計算物理学II (第10回)

今回の内容

- 一階常微分方程式の解法
  - Euler法
  - 2次・4次のRunge-Kutta法
- 二階常微分方程式の解法

Euler法

常微分方程式 $$\frac{dy}{dx} = f(x,y), \quad y(x_0) = y_0$$ f(x,y)の関数形、x_0, y_0は既知

yをTaylor展開。y(x+h)をy(x)から求めることができる。

$$y(x+h) = y(x) + \frac{dy}{dx}h + \mathcal{O}(h^2) = y(x) + f(x,y)h + \mathcal{O}(h^2)$$

x_1=x_0+hでのyの値y_1はy_0, f(x_0,y_0)を使って

$$y_1 = y(x_0 + h) = y_0 + f(x_0, y_0)h + \mathcal{O}(h^2)$$

x_2=x_1+hでのyの値y_2はy_1, f(x_1,y_1)を使って

$$y_2 = y(x_1 + h) = y_1 + f(x_1, y_1)h + \mathcal{O}(h^2)$$

x_0から始めてこれを繰り返すとy(x)を任意のxまで求められる
誤差がx_0から離れるほど積み重なるため実用的ではない→27番の演習問題で確認

2次のRunge-Kutta法

$x=x_n$での$y(x)$を用いて$x=x_{n+1}$での$y(x)$は積分を使って厳密に書ける

$$y_{n+1} = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} \frac{dy}{dx} dx = y_n + \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x)) dx$$

Euler法はこの被積分関数を$x=x_n$での値で近似したものに対応

$$y_{n+1} = y_n + f(x_n, y(x_n))h + \mathcal{O}(h^2)$$

2次のRunge-Kutta法はx_nとx_{n+1}の中点での値を使って$f(x,y(x))$を評価

x_nと$x_{n+1}=x_n+h$の中点→ $x_n+h/2$
y_nとy_{n+1}の中点→正確に求められない。Euler法を使って近似

$$k_1 = hf(x_n, y_n),$$

→y_nとy_{n+1}の中点は $y_n+k_1/2$で近似

$$k_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}\right),$$

$$y_{n+1} = y_n + k_2 + \mathcal{O}(h^3)$$

プログラムに書く時は上から順番に計算(k_2の計算にはk_1が必要、y_{n+1}の計算にはk_2が必要)

4次のRunge-Kutta法

$$
\begin{aligned}
k_1 &= hf(x_n, y_n), \\
k_2 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{\boxed{k_1}}{2}\right), \\
k_3 &= hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{\boxed{k_2}}{2}\right), \\
k_4 &= hf(x_n + h, y_n + \boxed{k_3}), \\
y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}(\boxed{k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4}) + \mathcal{O}(h^5)
\end{aligned}
$$

- プログラム中では上から順番に計算する
- 導出は複雑なので省略(興味のある人はインターネットで調べてください)

二階常微分方程式

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

- 物理ではよく出てくる(yを座標、xを時間とすれば運動方程式もこの形になる)
- f(x,y,dy/dx)の関数形は既知。また初期値x_0, y_0=y(x_0)とdy/dx(x_0)が既知
- Euler法やRunge-Kutta法で解ける
- dy/dx=zとすると連立一階常微分方程式に変換できる

$$\frac{dy}{dx} = z,$$
$$\frac{dz}{dx} = f(x, y, z)$$

$\Rightarrow$ y(x), z(x)の連立一階微分方程式

二階微分方程式

- 4次のRunge-Kutta法による解法

$x=x_n$, $y(x_n)=y_n$, $z(x_n)=z_n$の値が既知のとき、 $x_{n+1}=x_n+h$でのy_{n+1}とz_{n+1}の値を計算

$$k_1 = hz_n, \qquad l_1 = hf(x_n, y_n, z_n),$$

$$k_2 = h\left(z_n + \frac{l_1}{2}\right), \qquad l_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}, z_n + \frac{l_1}{2}\right),$$

$$k_3 = h\left(z_n + \frac{l_2}{2}\right), \qquad l_3 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}, z_n + \frac{l_2}{2}\right),$$

$$k_4 = h(z_n + l_3), \qquad l_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3, z_n + l_3),$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), \qquad z_{n+1} = z_n + \frac{1}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4)$$

- 上から一行ずつ実行(例えばk_2はl_1に、l_2はk_1とl_1に依存している)
- 高階の微分方程式も同様に連立一階微分方程式に変換すればRunge-Kutta法で解くことができる