計算物理学 No.6

1　常微分方程式の数値解法 3

1.1　Runge-Kutta 法

常微分方程式の数値解法で、オイラー法から修正オイラー法にすると精度が劇的に改善した。より高精度な公式を使うと計算の能率はさらに上がる。この中で古典的なものの 1 つは Runge-Kutta 法である。4 次の Runge-Kutta 法

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_n, y_n) \\ k_2 &= hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}k_1) \\ k_3 &= hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{1}{2}k_2) \\ k_4 &= hf(x_n + h, y_n + k_3) \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) + O(h^5) \end{aligned} \tag{1}$$

で、誤差は累積すると $O(h^4)$ である。中間値として 4 回 $f(x, y)$ を計算しなければならないが、精度の向上が著しいのでメリットがある。

Runge-Kutta 法の導出と、誤差の評価については「工学のための応用数値計算法入門」第 8 章 3 節 [1] など参照。

多元連立の常微分方程式に対しては、k_1, k_2, k_3, k_4 を配列に置き換えれば良い。手続きは修正オイラー法の連立常微分方程式の項も参考のこと。

1.2　その他

常微分方程式の数値解法には、Runge-Kutta 法の他、予測子・修正子法、Richardson 補外を応用した Bulirsch-Stoer 法などある。

参考文献 “Numerical Recipes in C,Fortran”

2　Fortran 文法について

2.1　配列

Fortran では、配列宣言は基本的には 1 から始まる。0 または負の数から配列宣言したい時には

```
real*8 x(0:100,-10:20)
```

と言った風にする。

よくあるミスは、配列宣言の範囲外の変数を読み込み・書き出しするものである。この場合、コンパイルエラーなどにはならないのでしばしば気づき難いが、予想とは異なる出力結果となる。

3　レポート課題

No.5 での課題の他、

$$\frac{d^2y}{dx^2} + \sin(y) = 0 \tag{2}$$

(大振幅の振子の問題; 初期値は各自与えること) をオイラー法、修正オイラー法で扱ってみよ。刻み幅に対して誤差がどのように収束するかも調べること。

単に数字を出力結果として出すだけでなく、gnuplot などでグラフの形にしてみよ。調和振動子や、振り子の課題では、$x, y(x)$ のグラフだけでなく、$y, dy/dx$ (位相空間) でも表示して、物理的意味の考察もしてみよ。振り子では、大振幅で回転運動になることに注意。

余裕があれば、4 次の Runge-Kutta 法にも取り組んでみよ。

この他、各自物理的に興味ある常微分方程式も扱ってみよ。

レポート提出期限は 6 月 23 日まで。

参考文献

[1] 「工学のための応用数値計算法入門」 篠崎、松下 共著、コロナ社