計算物理学: No.4

物理学を含む自然現象一般はしばしば微分方程式の形で表される。ここではその中でも基本的な常微分方程式の数値解法を扱う。

1 常微分方程式の数値解法

1.1 常微分方程式の正規形

常微分方程式の問題は、常に 1 階の微分方程式の組に置き換えることができる。例えば、2 階の微分方程式

$$\frac{d^2y}{dx^2} + q(x)\frac{dy}{dx} = r(x) \tag{1}$$

は新しい変数 z を補助的に用いて、連立の 1 階微分方程式

$$\begin{aligned} \frac{dy(x)}{dx} &= z(x) \\ \frac{dz(x)}{dx} &= r(x) - q(x)z(x) \end{aligned} \tag{2}$$

に書き直すことができる。

一般に (多変数、高階の) 常微分方程式の問題は、関数 $y^i, i = 1, 2, \ldots, m$ に対して、

$$\frac{dy^i(x)}{dx} = f^i(x, y^1, y^2, \ldots, y^m), \qquad i = 1, \ldots, m \tag{3}$$

の正規形をした m 元連立 1 階微分方程式に帰着する。初期条件 $y^i(0)$ の組を与えると、これを数値的に解くことができる。

1.2 Euler 法

刻み幅 h に対し、独立変数の離散的な値を

$$x_n = a + nh \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{4}$$

とする。常微分方程式を差分に直すと

$$\frac{dy^i}{dx}(= f^i(x_n)) \approx \frac{y^i_{n+1} - y^i_n}{x_{n+1} - x_n} = \frac{y^i_{n+1} - y^i_n}{h} \tag{5}$$

となる。これから x_n における $y^i(x_n)$ の近似値を y_n^i とした時、次のステップ x_{n+1} での未知関数 y_{n+1}^i を

$$\boxed{y_{n+1}^i = y_n^i + hf_n^i, \qquad f_n^i \equiv f^i(x_n, y_n^1, \cdots, y_n^m)} \tag{6}$$

によって次々と決めるのがオイラー法である。

1.3 Euler 法の誤差

$y(x)$ のテイラー展開式を考えると、

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{1}{2}h^2y''(x) + \cdots \tag{7}$$

従って常微分方程式を差分に直す誤差は、

$$\frac{dy^i}{dx} = \frac{y_{n+1}^i - y_n^i}{h} + O(h^2) \tag{8}$$

計算する区間を a から b までとし、それを n 等分して計算を進めると $h = (b-a)/n$ なので、$x = a$ から $x = b$ までの n ステップの誤差は、

$$nO(h^2) = \frac{(b-a)}{h}O(h^2) = O(h) \tag{9}$$

になる。つまり、刻み幅を半分にすれば誤差は半分になる。

2 課題

課題 1.

$$\frac{dy}{dx} = 1 - y^2, y(0) = 0 \tag{10}$$

の数値解をオイラー法によって求めよ。この問題の解析解 $\tanh x$ と比較せよ。刻み幅 h に対する誤差の振舞いを確認せよ。

課題 2.
単振動の微分方程式

$$\frac{d^2y}{dx^2} + y = 0 \tag{11}$$

は 2 元 1 階常微分方程式系

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= z, \\ \frac{dz}{dx} &= -y \end{aligned} \tag{12}$$

に置き換えられる。

この数値解をオイラー法によって求めよ (初期条件は適当に選べ)。結果を解析解と比較せよ。刻み幅 h に対する誤差の振舞いを確認せよ。