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.

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}t} &= -x \\ \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} &= v\end{aligned} \tag{1}$$

すなわち

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

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.

$$\begin{aligned}x(t) &= \sin t \\ v(t) &= \cos t\end{aligned} \tag{3}$$

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 $t_{\mathrm{end}} = 8$ 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.

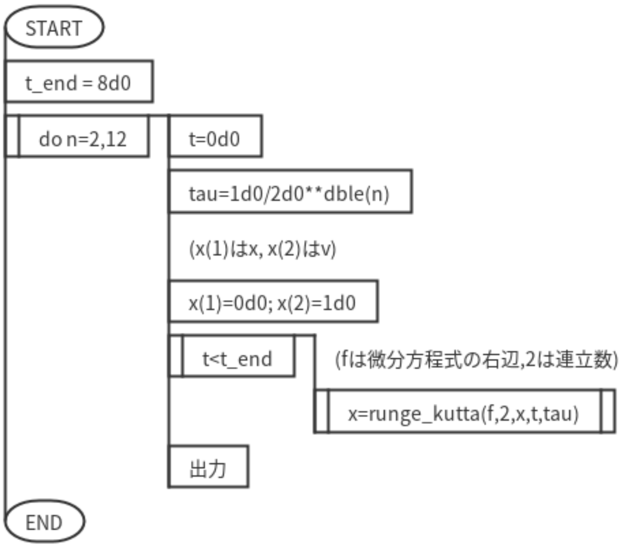

図 1　メインプログラムの PAD 図

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.

$$\frac{\mathrm{d}\vec{q}}{\mathrm{d}t} = \vec{f}(\vec{q}, t) \tag{4}$$

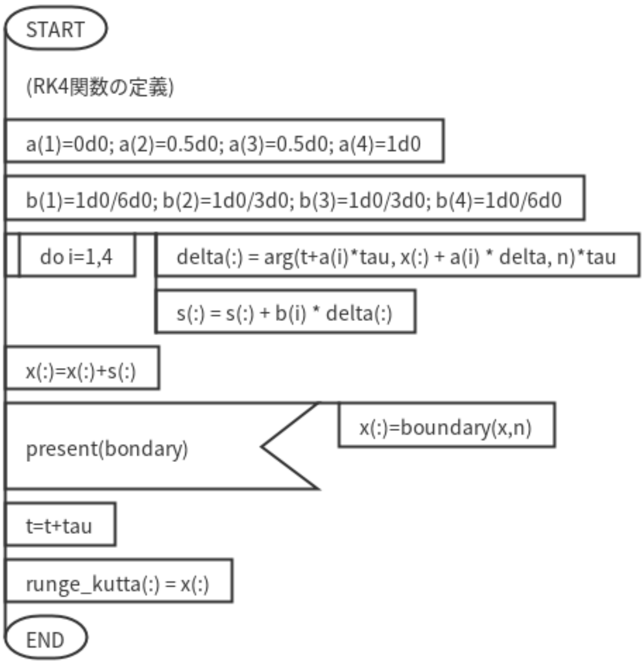

図 2　Runge-Kutta 法の PAD 図

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．

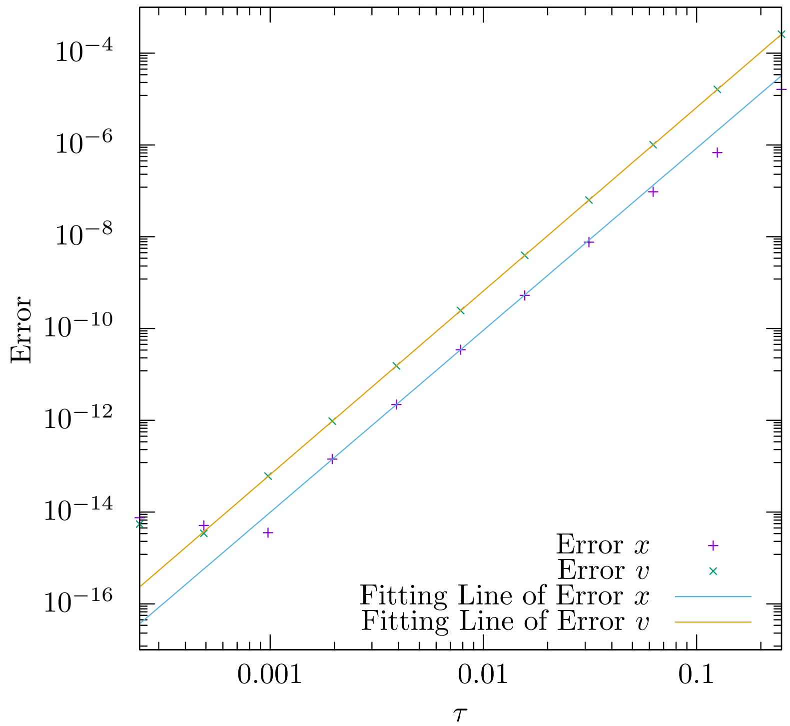

図 3　3-A. の出力結果

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．

$$\mathrm{err}_x(\tau) = 0.00792(1 \pm 0.5) \times \tau^{3.96(1\pm0.0)} \tag{5}$$
$$\mathrm{err}_v(\tau) = 0.0662(1 \pm 0.0) \times \tau^{4.00(1\pm0.0)} \tag{6}$$

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．

3-A-6. 感想

Runge-Kutta 法の実装では最初に誤差が τ の 2 乗程度の挙動を示し, この問題の解決に多大な時間を要した. 原因は Runge-Kutta のループにおいて時間が最後の 1 ステップ分ずれて計算されていたことであった. 私は普段組み込み機器でプログラムをしているため, プログラムの記述自体には慣れていたが, 数値計算特有の難しさを認識する良い機会だった.