計算物理学 第二単元レポート

佐々木良輔

3-A.

3-A-1. 調和振動子の厳密解

調和振動子の微分方程式は以下の通りである.

$$\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} = -x$$

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = v$$
(1)

すなわち

$$\frac{\mathrm{d}^2 x}{\mathrm{d}t^2} = -x\tag{2}$$

であり初期条件をx(0) = 0, v(0) = 1とすれば解は以下のようになる.

$$x(t) = \sin t$$

$$v(t) = \cos t$$
(3)

3-A-2. メインプログラムについて

図 1 にメインプログラムの PAD 図を示す。またソースコードは補遺に示す。このプログラムでは 2^{-2} から 2^{-12} までの各時間間隔 τ について,(1) 式の微分方程式を t=0 から $t_{\rm end}=8$ まで Runge-Kutta 法で解く。Runge-Kutta 法関数に関しては次節で説明する。ここで初期値は x=0, v=1 としている。したがって微分方程式の厳密解は (3) 式であり,出力段では時間間隔 τ 及び時刻 t=8 での厳密解と数値解の差を出力している。

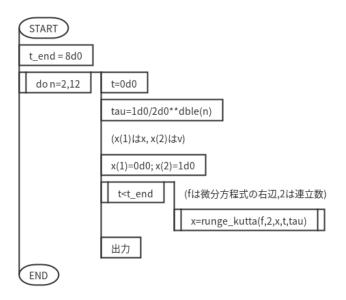


図 1 メインプログラムの PAD 図

3-A-3. Runge-Kutta 関数について

図 2 に Runge-Kutta 法関数の PAD 図を示す。 またソースコードは補遺に示す。 この関数では関数 \arg を 4 段 4 次の Runge-Kutta 法で 1 ステップ (時間間隔 τ) 計算する。 \arg は倍精度 1 次元配列型の関数であり以下のような微分方程式の右辺 $\vec{f}(\vec{q},t)$ に相当する。



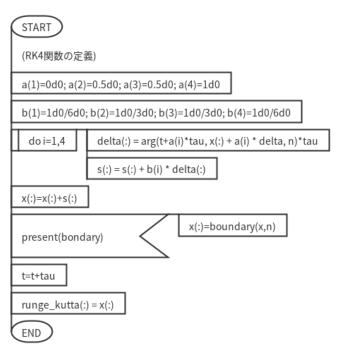


図 2 Runge-Kutta 法の PAD 図

3-A-4. 出力結果

図 3 にプログラムの出力結果を示す.これは両対数グラフであり横軸は時間間隔 τ , 縦軸は厳密解からの誤差である.また直線は誤差の線形な部分を最小二乗 Fit した直線である.

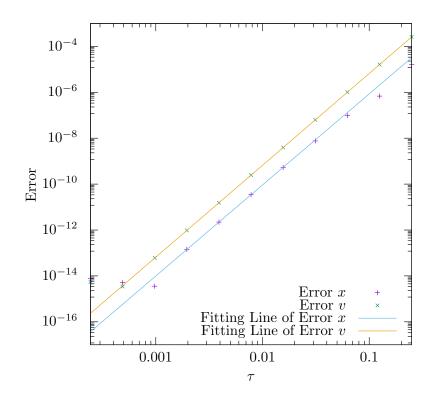


図3 3-A. の出力結果

3-A-5. 考察

図 3 において、各 Fitting 曲線 err_x , err_v は以下のようになった.

$$\operatorname{err}_{x}(\tau) = 0.00792(1 \pm 0.5) \times \tau^{3.96(1 \pm 0.0)}$$
 (5)

$$\operatorname{err}_{v}(\tau) = 0.0662(1 \pm 0.0) \times \tau^{4.00(1 \pm 0.0)}$$
 (6)

以上から Runge-Kutta 法の誤差は τ に対して 4 次で変化していることがわかる。今回実装した Runge-Kutta 法は 4 段 4 次のものだったので,期待した通りの挙動をしていることがわかる。一方で τ が小さい領域では誤差が直線の系列から離れていることがわかる。これは分割数が増えたこと に依る丸め誤差の蓄積が原因であると考えられる。実際,倍精度浮動小数点の精度は 10 進数で 16 桁程度であり,近い桁で誤差が大きくなっていることがわかる。