計算機実験 I (講義 2)

藤堂眞治
wistaria@phys.s.u-tokyo.ac.jp

2023/04/26

出席: 本日の 13 時までに ITC-LMS でアンケートに回答

準備: 微分方程式の書き換え

- 2 階の常微分方程式の一般形

$$\frac{d^2y}{dx^2} + p(x)\frac{dy}{dx} + q(x)y = r(x)$$

- $y_1 \equiv y$, $y_2 \equiv \frac{dy}{dx}$ とおくと

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dx} &=& y_2 \\ \frac{dy_2}{dx} &=& r(x) - p(x)y_2 - q(x)y_1 \end{cases}$$

- さらに $\boldsymbol{y} \equiv (y_1, y_2)$, $\boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}) \equiv (y_2, r(x) - p(x)y_2 - q(x)y_1)$

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

- n 階常微分方程式 $\Rightarrow$ n 次元の 1 階常微分方程式

初期値問題と境界値問題

- 初期値問題
  - 微分方程式において、ある 1 点に関する全ての境界条件 (初期値) が与えられているもの
  - 質点の運動など (時系列の問題)
- 境界値問題
  - 複数の点に関する境界条件が与えられているもの
  - 物体のゆがみの計算や静電場の計算など (空間的に解く問題)
- 初期値問題は初期値から逐次的に解くことが可能
- 境界値問題は初期値問題に比べて計算法が複雑

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

Euler 法の精度

- 微分方程式の両辺を t_n から t_{n+1} まで積分 (積分方程式)

$$y(t_{n+1}) - y(t_n) = \int_{t_n}^{t_{n+1}} f(t, y(t))dt = h\int_0^1 f(t_n + h\tau, y(t_n + h\tau))d\tau$$

- Euler 法は、被積分関数を定数で近似することに対応

$$f(t_n + h\tau, y(t_n + h\tau)) = f(t_n, y(t_n)) + O(h)$$

- $t = 0$ からある t_f まで積分すると、反復回数 $N = t_f/h$
- $t = t_f$ における誤差 $\sim N \times h \times O(h) = O(h)$

Euler 法の改良

- 積分方程式の被積分関数をもう 1 次高次まで展開

$$f(t_n+h\tau, y(t_n+h\tau)) = f(t_n, y(t_n))+\tau h\left\{\frac{\partial f}{\partial t}+f\frac{\partial f}{\partial y}\right\}_{t=t_n, y=y_n}+O(h^2)$$

- 積分を実行すると

$$y(t_{n+1}) = y(t_n) + hf(t_n, y_n) + \frac{1}{2}h^2\left\{\frac{\partial f}{\partial t}+f\frac{\partial f}{\partial y}\right\}_{t=t_n, y=y_n}+O(h^3)$$

中点法 (2 次 Runge-Kutta 法)

- 2 次公式

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

- このとき

$$
k_2 = h\left\{ f(t_n, y_n) + \frac{1}{2}h\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{2}k_1\frac{\partial f}{\partial y} + O(h^2) \right\}
$$

- したがって

$$
y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_n) + \frac{1}{2}h^2 \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} + f\frac{\partial f}{\partial y} \right\}_{t=t_n, y=y_n} + O(h^3)
$$

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

計算コストと精度

- 実際の計算では $f(t,y)$ の計算にほとんどのコストがかかる
- 計算回数と計算精度の関係

	1 次 (Euler 法)	2 次 (中点法)	3 次	4 次
計算精度	$O(h)$	$O(h^2)$	$O(h^3)$	$O(h^4)$
計算回数	N	$2N$	$3N$	$4N$

- 高次の Runge-Kutta を使う方が効率的
- どれくらい小さな h が必要となるか、前もっては分からない
- 刻み幅を変えて $(h, h/2, h/4, \ldots)$ 計算してみることが大事
  - 誤差の評価
  - 公式の間違いの発見

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
  - 一般的には、Newton 法などを使って非線形方程式を解く必要がある

Euler 法の安定性

- 方程式 $\dfrac{dy}{dt} = ky(t)$ を初期条件 $y(0) = 1$ のもとで解くと $y(t) = e^{kt}$
  - $\mathrm{Re}\, k < 0$ であれば、$\lim_{t\to\infty} y(t) = 0$ となる
- (陽的) Euler 法

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

  - $\lim_{t\to\infty} y(t) = 0$ となるための条件

$$|1 + hk| < 1$$

  - k が負の実数であっても、$h > 2/|k|$ では発散 $\Rightarrow$ 不安定

陰解法の安定性

- (陰的) 逆 Euler 法

$$y_{n+1} = y_n + hf(t_n, y_{n+1}) = y_n + hky_{n+1}$$
$$y_{n+1} = \frac{1}{1-hk} y_n$$

  - $\lim_{t\to\infty} y(t) = 0$ となるための条件

$$|1 - hk| > 1$$

  - k の実部が負であれば、常に $\lim_{t\to\infty} y(t) = 0$
  - 真の解がゼロに収束する k の全領域において数値解も収束
    $\Rightarrow$ 「A 安定」という

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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についても、システマティックに構成できる (ただし係数を解析的に求められるのは 4 次まで)。参考文献: H. Yoshida, Phys. Lett. A **150**, 262 (1990)

ベルレ (Verlet) 法

- 微分方程式が $\ddot{q}(t) = f[t, q(t)]$ の形で書かれる場合を考える
- $q(t)$ のテイラー展開

$$q(t \pm h) = q(t) \pm h\dot{q}(t) + \frac{h^2}{2}\ddot{q}(t) \pm \cdots$$

から、$q(t+h)$ と $q(t-h)$ の表式を足し合わせて整理

$$q(t+h) = 2q(t) - q(t-h) + h^2 f[t, q(t)] + O(h^4)$$

- 運動量の計算

$$p(t) = \frac{q(t+h) - q(t-h)}{2h}$$

- 初期条件: $q(0)$ と $p(0)$ から $q(h)$ を以下のように求める

$$q(h) = q(0) + hp(0) + \frac{h^2}{2} f[0, q(0)]$$

ベルレ法の変形

- 半整数ステップにおける運動量

$$p(t+h/2) = \frac{q(t+h)-q(t)}{h}$$

を導入すると

$$\begin{aligned} p(t+h/2) &= p(t-h/2) + \frac{q(t+h)-2q(t)+q(t-h)}{h} \\ &= p(t-h/2) + hf[t, q(t)] \end{aligned}$$

一方

$$q(t+h) = q(t) + hp(t+h/2)$$

- $\Rightarrow$ リープ・フロッグ法
座標についてはベルレ法と数学的に等価だが、運動量の精度が高く、丸め誤差に強い

速度ベルレ法 (Velocity Verlet)

- 運動量に対する中心差分

$$p(t) = \frac{q(t+h) - q(t-h)}{2h}$$

から

$$q(t+h) = 2hp(t) + q(t-h)$$

ベルレ法の式と和をとると

$$q(t+h) = q(t) + hp(t) + h^2 f[t, q(t)]/2$$
$$p(t+h) = p(t) + h\Big(f[t+h, q(t+h)] + f[t, q(t)]\Big)/2$$

- $\Rightarrow$ 速度ベルレ法
2 次のシンプレクティック積分法、丸め誤差にも安定

シンプレクティック法の一般論

- $z = \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix}$ と書き、$f(z)$ に作用する演算子 $\hat{D}(h)$ をポアソン括弧を用いて定義 ($h = h(z)$ はパラメータ)

$$\hat{D}(h)f = \{f, h\} = \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial h}{\partial p} - \frac{\partial h}{\partial q}\frac{\partial f}{\partial p}$$

- ハミルトニアン $H = T(p) + V(q)$ に対する正準方程式

$$\dot{z} = \hat{D}(H)z$$

  に対する形式解

$$z(t+h) = e^{h\hat{D}(H)}z(t)$$

- $e^{h\hat{D}(H)}$: 時間発展演算子 (正準変換)

シンプレクティック法の一般論

- $H = T(p)$ の時

$$\hat{D}(T)z = \frac{\partial z}{\partial q}\frac{\partial T}{\partial p} - \frac{\partial T}{\partial q}\frac{\partial z}{\partial p} = \begin{bmatrix} \frac{dT}{dp} \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\hat{D}(T)^n z = 0 \qquad n \geq 2$$

$$\therefore e^{h\hat{D}(T)}z = [1 + h\hat{D}(T)]z = \begin{bmatrix} q + h\frac{dT}{dp} \\ p \end{bmatrix}$$

- $H = V(q)$ の時も同様に

$$e^{h\hat{D}(V)}z = [1 + h\hat{D}(V)]z = \begin{bmatrix} q \\ p - h\frac{dV}{dq} \end{bmatrix}$$

- $e^{h\hat{D}(T)}$, $e^{h\hat{D}(V)}$ とも正準変換
- 一般的には、$e^{h\hat{D}(T+V)}z$ は厳密には計算できない

シンプレクティック法の一般論

- $e^{h\hat{D}(T+V)}$ を $e^{a_i h\hat{D}(T)}$, $e^{b_i h\hat{D}(V)}$ の積で近似する
- 演算子 (行列) A, B について

$$e^{h(A+B)} = e^{hA}e^{hB} + O(h^2)$$

- 一次のシンプレクティック法

$$\hat{S}_1 = e^{h\hat{D}(V)}e^{h\hat{D}(T)}$$

$$q(t+h) = q(t) + h\frac{dT(p(t))}{dp}$$

$$p(t+h) = p(t) - h\frac{dV(q(t+h))}{dq}$$

$\Rightarrow$ オイラー法+逆オイラー法

シンプレクティック法の一般論

- 二次のシンプレクティック法

$$e^{h(A+B)} = e^{\frac{h}{2}B} e^{hA} e^{\frac{h}{2}B} + O(h^3)$$

から

$$\hat{S}_2 = e^{\frac{h}{2}\hat{D}(T)} e^{h\hat{D}(V)} e^{\frac{h}{2}\hat{D}(T)}$$

$\Rightarrow$ リープ・フロッグ法

- 四次のシンプレクティック法 (吉田の方法)

$$\hat{S}_4 = e^{c_1 h\hat{D}(T)} e^{d_1 h\hat{D}(V)} e^{c_2 h\hat{D}(T)} e^{d_2 h\hat{D}(V)} e^{c_3 h\hat{D}(T)} e^{d_3 h\hat{D}(V)} e^{c_4 h\hat{D}(T)}$$

$$c_1 = c_4 = \frac{1}{2(2-2^{1/3})}, \ c_2 = c_3 = \frac{1-2^{1/3}}{2(2-2^{1/3})},$$

$$d_1 = d_3 = \frac{1}{2-2^{1/3}}, \ d_2 = \frac{2^{1/3}}{2-2^{1/3}}$$

講義日程 (予定)

- 全 8 回 (水曜 2 限 10:25-12:10)
  - 4 月 5 日 講義 1: 講義の概要・基本的なアルゴリズム
  - 4 月 19 日 演習 1: 環境整備・C 言語プログラミング・図のプロット
  - 4 月 26 日 講義 2: 常微分方程式
  - 5 月 10 日 演習 2 (グループ 1): 基本的なアルゴリズム・常微分方程式
  - 5 月 17 日 演習 2 (グループ 2): 基本的なアルゴリズム・常微分方程式
  - 5 月 24 日 休講
  - 5 月 31 日 休講
  - 6 月 7 日 講義 3: 連立方程式
  - 6 月 14 日 演習 3 (グループ 1): 連立方程式
  - 6 月 21 日 演習 3 (グループ 2): 連立方程式
  - 6 月 28 日 休講
  - 7 月 5 日 講義 4: 行列の対角化
  - 7 月 12 日 演習 4 (グループ 1): 行列の対角化
  - 7 月 19 日 演習 4 (グループ 2): 行列の対角化
- 2 回目以降の演習はクラスを 2 グループに分けて実施 (グループ 1: 学生証番号が奇数、グループ 2: 偶数)