数値計算による常微分方程式解法(python版)

ordinary differential equation(ODE)

cc by Shigeto R. Nishitani, 2020-23

- /Users/bob/Desktop/maple_ode/python_ode.ipynb
- origin git@github.com:daddygongon/maple_ode.git (fetch)

Table of Contents

- 1 Euler法による落下運動
 - 1.1 重力場中の運動
 - 1.2 Euler法
 - 1.3 重力場中の運動をEuler法で解いたら
 - 1.4 空気抵抗がある水滴の落下
- 2 高精度計算
 - 2.1 バネの運動
 - 2.2 2次のRunge-Kuttaの導出
 - 2.3 Runge-Kutta2次公式
 - 2.4 Runge-Kutta4次公式
 - 2.5 連立方程式にRunge-Kutta4次公式を
- 3 太陽系
 - 3.1 分子動力学=Verlet(ベルレ)法
 - 3.2 太陽系=重力
- 4 RLC回路の応答
- 5 課題
 - 5.1 雨粒
 - 5.2 大砲
- 6 自由課題
 - 6.1 RLC回路
 - 6.2 RLC回路

Euler法による落下運動

重力場中の運動

重力場中のボールの落下を考えて、1軸で考えた運動方程式を立てます。

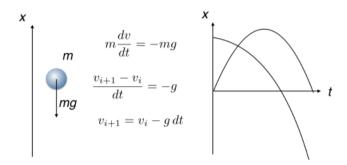
$$v = rac{dx}{dt}$$
 $a = rac{d^2x}{dt^2}$

質量をm, 重力加速度をgとして、働く力がF=-mgであるとすると、ニュートンの運動方程式F=maは、

$$-mg = m \frac{d^2x}{dt^2}$$

となります.

Free gravitation fall



Euler法

1次の微分方程式の一般形は

$$\frac{dx}{dt} = f(x,t)$$

と書けます。この微分方程式を簡単な近似から求めるオイラー法を示します。 $x(t+\delta t)$ をテイラー級数展開すると、

$$x(t+\delta t)\simeq x(t)+rac{dx}{dt}\delta t$$

となります。これらを代入すると、計算アルゴリズムはつぎのようになります。

$$x_{i+1} = x_i + f_i \, \delta t$$

ここで、 f_i は点 (x_i,t_i) における関数の値です。このアルゴリズムを適用して、 $t+\delta t$ の座標 x_{i+1} を一つ前の時間の座標 x_i から導くことができます。これを重力場中の運動方程式に適用します

重力場中の運動をEuler法で解いたら

Euler法は一階の微分方程式に対する定式化をしています。ところが、重力場中の運動は2階の微分方程式です。このようなときには媒介変数を導入して1次連立方程式に置き直します。

媒介変数として速度vを使って、2階の運動方程式

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -g$$

が、1階の連立方程式

$$\frac{dv}{dt} = -g$$
$$\frac{dx}{dt} = v$$

で置き換えられると考えることに相当します。アルゴリズムにすると、

$$v_{i+1} = v_i - g dt$$

 $x_{i+1} = x_i + v_i dt$

なる連立方程式を解くことに置き換わります。これをpythonで関数にして、さらに計算結果を表示させてみます。

Eulerは x_i, v_i を受け取って,先ほど導いた簡単な計算によって, v_{i+1}, x_{i+1} を順次計算して返します.結果は,

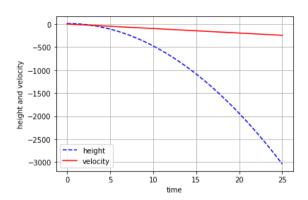
```
In [2]: import matplotlib.pyplot as plt

def my_plot(xx, vv, tt):
    plt.plot(tt, xx, color = 'b', linestyle='--', label="height")
    plt.plot(tt, vv, color = 'r', label="velocity")
    plt.legend()
    plt.xlabel('time')
    plt.ylabel('height and velocity')
    plt.grid()
    plt.show()
```

```
In [3]: #g, dt =9.8, 0.01
g, dt =9.8, 0.1
tt,xx,vv=[0.0],[0.0],[0.0] #for compare rain_drop
#tt,xx,vv=[0.0],[0.0],[0.0]

t = 0.0

for i in range(0,250): #250 for compare rain_drop
t += dt
x, v = euler(xx[-1],vv[-1])
tt.append(t)
xx.append(x)
vv.append(v)
# print(xx)
# print(vv)
my_plot(xx, vv, tt)
```



位置(height:x)と速度(v)の時間(t)変化を表示させています

時間とともに位置は放物線状に変化し、速度は一定の傾きで増加していく、等加速度運動を再現しています。Euler法ではこのように非常に簡単なcodeによって微分方程式で表される現象をシミュレートできることがわかるでしょう

空気抵抗がある水滴の落下

ballの落下ではわかりにくいですが、より小さな質量の水滴では、速度に比例する空気抵抗が効いてきます。この様子を見ましょう、微分方程式には、

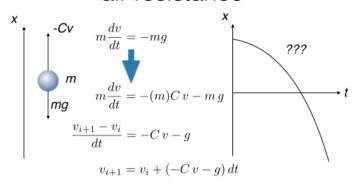
$$F_x = -Cv_x$$

項が付与されます. そうすると運動方程式は

$$m rac{dv_x}{dt} = -Cv_x - mg$$

となります。これにともなった v_x の時間変化に対して、今までは単純に重力加速していたのが、 v_x に比例する空気抵抗を記述する項が付与されます。この変化をEuler2に入れ込むと少しの修正ですが、結果は劇的に変化します。

gravitation fall with air resistance



その前に、ここで示した修正がどれほど普通の微分方程式の解法としてややこしいかを少し示しておきます。

$$m \frac{dv_x}{dt} = -Cv_x - mg$$

を整理すると,

$$rac{dv_x}{dt} = -rac{C}{m}v_x - g$$

です。右辺を v_x の係数でくくって、変形していくと、

$$rac{dv_x}{dt} = -rac{C}{m}igg(v_x - rac{m}{C}gigg) \ rac{1}{igg(v_x - rac{m}{C}gigg)}dv_x = -rac{C}{m}dt$$

これで変数分離されているので積分をとって、 公式 $\int rac{1}{x+a} dx = \log|x+a| + C_1$ を使うと

$$\log \left| v_x - \frac{m}{C}g \right| = -\frac{C}{m}t + C_1$$

なんですが、両辺の指数をとって「適当」に変形すると

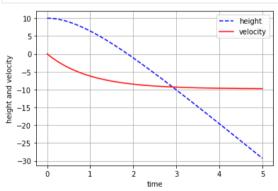
$$\left|v_x - \frac{m}{C}g\right| = \exp(-\frac{C}{m}t + C_1)$$

$$v_x = \frac{gm}{C} + \exp(-\frac{C}{m}t + C_1)$$

となります。最後の絶対値の変形は怪しいんであまり信頼しないでね。

これをpvthonが用意している数式処理libraryのsympyを使うと次の通りとなります.

Out[4]:
$$v(t) = rac{-gm + e^{cc\left(C_1 - rac{t}{m}
ight)}}{cc}$$



ちょっと気をつけたいのは、-Cvの向きです。vは例えば自由落下の時には下向きのベクトルなんで、抵抗は反対向き、すなわち上むき、数値的には正、になります。

高精度計算

バネの運動

今度はバネの運動です. 空気抵抗との違いはほんの少しで,

$$F_r = -kx$$

と今度は、位置xに力が比例することです。そうすると運動方程式は、

$$m\frac{dv_x}{dt} = -kx$$

となります

連立方程式は

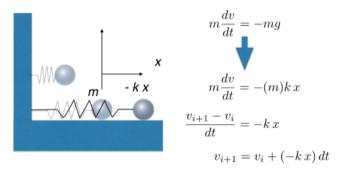
$$\frac{dv}{dt} = -\frac{k}{m}x$$
$$\frac{dx}{dt} = v$$

となるんで、アルゴリズムに置き換えると.

$$egin{aligned} v_{i+1} &= v_i - rac{k}{m} x_i \, dt \ x_{i+1} &= x_i + v_i \, dt \end{aligned}$$

なる連立方程式を解くことに置き換わります。これをpythonで関数にして、さらに計算結果を表示させてみます。

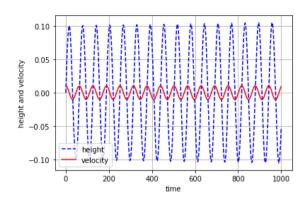
Free oscillation mass-spring system



```
In [7]:     def euler3(x0,v0):
     v1 = v0 + (-k * x0) * dt
     x1 = x0 + v0 * dt
     return [x1, v1]

     t, dt, k=0.0, 0.01, 0.01
     tt,xx,vv=[0.0],[0.0],[0.01]
     for i in range(0,100000):
     t += dt
     x, v = euler3(xx[-1],vv[-1])
     tt.append(t)
     xx.append(x)
     vv.append(v)

my_plot(xx, vv, tt)
```



kはあらかじめmで割られて正規化されているとします。これをEuler法で計算すると上のような結果が得られます。

徐々に発散していく様子がわかると思います。本来、摩擦のないバネは定常的に振動します。この発散の原因は、Euler法の計算誤差が大きいせいです。そこで、より精度の高いRunge-Kutta 法を導入します

2次のRunge-Kuttaの導出

一般にRunge-Kutta法と呼ばれる手法は、4次の古典的Runge-Kutta法を指します。導出は意外と面倒なので、2次の場合のさわりを紹介して、そこからの類推としましょう。x,v,tなどのパラメータ名を変更しますのでご注意あれ。

(「ANSI Cによる数値計算法」堀之内聰一,酒井幸吉,榎園茂,森北2002, p.133) テイラー展開により、 h^2 の精度まで展開する

$$y(x_0+h)=y(x_0)+y_0'h+rac{1}{2!}y_0''h^2+O(h^3)$$

この式において、 $y_0'=f(x_0,y_0)$ は既知とする。一方、 y_0'' は $f(x_0,y_0)$ から直接的には求められない。したがって、この式の右辺と h^2 の項まで一致する近似値を、 $f(x_0,y_0)$ だけを既知として算出する方法を考えよう。

平均値の定理より.

$$\Delta y = y(x_0 + h) - y(x_0) = hy'(x_0 + \theta h), \ 0 < \theta < 1$$

 $y'(x_0 + \theta h)$ の近似値として, $\theta = 0, \theta = 1$ の場合を考えると,

$$\Delta y \simeq hy'(x_0) \qquad \quad \text{where } \theta = 0 \ \Delta y \simeq hy'(x_0 + h) \qquad \quad \text{where } \theta = 1$$

これらの値は単独では Δy に対して h^2 の精度をもつ近似値にならないが、これらの一次結合 $\alpha hy'(x_0)+\beta hy'(x_0+h)$ を α,β をうまく定めることによって、 Δy の h^2 の精度をもつ近似値 にすることができる。実際、

$$\alpha h y'(x_0) + \beta h y'(x_0 + h) = \alpha h y'(x_0) + \beta h \{ y'(x+0) + y''(x_0)h + O(h^2) \}$$

= $(\alpha + \beta)h y'_0 + \beta h^2 y''_0 + O(h^3)$

したがって、テイラー展開式と係数を比較して、

$$lpha + eta = 1, \ eta = rac{1}{2}$$
 $lpha = rac{1}{2}, \ eta = rac{1}{2}$

となり.

$$\Delta y = rac{1}{2} h y'(x_0) + rac{1}{2} h y'(x_0 + h) + O(h^3)$$

いま.

$$k_1 = hy'(x_0) = hf(x_0, y_0)$$

とおこう. 上式に代入して.

$$hy'(x_0 + h) = hf(x_0 + h, y(x_0 + h))$$

$$= hf(x_0 + h, y(x_0) + y'(x_0)h + O(h^2))$$

$$= hf(x_0 + h, y_0 + k_1 + O(h^2))$$

$$= hf(x_0 + h, y_0 + k_1) + O(h^2)$$

したがって.

$$k_2 = hf(x_0 + h, y_0 + k_1)$$

とおけば、

$$\Delta y = rac{1}{2} k_1 + rac{1}{2} k_2 + O(h^3)$$

となる. これより.

$$k=rac{1}{2}(k_1+k_2), y_1=y_0+k$$

とおくと、 $y(x_0+h)=y_1+O(h^3)$ となり、 y_1 は h^2 の精度の近似値となる.

Runge-Kutta2次公式

こうして得られたRunge-Kuttaの2次の公式を定義すると次の通りです。

微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), where y(x_0) = y_0$$

の数値解は、刻み幅をh、 $x_n = x_0 + nh$ として、次の漸化式

$$y_{n+1} = y_n + k(n = 0, 1, 2, \cdots)$$

で与えられる ここに、kは次で定める

$$k_1 = hf(x_n, y_n), \ k_2 = hf(x_n + h, y_n + k_1), \ k = rac{1}{2}(k_1 + k_2)$$

Runge-Kutta4次公式

2次と同様の考え方で、 h^4 の精度を持つRunge-Kutta 4次公式を作ることができる.

微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y), \text{ where } y(x_0) = y_0$$

の数値解は、刻み幅をh、 $x_n = x_0 + nh$ として、次の漸化式

$$y_{n+1} = y_n + k(n = 0, 1, 2, \cdots)$$

で与えられる。ここに、kは次で定める。

$$egin{aligned} k_1 &= hf(x_n,y_n), \ k_2 &= hf(x_n + rac{h}{2},y_n + rac{k_1}{2}), \ k_3 &= hf(x_n + rac{h}{2},y_n + rac{k_2}{2}), \ k_4 &= hf(x_n + h,y_n + k_3), \ k &= rac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{aligned}$$

連立方程式にRunge-Kutta4次公式を

連立微分方程式

$$rac{dy}{dx} = f(x, y, z), \qquad where \, y(x_0) = y_0$$
 $rac{dz}{dz} = g(x, y, z), \qquad where \, z(x_0) = z_0$

の数値解は、刻み幅をh、 $x_n = x_0 + nh$ として、次の漸化式

$$y_{n+1} = y_n + k \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots) \ z_{n+1} = z_n + l \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

で与えられる。ここに、k,lは次で定める。

$$\begin{array}{ll} k_1 = hf(x_n,y_n,z_n), & l_1 = hg(x_n,y_n,z_n), \\ k_2 = hf(x_n + \frac{h}{2},y_n + \frac{k_1}{2},z_n + \frac{l_1}{2}), & l_2 = hg(x_n + \frac{h}{2},y_n + \frac{k_1}{2},z_n + \frac{l_1}{2}), \\ k_3 = hf(x_n + \frac{h}{2},y_n + \frac{k_2}{2},z_n + \frac{l_2}{2}), & l_3 = hg(x_n + \frac{h}{2},y_n + \frac{k_2}{2},z_n + \frac{l_2}{2}), \\ k_4 = hf(x_n + h,y_n + k_3,z_n + l_3), & l_4 = hg(x_n + h,y_n + k_3,z_n + l_3), \\ k = \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4), & l = \frac{1}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4) \end{array}$$

Runge-Kuttaの 4 次公式をそのままcodingすると上のようになります。 これを先ほどのバネ運動の問題に当てはめてみましょう

先ほど導出した運動方程式の漸化式

$$egin{aligned} v_{i+1} &= v_i - rac{k}{m} x_i \, dt \ x_{i+1} &= x_i + v_i \, dt \end{aligned}$$

とRunge-Kutta4次公式を示した連立微分方程式

$$rac{dy}{dx} = f(x, y, z), \ where \ y(x_0) = y_0$$
 $rac{dz}{dx} = g(x, y, z), \ where \ z(x_0) = z_0$

とを比べて、変数の表記の違いと関数f,gを具体的に書き下します。

4次の公式	運動方程式
х	t
У	Х
z	٧
f(x,y,z)	f(t,x,v) = v
g(x,y,z)	g(t,x,v) = -k x

この変数の書き換えを吸収する中間関数としてEuler3を書き換えます。RungeKutta4の仮引数を上の表に従って置き換えて、数値を渡しています。また、関数f,gも定義しておきます。

```
In [9]: def ff(t,x,v):
    return v

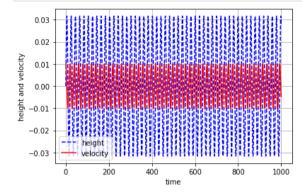
def gg(t,x,v):
    return -k*x

def ode(x0, v0):
    kk,ll = runge_kutta4(0, x0, v0, dt)
    x1 = x0 + kk
    v1 = v0 + ll
    return [x1, v1]

t, dt, k=0.0, 0.1, 0.1
    tt,xx,vv=[0.0],[0.0],[0.01]
    for i in range(0,10000):
```

```
t += dt
x, v = ode(xx[-1],vv[-1])
tt.append(t)
xx.append(x)
vv.append(v)

my_plot(xx, vv, tt)
```



これを前と同様に走らせると 発散も収束もすることなく、 定常的に振動を繰り返していること が見て取れます.

太陽系

分子動力学=Verlet(ベルレ)法

惑星の軌道は摩擦のない宇宙空間での2体の重力だけで考えることができる単純な動きなので、比較的容易に再現することができます。この運動を記述する方程式がニュートンの運動方程式

$$F = ma$$

です.ここでFはForce(力), mはmass(質量), aはaccelleration(加速度)です.

a を微分で明示すると,

$$F=mrac{d^2}{dt^2}r(t)$$

となります. r(t)がある時間での惑星の位置をさしているとします. これを微小時間hで級数 展開して

$$r(t+h) = r(t) + rac{dr}{dt}h + rac{1}{2}rac{d^2r}{dt^2}h^2 + O(h^3)$$

۲

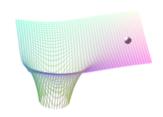
$$r(t-h) = r(t) - \frac{dr}{dt}h + \frac{1}{2}\frac{d^2r}{dt^2}h^2 + O(h^3)$$

での和をとって高次項を無視して、r(t+h)について解いて、 $d^2r/dt^2=F/m$ を代入すると、

$$r(t+h)=2r(t)-r(t-h)+rac{F}{m}h^2$$

となり、r(t+h)の位置をr(t-h)とr(t)での情報から予測することができます。

このように微分方程式を差分方程式に変換し、数値的に解いていく方法がVerlet法で、そのほかの種々の分子動力学法の手法の基本となる考え方です



太陽系=重力

実際の粒子(剛体球)の運動を記述するには粒子にかかるF(力)を知る必要があります。惑星の軌道を考えるときには太陽を中心とする重力

$$F = -G \frac{mM}{d^2}$$

ですので非常に単純になります. Gは重力定数, m, Mは2体それぞれの質量, dは2体間の距離(distance)です.

適当に規格化して、太陽が原点(0,0)にあり、 惑星の位置をr=(x,y)とすると、距離 $d=\sqrt{x^2+y^2}$ として、 力は

F=1/d** 2

で与えられます. そのカベクトルを位置によって分解すると、[-x/d,-v/d]となるので、

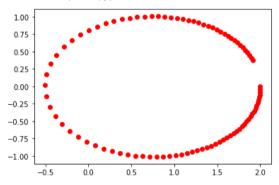
L=(x*x+y*y)**(3/2)force=[-x/L,-y/L]

で求めることができます (たぶん). 将来, 現場で宇宙空間のシミュレーションを実行する際は、この導出が正しいか確かめて、間違ってたら教えてください. 初期値r(0 - h), r(0) を適当におけば、後はVerlet式に従って芋ずる式で惑星の未来の軌跡をシミュレートすることができます。

こうしてKeplerの第1(楕円軌道), 第2(面積速度一定)法則が理解できます。

```
In [10]: import matplotlib.pyplot as plt
          def force(pos):
            x=pos[0]
            v=pos[1]
            L=(x*x+y*y)**(3/2)
            return [-x/L,-v/L]
          def Verlet(r0,rh):
            f=force(r0)
            x=2*r0[0]-rh[0]+h**2/m*f[0]
            y=2*r0[1]-rh[1]+h**2/m*f[1]
            return [x.v]
          h=0.04
          dx. dv = 0.0. h
          m=0.2
          xx=[2.0, 2.0-dx]
          yy = [0, -dy]
          for i in range(1.90):
            x1, y1 = Verlet([xx[-1],yy[-1]],[xx[-2],yy[-2]])
            xx.append(x1)
            yy.append(y1)
          plt.plot(xx,yy,'o',color='r')
          plt.show
```

Out[10]: <function matplotlib.pyplot.show(close=None, block=None)>



RLC回路の応答

電気回路の応答を考えましょう。R(resistor,抵抗) L(inductor,コイル) C(capacitor,コンデンサー)をそれぞれふたつずつ組み合わせてみていくのが常套手段なんですが、一個ずつだと面倒なので、まずは全部入れた方程式を立てます。そこからパラメータを変えて回路の挙動を観察します。こんなとこから進めていけるのが、数値計算の利点です。どんなんでも解けるから。

コンデンサに蓄えられた電荷をQ(t), 回路に流れる電流をI(t)とします.

- ullet 自己インダクタンスLのコイルにかかる電圧は $Lrac{dI}{dt}$
- ullet 容量Cのコンデンサにかかる電圧は $rac{Q}{C}$

抵抗値Rの抵抗に掛かる電圧はRI

となります。コイルにかかる電圧,コンデンサにかかる電圧,抵抗にかかる電圧の和が,この回路にかけた電圧V(t)であることを使うと,

$$Lrac{dI}{dt}+rac{Q}{C}+RI=V(t)$$

となります.ここで電流Iとコンデンサの電荷Qの関係 $I=rac{dQ}{dt}$ を使うと,

$$Lrac{d^{2}Q}{dt^{2}}+rac{Q}{C}+Rrac{dQ}{dt}=Vt$$

が得られます.

先ほどの重力系の問題と比べると

$$egin{array}{c} v
ightarrow i \ x
ightarrow q \end{array}$$

と置き換えれば良さそうです。

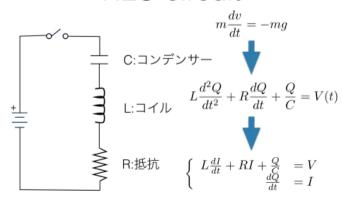
そうするとアルゴリズムは.

$$i_{i+1} = i_i + (V - RR i_i - qc q_i) dt \ q_{i+1} = q_i + i_i dt;$$

となりそうです。RRやqcには適当に規格化した値をいれます。

rlc_circuit

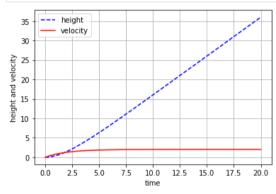
RLC circuit



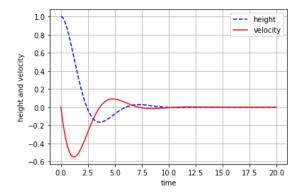
def euler_rlc(q0, i0): i1 = i0 + (v - r * i0 - qc * q0) * dt q1 = q0 + i0 * dt return [q1, i1] コンデンサー(C),コンダクター(L)を1として、抵抗値を0.5として、入力電圧を1Vと設定してコンデンサーにたまる電荷と電流の変化を確かめたのが次の図です。

```
In [12]: dt, r, qc, v = 0.01, 0.5, 0,1
ii=[0.0]
qq=[0.0]
tt=[0.0]
t = 0
for i in range(0,2000):
t += dt
q, i2 = euler_rlc(qq[i],ii[i])
tt.append(t)
qq.append(q)
ii.append(i2)

my_plot(qq,ii,tt)
```



入力電圧をOV, コンデンサーにあらかじめ1クーロン貯めたと設定して電荷と電流の時間変化を確かめたのが次の図です



課題

雨粒

空気抵抗を受ける雨粒の速度の変化を自分の言葉で説明しなさい。

大砲

free fallの初期設定を変えて、x=0から鉛直方向にv=9.8で投げ上げたボールの時間変化を示しなさい。

自由課題

以下は 2021年度は不要です.

RLC回路

抵抗が0の場合の電荷、電流の変化を確認しなさい.

RLC回路

抵抗が0の場合にも、エネルギー保存が成り立つようにコードを改良しなさい.