相関を表す関数（相関関数）の長距離における典型的な振る舞いを記述する．

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．