

## 「計算機実験 II」レポート課題 (2024/1/5 更新)

言語の指定がない課題については、Python や Julia などでもプログラムを作成してもよい。ただし、その場合でも収束の様子などの解析はきちんと行うこと

課題は順次追加

### [モンテカルロ]

- 1-1) 板状の物質による中性子の吸収/透過/反射をモンテカルロ法により計算するプログラムを作成せよ。吸収率  $p_c$ 、平均自由行程  $\lambda^{-1}$  を適当な値に仮定した上で、板の厚さ  $D$  を増やしたときに、吸収率・透過率・反射率がどのように変化するか調べよ。エラーバー (統計誤差) についても評価すること
- 1-2) 二次元正方格子上的ランダムウォークのシミュレーションを行うプログラムを作成せよ。各時刻で粒子は上下左右のいずれかの方向にランダムに進むとする。粒子の分布が時刻とともにどのように広がっていくか二次元ヒストグラムをプロットしてみよ。また、初期位置からの距離の平均値を計算・プロットし、時刻とともにどのように増加するか議論せよ。エラーバー (統計誤差) についても評価すること。さらに、粒子が一度訪れた場所には二度と訪れることはできないという制限を課すと、移動距離の時間依存性はどのように変化するか調べよ
- 1-3) マルコフ連鎖モンテカルロ法により、二次元正方格子イジング模型のエネルギーと比熱、磁化の二乗の期待値を計算せよ。モンテカルロステップ数をいくつか変えて実行し、物理量の期待値の振る舞いの変化を確認せよ (モンテカルロステップ数は2倍・4倍・8倍・・・など対数スケールで変化させるとよい)。さらに、システムサイズを  $L = 4, 6, 8, \dots$  と増やすと、これらの物理量の振る舞いがどのように変化するか調べよ。また、有限系のシミュレーション結果から、熱力学的極限における二次相転移の臨界温度と臨界指数を求める方法について調べよ
- 1-4) 二次元正方格子上的古典ハイゼンベルグ模型のマルコフ連鎖モンテカルロ法のプログラムを作成せよ。まず、三次元単位球面上に一樣に分布するランダムベクトルの生成方法について考えよ。次にメトロポリス法のプログラムを作成し、エネルギー・比熱・磁化の二乗の期待値を計算、その温度依存性・サイズ依存性をプロットせよ。エラーバー (統計誤差) についても評価しプロットすること。(可能であれば、二次元正方格子上的イジング模型に対するモンテカルロ計算の結果との比較を行い、定性的な違いについて議論せよ)

### [偏微分方程式の初期値問題・多体系の量子力学]

- 2-1) FTCS 法を用いて一次元拡散方程式を適当な初期条件に対して解け。パラメータ  $r = D\Delta t/\Delta x^2$  を変化させて解の安定性・不安定性を確認せよ。FTCS 法は、 $(N+1) \times (N+1)$  対称三重対角行列  $A$  を用いて  $\mathbf{u}^{n+1} = A\mathbf{u}^n$  の形で表すことができる。数値対角化を用いて行列  $A$  の固有値<sup>\*1</sup>を計算し、 $r$  の値によって固有値の分布がどのように変化するかを調べ、安定性について議論せよ。(可能であれば、陰解法の場合について同様の解析を行え)
- 2-2) 二次元波動方程式を FTCS 法で解くプログラムを作成せよ。固定端条件と自由端条件の二通りの境界条件を設定し、境界での波の反射の様子を観察せよ。また、二次元空間中に波の速度 (あるいは屈折率) の異なる 2 つの領域を作り、境界で波の反射や屈折が起こることを確認せよ

---

<sup>\*1</sup> 対称三重対角行列の対角化には LAPACK の DSTEV が使える

2-3) 一次元一粒子の時間依存シュレディンガー方程式を FTCS 法と克蘭ク・ニコルソン法<sup>\*2</sup>を用いて解く。初期状態として波束の波動関数  $\Psi(x) \sim \exp[-(x-x_0)^2/(4\sigma^2) + ip_0(x-x_0)]$  を考える。ポテンシャルがない場合 ( $V=0$ ) に空間中を波束が伝搬していく様子を確認し、波動関数のノルム、位置・運動量・エネルギーの期待値の時間依存性を観察せよ。次に、中央にある高さのポテンシャル障壁を作り、壁の高さによって、透過率・反射率がどのように変化するかを調べよ

2-4) 一次元横磁場イジング模型

$$H = H_z + H_x = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \Gamma \sum_i \sigma_i^x$$

の量子相転移を考える。 $\sigma_i^z$  を対角化する基底を考え、境界条件は周期境界条件とする。 $N = 3, 4, 5, \dots$  について、適当な初期状態を準備し、 $\exp[-\tau H] \approx \{\exp[-(\tau/M)H_z] \exp[-(\tau/M)H_x]\}^M$  を掛けることで基底状態を求めよう。いくつかの  $(\tau, M)$  の組に関して計算を行い、それぞれの  $N$  について基底状態エネルギーの収束を確認せよ。(典型的には、 $\tau = N$ ,  $\tau/M = 0.1$  程度とすればよい。) また、得られた基底状態について、磁化の二乗の期待値

$$m^2 = \left\langle \left( \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i^z \right)^2 \right\rangle$$

を計算し、 $\Gamma/J < 1$  では有限の値、 $\Gamma/J > 1$  ではゼロに収束することを確認せよ

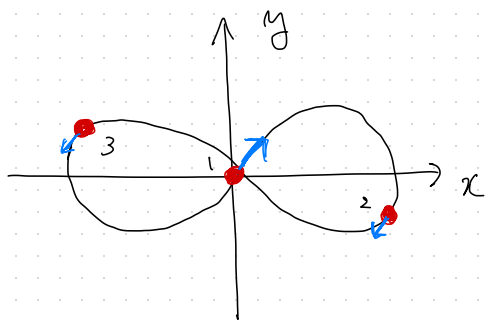
2-5) 3 量子ビット加算器をシミュレーションするプログラムを作成せよ。 $2^3 \times 2^3$  通りの入力に対して、期待通りの結果が得られることを確認せよ。さらに、状態の線形結合を入力とした場合に加算結果の線形結合が出力されることを確認せよ

## [少数多体系・分子動力学]

3-1) 重力相互作用する  $N$  質点系の運動方程式

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = - \sum_{j \neq i} G m_i m_j \frac{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|^3} \quad i = 1, \dots, N$$

は、 $N \geq 3$  の場合には求積可能ではないが、これまで様々な特殊解が得られている。3 体問題 ( $N=3$ ) においては、オイラーの直線解、ラグランジュの三角解に加え、3 体が単一の閉曲線上を運動する「8 の字解」が知られている。3 体は等しい質量  $m_i = 1$  を持ち、 $z=0$  の平面上を運動しているとする。また、重力定数  $G=1$  とする。初期条件として  $(x_1, y_1) = (0, 0)$ ,  $(x_2, y_2) = -(x_3, y_3)$ ,  $(\dot{x}_1, \dot{y}_1) = (0.695804, 1.67860)$ ,  $(\dot{x}_2, \dot{y}_2) = (\dot{x}_3, \dot{y}_3) = -\frac{1}{2}(\dot{x}_1, \dot{y}_1)$  とする(重心と全運動量はゼロ)。初期条件  $(x_2, y_2)$  を変えて、シンプレクティック積分法により軌道を求め、「8 の字解」となる条件を探せ。またその時の周期を見積もってみよ



<sup>\*2</sup> 実三重対角行列の連立一次方程式の求解には DGTTRF と DGTTRS を、複素三重対角行列の場合は ZGTTRF と ZGTTRS を使う

- 3-2) 蔵本模型は同期現象を記述する数学モデルである。蔵本模型では、それぞれ異なる固有振動数  $\omega_i$  を持つ  $N$  個の振動子の間に非線形相互作用が働いている。支配方程式は以下の形で表される

$$\frac{d\theta_i}{dt} = \omega_i + \frac{K}{N} \sum_{j=1}^N \sin(\theta_j - \theta_i) \quad i = 1, 2, \dots, N$$

ここで、 $\theta_i$  は  $i$  番目の振動子の位相、 $K$  は結合定数である。結合定数  $K$  が小さいとき、振動子はそれぞればらばらに振動するが、 $K$  がある臨界値  $K^*$  を超えると同期するようになる。同期の度合いは複素秩序変数

$$r(t)e^{i\Psi(t)} = \frac{1}{N} \sum_j e^{i\theta_j(t)}$$

の絶対値  $r(t)$  により測ることができる。固有振動数  $\omega_i$  は平均 0、分散 1 の正規分布に従いランダムに分布、また  $t = 0$  において  $\theta_i$  は  $[0, 2\pi]$  に一様分布しているとして、常微分方程式を数値的に解き、 $r(t)$  の時間依存性をプロットせよ。 $N = 64, 128, 256, \dots$  について、 $r(t)$  の長時間平均値の結合定数  $K$  の依存性を観察し、臨界点  $K^*$  を見積もってみよ。(高速化のヒント: 複素秩序変数  $(r(t), \Psi(t))$  を用いると、支配方程式の相互作用項は  $Kr \sin(\Psi - \theta_i)$  と変形できる)

- 3-3) 重力相互作用する  $N$  粒子系を考える

$$V = - \sum_{j < k}^N \frac{Gm^2}{(r_{jk}^2 + \delta^2)^{1/2}} \quad (\delta \text{ はエネルギーの発散を防ぐための小さな定数})$$

$t = 0$  で粒子は半径  $R$  の球内に一様にランダムに分布しているとする (棄却法で生成)。また、速度は分散  $\sigma^2$  のマクスウェルボルツマン分布 ( $3N$  次元正規分布) に従ってランダムに分布しているとする (それぞれの成分を Box-Muller 法で生成)。運動エネルギーの初期値がポテンシャルエネルギーの絶対値に比べ十分に小さい時、この粒子系は自己重力で崩壊する。分散  $\sigma^2$  を調整して、ビリアル比  $r_v \equiv K/|V|$  が 0.1, 0.2, 0.3, 0.4 となるような初期速度分布を準備し、シンプレクティック積分法により、ポテンシャルエネルギー、運動エネルギー、ビリアル比、中心にできるコアの半径の時間依存性をプロットせよ。 $G = R = M(\equiv Nm) = 1$  となる単位系を使い、ソフトニングパラメータ  $\delta = 0.01$ 、粒子数  $N$  は  $10^3$  程度で  $t = 10$  程度まで計算してみよ

- 3-4) アルゴン原子間の相互作用はレナード・ジョーンズ型ポテンシャル

$$V = - \sum_{j < k}^N \epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{jk}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{\sigma}{r_{jk}} \right)^6 \right] \quad (\epsilon/k_B = 119.8 \text{ K}, \sigma = 3.822 \text{ \AA})$$

でよく記述される。1 片の長さ  $L$  の箱の中に  $N$  個のアルゴン原子が入っている状況を考える。周期境界条件を考え、ポテンシャルエネルギーは minimum image convention により計算する。シンプレクティック積分法により、温度、圧力、内部エネルギーの平均値を計算するプログラムを作成せよ。 $m = \sigma = \epsilon = 1$  となる単位系を使い、時間きざみ幅は 0.005 程度に取る。粒子の初期位置は面心立方格子とする。まず、 $N = 32$  の系について計算を行い、速度を反転した場合に初期状態に戻ることを確認せよ。次に  $N = 108$ 、数密度  $\rho = N/V = 1.2$  の系について、 $t = 10$  まで 10 ステップごとに温度  $T = 1$  となるように速度スケールング、その後  $t = 30$  までエネルギー一定のシミュレーションを行い、温度、圧力、1 粒子あたりの内部エネルギーの期待値を計算せよ

- 3-5) Nose-Hoover Chain 法を用いた分子動力学法により、調和ポテンシャルあるいは非調和ポテン

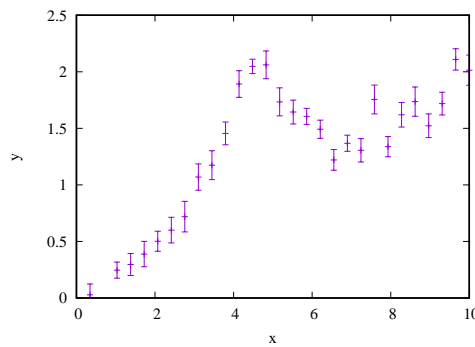
シャル中の 1 粒子のカノニカル分布を調べる

$$\begin{aligned}\frac{dx}{dt} &= \frac{p}{m} \\ \frac{dp}{dt} &= -\frac{\partial V}{\partial x} - \frac{p_s}{Q}p \\ \frac{dp_s}{dt} &= \frac{p^2}{m} - k_B T - \frac{p_r}{Q}p_s \\ \frac{dp_r}{dt} &= \frac{p_s^2}{Q} - k_B T\end{aligned}$$

$m = 1$ ,  $Q = 1$ ,  $k_B T = 1$  として、4 次の Runge-Kutta 法で運動方程式を解き、その位相空間上での軌道を確認せよ (時間刻み  $\Delta = 0.01$  で  $t = 10^4$  程度まで計算せよ)。また、座標  $x$  と運動量  $p$  のヒストグラムを作成し、カノニカル分布となっていることを確認せよ。一方、自由度 1 の Nose-Hoover 熱浴 (上の式で  $p_r$  のないもの) の場合には、熱平衡状態とはならないことを示せ

#### [最適化問題]

- 4-1) 共役勾配法を用いて、Dirichlet 型の境界条件のもとでの二次元 Poisson 方程式 (あるいは Laplace 方程式) の解を求めるプログラムを作成せよ。実行時間のメッシュ数依存性を LU 分解を用いた場合と比較せよ (参考: 計算機実験 I 講義 3)。Poisson 方程式の行列生成の例は、poisson.h にある (参考: 密行列生成 poisson\_dense.c、疎行列行列ベクトル積 poisson\_sparse.c、LU 分解による求解 poisson\_lu.c)
- 4-2) 測定データ measurement3.dat を関数  $y = f(x) = ax + be^{-(x-c)^2}$  で最小二乗フィッティングしよう。パラメータ  $a, b, c$  を、Nelder-Mead 法を用いて残差を最小化することにより推定せよ



- 4-3)  $d$  次元 Rastrigin 関数

$$f(x) = Ad + \sum_{i=1}^d [x_i^2 - A \cos(2\pi x_i)] \quad (A = 10, -5.12 \leq x_i \leq 5.12)$$

は  $x = 0$  に最小点をもつが、それ以外に多数の極小点が存在する。Gnuplot 等の描画ソフトを用いて  $d = 2$  の場合の等高線を描き、極小の位置を確認せよ。次に、シミュレーテッドアニーリングにより、Rastrigin 関数の最小点を探索するプログラムを作成せよ。「温度」 $T$  は、アニーリング時間を  $\tau$  とすると

$$T(t) = T_0(1 - t/\tau)$$

のように線形に減少させるとする。初期温度  $T_0$  は Rastrigin 関数の最大値よりも十分大きくとる。 $d = 3$  の場合について、最小点  $x = 0$  を見出す確率の  $\tau$  依存性を調べよ

- 4-4)  $n \times n$  マス目に  $1 \sim n^2$  の自然数を並べた魔法陣をシミュレーテッドアニーリングにより生成しよう。正しい魔法陣では、行・列・対角線の和はすべて  $M = n(n^2 + 1)/2$  とならなければならない。状態 (= 数字の並べ方)  $C$  に対して、エネルギーを

$$E(C) = \sum_{\text{row}} (S_r - M)^2 + \sum_{\text{col}} (S_c - M)^2 + \sum_{\text{diag}} (S_d - M)^2$$

(ただし、 $S_r, S_c, S_d$  はそれぞれ、 $r$  行目、 $c$  列目、2 方向の対角線の数字の和) と定義すると、「基底状態」 $E(C) = 0$  は正しい魔法陣 (の一つ) を与える。モンテカルロによる状態更新は、 $1 \sim n^2$  の自然数の組  $i, j$  をランダムに生成し、数字  $i$  と  $j$  の位置を入れ替える操作を考えればよい。 $n = 3, 4, 5, 6$  の場合について、正しい魔法陣を見出す確率のアニーリング時間依存性を調べよ。また、最急下降法の結果との比較も行え

- 4-5) 自分が興味を持っている問題を「最適化問題」として定式化し、最適化手法を用いて解を求めよ。物理の問題でなくてもよい。ただし最適化する変数の数 (次元) は 4 以上であること。使った最適化手法の詳細と、なぜその手法を使ったかについて説明せよ