

基礎知識の確認

ODE の差分化

何らかの関数 $u = u(x)$ が与えられているとして、

$$\frac{dx}{dt} = u(x) \quad (\#1)$$

という ODE を考えよう。もちろん x は t の関数である。すなわち $x = x(t)$ 。

さて、時間 t を Δt ごとに区切って $t_k = t_0 + k\Delta t$ とし、常微分方程式 (#1) を差分化しよう。式 (#1) と等価な差分方程式のうち、最も簡単なものは

$$x_{k+1} = x_k + u_k \Delta t \quad (\#2)$$

という差分方程式である。ただし $x_k = x(t_k)$, また $u_k = u(x_k)$ としている。差分方程式 (#2) は、 $\Delta t \rightarrow 0$ の極限で常微分方程式 (#1) と一致する。

しかし、実用上は式 (#2) だけでは不便だ。数値解を求める場合には、小数の桁数を有限として計算する以上、 Δt を本当に極限までゼロに近づけることは不可能である。また、計算の効率の点からも、 Δt をあまり小さくするのは難しい。

そこで、無限小とは言わず適度に小さい有限の Δt でも使えるような差分式がほしくなる。そのような差分式の簡単な例としては

$$x_{k+1} = x_k + u(x_{k+1/2}) \Delta t \quad (\#3)$$

という差分式 (中点公式) や

$$x_{k+1} = x_k + \frac{u(x_k) + u(x_{k+1})}{2} \Delta t \quad (\#4)$$

という差分式 (台形公式) がよく知られている。

中点公式 (#3) を用いて実際に数値計算をおこなうには、途中の $x_{k+1/2}$ の近似値が必要で、これを $x_k^{(h)}$ と書くことにすると*、中点公式の計算手順は

$$x_k^{(h)} = x_k + u(x_k) \frac{\Delta t}{2} \quad (\#3a)$$

$$x_{k+1} = x_k + u(x_k^{(h)}) \Delta t \quad (\#3b)$$

*h は “half” (半分) の頭文字。時間を Δt の半分だけ進めた時点での値なので。

†p は “predictor” (予測子) の頭文字。未来の値を予測するので。

‡例えばタマネギを炒めるときは、まず切って、そのあとで炒めるのが普通だと思うが、まだ切ってもいないし皮もむいていないものを炒めようとしてはいけない。ここでの計算も同じことで、まず上の段の計算で $p_k^{(h)}$ を求め、それによって $v_k^{(h)} = p_k^{(h)}/m$ が得られてから下の段の式に移るのが、正しい手順というものである。

のように書ける。

他方、台形公式 (#4) の場合、 $x_{k+1/2}$ は必要ないが、その代わりに、未知数である x_{k+1} が右辺に現れているので計算が面倒である。陰解法と言って、式 (#4) を x_{k+1} についての方程式として解く方法もあるのだが、それよりも手軽な方法としては、式 (#2) を用いて x_{k+1} の近似値 $x_{k+1}^{(p)}$ を求め†、次により正確な x_{k+1} の値を式 (#4) から求めるという方法がある。手順をまとめて書くと

$$x_k^{(p)} = x_k + u(x_k) \Delta t \quad (\#4a)$$

$$x_{k+1} = x_k + \frac{u(x_k) + u(x_{k+1}^{(p)})}{2} \Delta t \quad (\#4b)$$

となる。

式 (#1) が 1 階の ODE であるのに対し、力学では、

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F \quad (\#5)$$

のような 2 階の ODE を解く必要がある。式 (#5) を数値的に解く際によく用いるのは、変数を 1 つ増やして

$$\frac{dx}{dt} = v = \frac{p}{m} \quad (\#6a)$$

$$\frac{dp}{dt} = F = F(x, p) \quad (\#6b)$$

のような 2 変数 1 階の ODE に書き直すという方法だ。こうすれば、中点公式や台形公式が適用できる。たとえば中点公式 (#3) を用いるなら

$$x_k^{(h)} = x_k + v_k \frac{\Delta t}{2}, \quad p_k^{(h)} = p_k + F(x_k, p_k) \frac{\Delta t}{2};$$

$$x_{k+1} = x_k + v_k^{(h)} \Delta t, \quad p_{k+1} = p_k + F(x_k^{(h)}, p_k^{(h)}) \Delta t$$

のような手順で計算すればよい。ただし、これをコンピュータのプログラムに直すときに計算の手順を間違える人が多いので、注意すること‡。台形公式の場合も同様である。

なお、 F が x のみの関数となっている（摩擦などがない）場合、中点公式と台形公式を組み合わせると

$$x_k^{(h)} = x_k + \frac{p_k \Delta t}{2m} \quad (\#7a)$$

$$p_{k+1} = p_k + F(x_k^{(h)}) \quad (\#7b)$$

$$x_k = x_k + \frac{p_k + p_{k+1}}{2m} \Delta t \quad (\#7c)$$

とすることもできる。

数値計算プログラムでの反復処理の書き方

差分方程式を数値的に解いていくためには、同じような計算を何度も何度も機械的に繰り返す必要がある。機械的な作業は機械にやらせればよい、というわけでコンピュータが作られた。

そういう次第で、コンピュータのプログラムの初步において、最も重要なポイントとなるのが反復処理の書き方である。Fortran では DO ループがこれにあたる。

たとえば次のようなプログラムにおいて、それぞれの変数がどのような順番でどう書き換えられていくか、説明できるか？（できないと困る）

- ① `x = 1.0; y = 0.0;`
- ② `do k = 1, 10`
- ③ `x = x * 0.5`
- ④ `y = y + x`
- ⑤ `end do`

このプログラムを実行すると、変数は次のような順番で書き換えられていく：

行番号	x	y	k	制御の流れ
①	1.0	0.0	未定	
②	1.0	0.0	1	
③	0.5	0.0	1	
④	0.5	0.5	1	
⑤				②へ戻る
②	0.5	0.5	2	
③	0.25	0.5	2	
④	0.25	0.75	2	
⑤				②へ戻る
②	0.25	0.75	3	
⋮				

DO ループは、このように、同じ手続きを繰り返して数表のようなものを作る手順として理解すればよい。

必要があれば、DO ループのなかに DO ループを含めることも可能である。たとえば

- ① `do i = 0, 9`
- ② `do j = 0, 9`
- ③ `write(*,*) i, j, i*j`
- ④ `enddo`
- ⑤ `end do`

とすれば掛け算九九の結果がすべて出力される。

追加課題（10月）

もともとの「10月の課題」を提出しなかった人や、提出したが採点対象外だった人は、代わりに以下の課題をレポートにまとめて提出すること。もともとの課題をまじめに提出した人は追加課題は不要である。

[1] 次に示すのは、

$$\frac{dx}{dt} = u(x) = x - x^2 \quad (\#8)$$

という ODE の数値解を中点公式 (#3) で求めるプログラムの一部である[§]。それぞれの変数がどのような順番でどう書き換えられていくか、上記の説明にならって表を用いて示せ（反復 3 回目以降は省略可）。

- ① `t = 0.0; x = 0.1; ! 初期条件`
- ② `dt = 0.05; tmax = 1.0; n = nint(tmax/dt);`
- ③ `do k = 0, n-1`
- ④ `write(*,*) t, x`
- ⑤ `xh = x + u(x) *dt/2`
- ⑥ `x = x + u(xh)*dt`
- ⑦ `end do`

[§]このプログラムには実はバグがある（⑥と⑦の間にもう 1 行必要）。できればこれも指摘してほしい。

[2] 質量 m の質点が

$$m \frac{d^2x}{dt^2} = \alpha x - \beta x^3 \quad (\#9)$$

という運動方程式にしたがって運動しているとする。ここで α および β はそれぞれ適当な次元をもつ正の定数である。変数をうまく置き直し、式 (#9) を

$$\frac{dq}{dt} = p \quad (\#10a)$$

$$\frac{dp}{dt} = F(q) = q - q^3 \quad (\#10b)$$

という 2 変数 1 階の ODE に書き直せ。

[3] 式 (#10) の数値解を求めるプログラムを作成せよ (再コンパイルしなくとも初期条件を変えられるように工夫する)。作ったプログラムをコンパイルして正しく実行できることを確認したうえで、そのプログラムのファイルをそのまま印刷して示せ。なお、実行できないと思われるプログラムや、複数の人が同じような癖のあるプログラムを出してきた場合[¶]については、レポート全体を無効とする場合もあるので注意すること。このプログラムを用いて、適当な (適切な) 初期条件に対する解を求め、次の 2 つの方法でグラフ化せよ:

- q を t の関数として図示
- 位相平面上に解軌道を示す

また、2 つのグラフの相互の対応関係を示すため、対応する点には何らかの記号を書き込んでおくこと。その際には、対応する点を順にたどっていけるように、よく考えて点を選ぶこと。

[4] 求めた数値解はどれくらい正しいか、理論的に検討せよ (以下の方法を両方とも試してみること):

- $q = 1 + \xi$ と置いて、 ξ は微小であるとする近似を用いて運動方程式を解き、その解をグラフ化して、数値解のグラフと重ねてみる。
- 運動方程式のエネルギー積分を求め、運動エネルギー K 、ポテンシャルエネルギー U および 全エネルギー $K + U$ の値を数値解から時刻ごとに算出して、その値を時刻に対してプロットする。

[5] 初期位置を $q = 0$ とし、きわめて微小な正の初速度を与えた場合を考える:

$$p|_{t=0} = p_0, \quad q|_{t=0} = 0, \quad 0 < p_0 \ll 1. \quad (\#11)$$

この場合の数値解をなるべく正確に計算し、その挙動について考察せよ。

- 最初の段階ではどのような挙動が見られるか? その結果は解析的に示せないか?
- 長い時間にわたって観察すると、どのような運動が見られるか?

以上の課題をレポートにまとめ、担当教員に手渡すか、事務室前のレポート箱に提出せよ。よほどの事情がない限り、提出期限は 2月1日(月)午後1時 とする。

配点: [1]-[5] 各 20 点
結果のグラフが全くないレポートは採点対象外

[¶]全く癖のない理想的なプログラムに複数の人が到達すれば同じプログラムになることもあり得るかもしれないが、同一の癖があるプログラムが提出された場合、不正行為を疑わないわけにはいかないだろう。

シミュレーション課題（10月）について

力学演習 II (応用数理) 2010-01-19

10月の課題のレポートは1月中に返却する予定ですが、問題の趣旨を理解していなかったり、レポート自体が未提出だったりする人が少なくないようです。そこで、返却に先立ち、以下の措置をとることにします。

- レポートを提出していない人・結果の図がなく採点対象外になっていると思われる人
2207号室に置いてある追加課題プリントを持っていき、所定の期日までに提出する。
- レポートを提出したが課題 [4] の趣旨を取り違えていることに気づいた人
課題 [4] のみをやりなおし、1月22日（金）午後5時までに追加提出する。

上記以外の追加提出は受け付けません。不明の点がある場合は応数 SNS 等を通じて問い合わせてください。