クレジット:
Mathematics and Informatics Center 計算機実験I 2020 藤堂眞治

計算機実験 I (第 3 回)

藤堂眞治

2020/05/13

初期値問題の解法 (Euler 法)

- h を微小量として微分を差分で近似する (前進差分)

$$\frac{dy}{dt} \approx \frac{y(t+h) - y(t)}{h} = f(t, y)$$

- $t = 0$ における $y(t)$ の初期値を y_0、$t_n \equiv nh$、y_n を $y(t_n)$ の近似値とおくと、

$$y_{n+1} - y_n = hf(t_n, y_n)$$

- Euler 法
  - y_0 からはじめて、$y_1, y_2, \cdots$ を順次求めていく

高次の Runge-Kutta 法

- 3 次 Runge-Kutta 法

$$
\begin{aligned}
k_1 &= hf(t_n, y_n) \\
k_2 &= hf(t_n + \tfrac{2}{3}h, y_n + \tfrac{2}{3}k_1) \\
k_3 &= hf(t_n + \tfrac{2}{3}h, y_n + \tfrac{2}{3}k_2) \\
y_{n+1} &= y_n + \tfrac{1}{4}k_1 + \tfrac{3}{8}k_2 + \tfrac{3}{8}k_3
\end{aligned}
$$

- 4 次 Runge-Kutta 法

$$
\begin{aligned}
k_1 &= hf(t_n, y_n) \\
k_2 &= hf(t_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_1) \\
k_3 &= hf(t_n + \tfrac{1}{2}h, y_n + \tfrac{1}{2}k_2) \\
k_4 &= hf(t_n + h, y_n + k_3) \\
y_{n+1} &= y_n + \tfrac{1}{6}k_1 + \tfrac{1}{3}k_2 + \tfrac{1}{3}k_3 + \tfrac{1}{6}k_4
\end{aligned}
$$

- 4 次までは次数と f の計算回数が等しい

陽解法と陰解法

- 陽解法: 右辺が既知の変数のみで書かれる (例: Euler 法)
  - プログラムがシンプル
- 陰解法: 右辺にも未知変数が含まれる
  - 例: 逆 Euler 法

$$y(t) = y(t+h-h) = y(t+h) - hf(t+h, y(t+h)) + O(h^2)$$
$$y_{n+1} = y_n + hf(t+h, y_{n+1})$$

  - 数値的により安定な場合が多い
  - Newton 法などを使って、非線形方程式を解く必要がある

Numerov 法

- Numerov 法
  - 二階の常微分方程式で一階の項がない場合に使える
  - 連立微分方程式に直さずに直接二階微分方程式を解く
  - 4 次の陰解法
  - 方程式が線形の場合は陽解法に書き直せる
- 微分方程式

$$\frac{d^2y}{dx^2} = f(x, y)$$

$y = y(x)$ を $x = x_i$ のまわりでテイラー展開する。$x_{i\pm1} = x_i \pm h$ での表式は

$$y(x_{i\pm1}) = y(x_i) \pm hy'(x_i) + \frac{h^2}{2}y''(x_i) \pm \frac{h^3}{6}y'''(x_i) + \frac{h^4}{24}y''''(x_i) + O(h^5)$$

Numerov 法

- 二階微分の差分近似 ($y_i \equiv y(x_i)$ 等と書く)

$$\frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} = y_i'' + \frac{h^2}{12} y_i'''' + O(h^4)$$

一方で、微分方程式より

$$y_i'''' = \left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x=x_i} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2} + O(h^2)$$

組み合わせると

$$y_{i+1} = 2y_i - y_{i-1} + \frac{h^2}{12}(f_{i+1} + 10f_i + f_{i-1}) + O(h^6)$$

Numerov 法

- 方程式が線形の場合、$f(x,y) = -a(x)y(x)$ を代入すると

$$y_{i+1} = 2y_i - y_{i-1} - \frac{h^2}{12}(a_{i+1}y_{i+1} + 10a_iy_i + a_{i-1}y_{i-1}) + O(h^6)$$

y_{i+1} を左辺に集めると、陽解法となる

$$y_{i+1} = \frac{2(1 - \frac{5h^2}{12}a_i)y_i - (1 + \frac{h^2}{12}a_{i-1})y_{i-1}}{1 + \frac{h^2}{12}a_{i+1}} + O(h^6)$$

時間依存しないシュレディンガー方程式

- 井戸型ポテンシャル中の一粒子問題

$$\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\Big]\psi(x)=E\psi(x)$$

$$V(x)=\begin{cases}0 & a\le x\le b\\ \infty & \text{otherwise}\end{cases}$$

- $\hbar^2/2m=1$、$a=0$、$b=1$ となるように変数変換して

$$\Big(\frac{d^2}{dx^2}+E\Big)\psi(x)=0 \qquad 0\le x\le 1$$

を境界条件 $\psi(0)=\psi(1)=0$ のもとで解けば良い

固有値問題の解法 (シューティング)

- $x_i = h \times i$ ($h = 1/n$)、$x_0 = 0$、$x_n = 1$ とする
- $\psi(x_0) = 0$、$\psi(x_1) = 1$ を仮定 ($\psi'(x_0) = 1/h$ と与えたことに相当)
- $E = 0$ とおく
- Runge-Kutta 法、Numerov 法などを用いて $x = x_n$ まで積分
- $\psi(x_n)$ の符号がかわるまで、E を少しずつ増やす
- 符号が変わったら、E の区間を半分ずつに狭めていき、$\psi(x_n) = 0$ となる E (固有エネルギー) と $\psi(x)$ (波動関数) を得る

ハミルトン力学系

- 時間をあらわに含まない場合のハミルトン方程式

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

  - エネルギー保存則

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial q}\frac{dq}{dt} + \frac{\partial H}{\partial p}\frac{dp}{dt} = 0$$

  - 位相空間の体積が保存 (Liouville の定理)
    位相空間上の流れの場 $\boldsymbol{v} = (\frac{dq}{dt}, \frac{dp}{dt})$ について

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{v} = \frac{\partial}{\partial q}\frac{dq}{dt} + \frac{\partial}{\partial p}\frac{dp}{dt} = 0$$

- Euler 法、Runge-Kutta 法などはいずれの性質も満たさない

シンプレクティック数値積分法

- シンプレクティック数値積分法 (Symplectic Integrator)
- 位相空間の体積保存を満たす解法
- 例: 調和振動子 $H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)$ の運動方程式

$$\frac{dq}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -q$$

の一方を Euler 法で、他方を逆 Euler 法で解く

$$\begin{aligned} q_{n+1} &= q_n + hp_n \\ p_{n+1} &= p_n - hq_{n+1} = (1-h^2)p_n - hq_n \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & h \\ -h & 1-h^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_n \\ p_n \end{pmatrix}$$

体積・エネルギーの保存

- 体積保存

$$\det\begin{pmatrix} 1 & h \\ -h & 1-h^2 \end{pmatrix} = 1$$

- エネルギーの保存

$$\frac{1}{2}(p_{n+1}^2 + q_{n+1}^2) + \frac{h}{2}p_{n+1}q_{n+1} = \frac{1}{2}(p_n^2 + q_n^2) + \frac{h}{2}p_n q_n$$

- 位相空間の体積は厳密に保存
- エネルギーは $O(h)$ の範囲で保存し続ける

2次のシンプレクティック積分法

- ハミルトニアンが $H(p,q) = T(p) + V(q)$ の形で書けるとする
- リープ・フロッグ法

$$
\begin{aligned}
p(t+h/2) &= p(t) - \frac{h}{2}\frac{\partial V(q)}{\partial q}\Big|_{q=q(t)} \\
q(t+h) &= q(t) + hp(t+h/2) \\
p(t+h) &= p(t+h/2) - \frac{h}{2}\frac{\partial V(q)}{\partial q}\Big|_{q=q(t+h)}
\end{aligned}
$$

シンプレクティック積分法

- ハミルトン力学系の満たすべき特性 (位相空間の体積保存) を満たす
- 一般的には陰解法
- ハミルトニアンが $H(p, q) = T(p) + V(q)$ の形で書ける場合は陽的なシンプレクティック積分法が存在する
- エネルギーは近似的に保存する
- n 次のシンプレクティック積分法では、エネルギーは $O(h^n)$ の範囲で振動 (発散しない)
- より高次のシンプレクティック積分法の構成方法については、H. Yoshida, Phys. Lett. A **150**, 262 (1990) 等を参照