2025年度計算物理学B 期末レポート問題

2026年1月30日出題

諸連絡:

1. 以下の四つの課題を全て解答してください。
2. レポートは学務情報システムから提出してください。
3. 理論部門の問題は PDF ファイルで提出してください。手書きの人は、紙に書いたのを携帯/デジカメで読めるように撮るかスキャナを使うかして画像で送るかしてください。画像ファイルは一頁一ファイルでなく、ひとつのファイルにまとめてください。やりかたが分からない人は、Google で "jpg を pdf に変換" で調べてみてください。
4. 手書きの人は、書き殴るのでなくて、答案を読む教員と TA の方を哀れんで、なるべく綺麗な字で書いてください。
5. コーディング部門の問題は、毎回の実習と同様.ipynb 形式でアップロードしてください。ローカルの環境を使用しても構いませんが、課題提出の際は、仮想環境の requirements.txt を一緒に提出してください。
6. **締切は2026/2/11(水)、日本時間23時59分まで**とします。締切後の提出は原則認めません。やむを得ない事情がある場合は、公平性の観点から大幅に減点とした上で受け取ります。
7. 問題文の意味をなさないところ、おかしいと思うところがあったら、適宜正しいと思うように修正して解答してください。野垣か藤本にメールで連絡してくれたら、この問題も修正します。
8. 生成 AI の使用を許可します。ただし、出力をそのまま貼り付けるのではなく、自分で内容を咀嚼、取捨選択すること。また、生成 AI を用いてレポート・コードを書いた場合は、その旨を記載すること。採点の際、生成 AI の使用による不利益はありません。

理論部門

課題 1：常微分方程式の数値解

次の初期値問題の数値解を考える：

$$\frac{dy}{dt} = \lambda y\,, \qquad y(0) = y_0\,. \tag{1.1}$$

ただし、λ は定数である。この微分方程式の厳密解は $y(t) = y_0 e^{\lambda t}$ である。以下の問いに答えよ。

(1) 前進オイラー法

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_n \tag{1.2}$$

を1ステップだけ適用した結果を、厳密解のテイラー展開と比較し、局所誤差が $O(h^2)$ であることを示せ。ただし、h は時間変数 t を $t_n = nh$ と離散化するときの分割幅であり、$y_n \approx y(t_n)$ である。また、ある一定の時間区間 $[0, T]$ を刻み幅 h で分割したとき、前進オイラー法の大域誤差が $O(h)$ になる理由を説明せよ。

次に、$\lambda < 0$ の場合 (硬い方程式) を考えよう。

(2) 前進オイラー法を適用すると、厳密解は安定にもかかわらず数値解が発散することがある。なぜ数値解に発散が生じるのか理由を説明し、発散しないために h が満たすべき条件を求めよ。

上述の発散に対応するために、後退オイラー法

$$y_{n+1} = y_n + h\lambda y_{n+1} \tag{1.3}$$

を考える。

(3) y_{n+1} を y_n で表せ。前進オイラー法と比較して、$\lambda < 0$ の場合でも、後退オイラー法は安定である理由を説明せよ。

最後に、中心差分に基づく、リープフロッグ法

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2h\lambda y_n \tag{1.4}$$

を考える。これは y_{2k} と y_{2k+1} $(k = 1, 2, \ldots)$ を交互に、中心差分法により順次計算する方法である (講義ではこの方法の亜種として速度 Verlet 法を紹介した)。

(4) この方法が時間反転対称であることを説明せよ。また、時間反転対称性を持つ数値解法が、長時間積分において有利になる理由を説明せよ。

課題 2： von Neumann の安定性解析

拡散方程式の数値解の安定性について考察しよう。拡散方程式は

$$\frac{\partial \rho(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \rho(x,t)}{\partial x^2} \tag{2.1}$$

で与えられる。

(1) 空間刻みを Δx、時間刻みを Δt として、式 (2.1)をFTCS法の差分方程式に書き換えよ。即ち、左辺を前方差分、右辺を中心差分に置き換えよ。ただし、時空の格子点 (x_i, t_n) に定義された数値解の値を $\rho(x_i, t_n)$ と表すことにする。

授業で習ったように、導出した方程式の時間発展をシミュレーションするためには、Δt の選び方が肝要である。安定な計算のために Δt が満たすべき条件を導出しよう。

(2) 数値解を $\rho(x_i, t_n) = \sum_k \rho_k(t_n) e^{ikx_i}$ のようにFourier展開し、(1)で導出した差分方程式に代入せよ。得られた方程式を次の形に整理し、係数 r_k を求めよ。

$$\rho_k(t_{n+1}) = r_k \rho_k(t_n)$$

時間発展を N ステップ繰り返すと、$\rho_k(t_N) = r_k^N \rho_k(t_0)$ となる。従って、波数 k の解が発散しないためには、

$$|r_k| \leq 1 \tag{2.2}$$

を満たす必要がある。

(3) 上述の条件 (2.2)を参考に Δt が満たすべき条件を導出せよ。この時、Fourier展開した解 $\rho_k(t_n)$ が一つでも発散してしまうと、求めたい解 $\rho(x_i, t_n)$ が不安定になるため、条件 (2.2)は任意の k に対して満たされなければならない点に注意せよ。

コーディング部門

課題 3：複数変数のMCMC

授業では、メトロポリス法を用いることで1変数のGauss関数をヒストグラムとして再現することを解説した。これを踏まえて、2変数のメトロポリス法について考察しよう。確率分布

$$P(x, y) \propto e^{-\frac{x^2+y^2+xy}{2}} \tag{3.1}$$

についてメトロポリス法を適用する。乱数を用いて、

$$(x_0, y_0) \to (x_1, y_1) \to \cdots \to (x_N, y_N) \tag{3.2}$$

のように、x と y の組を逐次的に生成していく。得られた (x, y) の点列のうち、自己相関を避けるために10ステップ毎のサンプルを xy-平面上にプロットせよ。ただし、作図に用いる xy-平面の大きさは $-5 \leq x, y \leq 5$ とせよ。また、N があまりに大きいと平面上が点で埋め尽くされ、確率分布の傾向が読み取れなくなるので、適当な N を設定せよ。

課題 4：移流方程式

次の1次元の移流方程式

$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t} + c\frac{\partial u(t, x)}{\partial x} = 0\,, \qquad c = 1 \tag{4.1}$$

を考える。

本課題では、この方程式を差分法により数値的に解く。時間微分は前方差分で近似し、空間微分は前方差分および後方差分でそれぞれ近似した差分スキームを用いる。計算領域は

$$0 \leq x \leq 1\,, \qquad t \geq 0 \tag{4.2}$$

に制限し、周期境界条件

$$u(t, x = 0) = u(t, x = 1) \tag{4.3}$$

を課す。初期条件として

$$u(t = 0, x) = \sin(2\pi x) \tag{4.4}$$

を与える。

以上の設定の下で、$u(t, x)$ の時間発展を $t = 0.1, 0.2, 0.5$ において計算し、空間微分を前方差分で近似した場合と後方差分で近似した場合について、それぞれプロットせよ。ただし、時間の刻み幅 Δt が、課題2で求めた条件を満たすよう、空間の刻み幅 Δx より小さくなるように留意せよ。

また、余裕がある場合は $c = -1$ としたときにどうなるか、プロットしてその違いを論ぜよ。

自由課題

そのほかにも、講義で気になったことや、発展的な内容について自分で調べた結果を PDF にまとめたり、コードを実装したりしてもよい。