2. 常微分方程式.

2-0. 常微分方程式 → 独立変数が1つ. ex. $\boxed{\frac{dy}{dt} = f(t, y)}$ $y(t)$.

cf. 偏微分方程式 → 〃 2つ以上.

ex. 波動方程式. $\boxed{\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = 0.}$ $y(x, t)$

☆ 1次の常微分方程式.

$$\frac{dy}{dt} + \alpha y = 0 \longrightarrow y = y_0 \exp(-\alpha t)$$

decay Eq.

☆ 2次の常微分方程式.

ex. $m\frac{d^2y}{dt^2} + \eta \frac{dy}{dt} + Ky = 0.$ (Damped harmonic oscillator.)

$y,\ v \equiv dy/dt$ を ~~変数~~ 変数にとると...

$$\left.\begin{aligned} &\frac{dv}{dt} + \frac{\eta}{m} v + \frac{K}{m} y = 0. \\ &\frac{dy}{dt} - v = 0 \end{aligned}\right\} \rightarrow \text{2つの1次微分方程式}$$

連立

☆. n 次の常微分方程式 $\boldsymbol{y} \equiv [y_1, y_2, \cdots, y_n]$.

① $\boxed{\frac{d\boldsymbol{y}}{dt} + \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}, t) = 0.}$ n コの連立1次微分方程式.

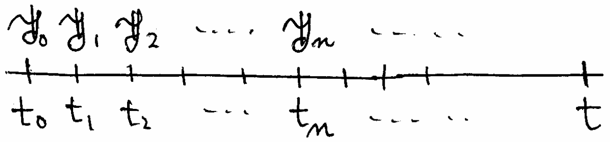
⇓ $t_0 \to t$ まで積分.

$$\boxed{\boldsymbol{y}(t) = \boldsymbol{y}(t_0) - \int_{t_0}^{t} dt' \, \boldsymbol{f}(\boldsymbol{y}(t'), t')} \quad ②$$

Formal (but useless) Solution.

2-1. Euler 法.

②式で ~~$t-t_0=\delta t$ が小さい場合を考える.~~ t_0とtの間を小さな区間δtに分割.



$(t_{n+1}-t_n \equiv \delta t)$

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} dt'\, f(y(t'),t') \simeq \delta t\, f(y(t_n),t_n)$$

then $\quad y(t_{n+1}) = y(t_n) - \delta t\, f(y(t_n),t_n)$

$$③ \quad \boxed{y_{n+1} = y_n - \delta t\, f_n}$$

これは...

元々の①式 $\left.\frac{dy}{dt}\right|_n + f_n = 0$

において. $\left.\frac{dy}{dt}\right|_n \simeq \frac{y_{n+1}-y_n}{\delta t}$ （前進差分）

とおくことに等しい.

2-1-1. Euler法の精度.

Taylor展開 $$y_{n+1} = y_n + \delta t \left.\frac{dy}{dt}\right|_n + \frac{\delta t^2}{2} \left.\frac{d^2y}{dt^2}\right|_n + \cdots$$

Euler法. $$y_{n+1} = y_n - \delta t f_n = y_n + \delta t \left.\frac{dy}{dt}\right|_n$$

よって. Euler法の精度は. 1次である.
(短時間の)

2-1-2 Euler法の安定性. (誤差に~~対する~~ 真の 差分方程式.(微分方程式 ではない!)からのずれ)

$y_n + \delta y_n$

コンピューターの実数の精度は.有限なので.
真の値からのずれ.が生じる.

$$y_{n+1} + \delta y_{n+1} = y_n + \delta y_n - \delta t \left[f_n + \left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_n \delta y_n \right]$$

これに③を代入.

$$\delta y_{n+1} = \left[1 - \delta t \left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_n \right] \delta y_n$$

誤差が増加しない条件. $[\cdots]^2 \leq 1$

右の≤. ⇒ $\delta t > 0$ なので. $\left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_n > 0$.
左の≤. ⇒. $\delta t \leq 2 \Big/ \left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_n$ (for any n.)

Example.

① Decay Eq. $dy/dt + \alpha y = 0$.

$\boxed{\alpha > 0}$ $\boxed{\delta t \leq 2/\alpha}$

② Simple Oscillation Eq. $\frac{dy}{dt} \pm i\omega y = 0$

$[\cdots] = [1 \pm i\omega\delta t]$.

$[\cdots]^2 = 1 + \omega^2 \delta t^2 \leq 1$. × NG.

③ Nonlinear Eq. $\frac{dy}{dt} + \alpha y^2 = 0$

$\boxed{\alpha y > 0}$ $\boxed{\delta t \leq 1/\alpha y}$

条件が y に依存するので注意が必要.

④ $\mathbb{y}$, $\mathbb{f}$ が多変数(ベクトル)の場合.

$$\delta \mathbb{y}_{n+1} = [\mathbb{1} - \delta t \mathbb{F}]\, \delta \mathbb{y}_n$$

$$\mathbb{F} \equiv \partial \mathbb{f} / \partial \mathbb{y} \quad \left(F_{ij} \equiv \partial f_i / \partial y_j \right)$$

$[\cdots]$ を対角化した時の要素(固有値)がすべて1より小さければよい. //

1.3. Leap-Frog（かえるとび）法.

中心差分を用いる.

$$\left.\frac{dy}{dt}\right|_n \simeq \frac{y_{n+1}-y_{n-1}}{2\delta t}.$$

（cf. オイラー法は前進差分. $\left.\frac{dy}{dt}\right|_n \simeq \frac{y_{n+1}-y_n}{\delta t}$ ）

④. $$\boxed{y_{n+1} = y_{n-1} - 2\delta t\, f_n}$$

Taylor展開.

$$y_{n+1} = y_n + \delta t \left.\frac{dy}{dt}\right|_n + \frac{\delta t^2}{2}\left.\frac{d^2y}{dt^2}\right|_n + \cdots$$

$$-\ \Big|\ y_{n-1} = y_n - \delta t \left.\frac{dy}{dt}\right|_n + \frac{\delta t^2}{2}\left.\frac{d^2y}{dt^2}\right|_n + \cdots$$

$$y_{n+1} = y_{n-1} + 2\delta t \left.\frac{dy}{dt}\right|_n + (\delta t)^3 + (\delta t)^6 \cdots$$

よって Leap-Frog 法の精度は 2次 である //.

次に安定性を調べる...

$$\delta y_{n+1} = \delta y_{n-1} - 2\delta t \left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_n \delta y_n$$

$$\left(\begin{array}{l} \delta y_n = g\,\delta y_{n-1} \\ \delta y_{n+1} = g^2\,\delta y_{n-1} \end{array}\right.$$ と表すと...

$$g^2 = 1 - 2\delta t \left.\frac{\partial f}{\partial y}\right|_n g.$$

$$\therefore\quad g = \delta t \frac{\partial f}{\partial y} \pm \sqrt{\left(\delta t \frac{\partial f}{\partial y}\right)^2 + 1}$$

~~$g_+ g_- = -1$ ∴ $|g_+| \geq 0$ or $|g_-| \geq 0$ ⇓ unstable.~~

Example.

①. Decay Eq. $\frac{\partial f}{\partial y} = \alpha$.

$$g_\pm = \alpha\delta t \pm \sqrt{(\alpha\delta t)^2 + 1}$$

$$\therefore\ g_+ g_- = -1.$$

$$|g_+| \geq 0 \quad \text{or} \quad |g_-| \geq 0 \Rightarrow \text{不安定}.$$

② Simple Oscillation Eq. $\frac{\partial f}{\partial y} = \pm i\omega$

$1 - \omega^2\delta t^2 > 0$.
$$g_\pm = i\omega\delta t \pm \sqrt{1 - \omega^2\delta t^2}$$

$$\therefore\ |g_+|^2 = |g_-|^2 = \omega^2\delta t + 1 - \omega^2\delta t = 1. \quad \text{安定}$$

$1 - \omega^2\delta t^2 < 0$.
$$g_\pm = i\omega\delta t \pm \sqrt{\omega^2\delta t^2 - 1}\ i$$
$$= \left(\omega\delta t \pm \sqrt{\omega^2\delta t^2 - 1}\right) i$$

$$\therefore\ g_+ g_- = -1 \qquad \text{不安定}$$

$$\boxed{\omega^2\delta t^2 < 1}$$

1-4. Runge-Kutta 法

$$y_{n+\frac{1}{2}} = y_n - \frac{1}{2}\delta t\, f(y_n, t_n)$$

$$y_{n+1} = y_n - \delta t\, f(y_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+\frac{1}{2}})$$

Euler + Leap Frog.　　2次の精度を持つ.

○ 安定性.

$$y_{n+\frac{1}{2}} + \delta y_{n+\frac{1}{2}} = y_n + \delta y_n - \frac{1}{2}\delta t\left[f_n + \frac{\partial f}{\partial y}\Big|_n \delta y_n\right].$$

$$\delta y_{n+\frac{1}{2}} = \delta y_n\left[1 - \frac{1}{2}\delta t \frac{\partial f}{\partial y}\Big|_n\right]$$

○

$$y_{n+1} + \delta y_{n+1} = y_n + \delta y_n - \delta t\left[f_{n+\frac{1}{2}} + \frac{\partial f}{\partial y}\Big|_{n+\frac{1}{2}} \delta y_{n+\frac{1}{2}}\right]$$

$$\delta y_{n+1} = \delta y_n - \delta t\left[\left(\frac{\partial f}{\partial y}\Big|_n + \Delta \frac{\partial f}{\partial y}\Big|_{\frac{1}{2}}\right)\delta y_n\left[1 - \frac{1}{2}\delta t \frac{\partial f}{\partial y}\Big|_n\right]\right]$$

$\Delta \times \delta$ の項を無視.

$$\delta y_{n+1} = \delta y_n + \delta y_n\left[-\delta t \frac{\partial f}{\partial y}\Big|_n + \frac{1}{2}\left(\delta t \frac{\partial f}{\partial y}\Big|_n\right)^2\right]$$

Example.

①. Decay Eq. $\dfrac{\partial f}{\partial y} = \alpha$.

$$-1 \le \left[1 - \alpha\delta t + \frac{1}{2}\alpha^2 \delta t^2 \right] \le 1$$

for small δt. . .

$$-1 \le 1 - \alpha\delta t. \Rightarrow \boxed{\delta t \le 2/\alpha.}$$

②. Simple Oscillation Eq. $\dfrac{\partial f}{\partial y} = \pm i\omega$.

$$\left| 1 - i\omega\delta t - \frac{1}{2}\omega^2\delta t^2 \right|^2$$

$$= 1 + \frac{1}{4}(\omega\delta t)^4 \cancel{- \omega^2\delta t^2} \cancel{+ \omega^2\delta t^2}$$

$$\boxed{1 + \frac{1}{4}(\omega\delta t)^4} \simeq 1.$$

maybe OK.

~~このRK法でも用 $y_{n+\frac{1}{2}}$ を求めるために~~

$\boxed{\text{4次のRKがよく使われる.}}$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}\delta t \left(f_n + 2f'_{n+\frac{1}{2}} + 2f''_{n+\frac{1}{2}} + f'_{n+1} \right).$$

$$f_n = f(y_n, t_n)$$

$$f'_{n+\frac{1}{2}} = f\left(y_n + \frac{\delta t}{2} f_n,\ t_{n+\frac{1}{2}}\right)$$

$$f''_{n+\frac{1}{2}} = f\left(y_n + \frac{\delta t}{2} f'_{n+\frac{1}{2}},\ t_{n+\frac{1}{2}}\right)$$

$$f'_{n+1} = f\left(y_n + \delta t f''_{n+\frac{1}{2}},\ t_{n+1}\right)$$

2-4. Predictor - Corrector 法

$$y_{n+1} = y_n - \frac{1}{2}\delta t\left[f_{n+1} + f_n \right].$$

$$y_{n+1} = y_n - \frac{1}{2}\delta t\left[f(y_{n+1}, t_{n+1}) + f(y_n, t_n) \right].$$

これをオイラー法で予測する.

Pre. $\quad y'_{n+1} = y_n - \delta t\, f(y_n, t_n)$

Corr. $\quad y_{n+1} = y_n - \frac{1}{2}\delta t\left[f(y'_{n+1}, t_{n+1}) + f(y_n, t_n) \right]$

精度と安定性は Runge-Kutta と同じ

2-5、Symplectic 法.（ハミルトン系のみ.）

1次元調和振動子を考える.

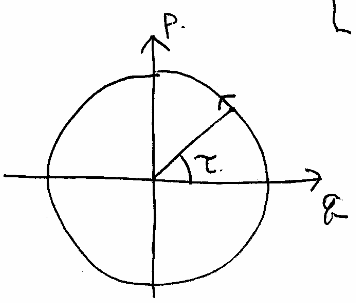
$$H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) \qquad (1)$$

Hamiltonの運動方程式.

$$\frac{dq}{dt} = p \;,\quad \frac{dp}{dt} = -q \qquad (2)$$

この時間発展. $t = 0 \to \tau$

厳密解. $$\begin{bmatrix} q(\tau) \\ p(\tau) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\tau & \sin\tau \\ -\sin\tau & \cos\tau \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q(0) \\ p(0) \end{bmatrix} \qquad (3)$$



この解は、面積を保存する写像. つまり. $(q, p) \to (q', p')$ の Jacobi の行列を M とすると

$$\det. M \quad , \quad M = \frac{\partial(q', p')}{\partial(q, p)}$$

となる写像である.

(3)の様な線形変換では、 $M = \begin{bmatrix} \cos\tau & \sin\tau \\ -\sin\tau & \cos\tau \end{bmatrix}$

$$\therefore \det M = \cos^2\tau + \sin^2\tau = 1.$$

この面積保存性の高次元への拡張を Symplectic 保存性と呼ぶ.

$$\underline{\sum dp_i \wedge dq_i = \sum dp_i' \wedge dq_i'}$$

力学のことばでは. 正準変換のこと.

Hamilton 系

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

の解は正準変換なので、上記の Symplectic 性を持つはずである。
(持たなければならない)

○ ~~Hamiltonian~~ 1次元調和振動子を数値的に解いてみよう

まず、Euler 法。 ~~[解析解]~~

$$\begin{bmatrix} q(t+\delta t) \\ p(t+\delta t) \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & \delta t \\ -\delta t & 1 \end{bmatrix}}_{\equiv M} \begin{bmatrix} q(t) \\ p(t) \end{bmatrix}$$

$$\det M = 1 + \delta t^2$$

○ Symplectic 性は1次までしか成り立っていない。

よって、

$$H(t+\delta t) = \frac{1}{2}\left(q(t+\delta t)^2 + p(t+\delta t)^2\right)$$

$$= \frac{1}{2}\Big(q(t)^2 + 2q(t)p(t)\delta t + p(t)^2\delta t^2$$
$$+ p(t)^2 - 2q(t)p(t)\delta t + q(t)^2\delta t^2 \Big)$$

$$= (1+\delta t^2) H(t)$$

全エネルギーの単調増加を引きおこす。

4次のR.K.法では

$$\begin{pmatrix} q(t+\delta t) \\ p(t+\delta t) \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1-\frac{\delta t^2}{2}+\frac{\delta t^4}{24} & \delta t - \frac{1}{6}\delta t^3 \\ -\delta t + \frac{1}{6}\delta t^3 & 1-\frac{\delta t^2}{2}+\frac{\delta t^4}{24} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix}$$

$$\Longrightarrow \quad H(t+\delta t) = \left(1 - \frac{\delta t^6}{72} + \cdots \right) H(t)$$

(小さな δt に対して) 単調減少

○ この様な挙動を改善するには、Symplectic性を満たしたアルゴリズムを用いればよい。

1次のSymplectic法 (Eulerの改良)

$$\begin{pmatrix} q(t+\delta t) \\ p(t+\delta t) \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \delta t \\ -\delta t & 1-\delta t^2 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} q(t) \\ p(t) \end{pmatrix}$$

Symplectic性 ⟺ 正準変換 (Hamilton系)

$$\det[\cdots] = 1$$

この変換は元のHamiltonian H に ~~[illegible]~~ 近い別のHamiltonian

$$H' \simeq H$$

に対する厳密な解法になっているはずである。

・[ ] の固有値は λ, λ^{-1} のペアとなる

・p, q を変数変換して [ ] を対角化する

$$\begin{bmatrix} \xi' \\ \eta' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi \\ \eta \end{bmatrix}$$

・この変換では厳密に $\xi'\eta' = \xi\eta$

・$\xi\eta$ を p と q で書くと $\frac{1}{2}(p^2+q^2)+\frac{\tau}{2}pq$ が得られる

結論 Symplectic法

→ 元の物理系と ~~■~~ $\underbrace{\text{微少な違い}}_{}$ のある物理系に対する厳密解法を与える

オーダーn次の

$$q_{n+1}^2 + p_{n+1}^2 = (q_n + \delta t\, p_n)^2 + (-\delta t\, q_n + (1-\delta t^2)p_n)^2$$

$$= q_n^2 + \delta t^2 p_n^2 + 2\delta t\, q_n p_n \qquad -2\delta t\, q_n p_n + 2\delta t^3 q_n p_n$$

$$+ \delta t^2 q_n^2 + (1-\delta t^2)^2 p_n^2 - 2\delta t(1-\delta t^2) q_n p_n$$

$$(1-2\delta t^2+\delta t^4)p_n^2$$

$$= (1+\delta t^2)q_n^2 + (1-\delta t^2+\delta t^4)p_n^2 + 2\delta t^3 q_n p_n$$

$$q_{n+1}^2 + p_{n+1}^2 + q_{n+1}p_{n+1}\delta t$$

$$= \text{——} + (q_n+\delta t\, p_n)(-\delta t\, q_n + (1-\delta t^2)p_n)\delta t$$

$$= \text{——} - \delta t^2 q_n + \delta t^2(1-\delta t^2)p_n + (\delta t - 2\delta t^3)p_n q_n$$

$$= q_n^2 + p_n^2 + \delta t\, q_n p_n = \text{const.}$$

$$\boxed{H' = H + \frac{1}{2}\delta t\, pq}$$

Symplectic性の検証 (1)

RK2nd

$$q_{n+1/2} = q_n + \frac{1}{2}\delta t\, p_n$$

$$p_{n+1/2} = p_n - \frac{1}{2}\delta t\, q_n$$

$$\begin{aligned} q_{n+1} &= q_n + \delta t\, p_{n+1/2} \\ &= q_n + \delta t\left(p_n - \frac{1}{2}\delta t\, q_n\right) \\ &= \left(1 - \frac{1}{2}\delta t^2\right) q_n + \delta t\, p_n \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= p_n - \delta t\, q_{n+\frac{1}{2}} \\ &= p_n - \delta t\left(q_n + \frac{1}{2}\delta t\, p_n\right) \\ &= \left(1 - \frac{1}{2}\delta t^2\right) p_n - \delta t\, q_n \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-\frac{1}{2}\delta t^2 & \delta t \\ \delta t & 1-\frac{1}{2}\delta t^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \det.\,[\cdots] &= \left(1 - \frac{1}{2}\delta t^2\right)^2 - \delta t^2 \\ &= 1 - \delta t^2 + \frac{1}{4}\delta t^4 - \delta t^2 = \underline{1 + \frac{1}{4}\delta t^4} \end{aligned}$$

Symplectic性の検証(2)

4次RK.

q	p
$q_{n+1} = q_n + \frac{1}{6}\delta t\,(p_n + 2p' + 2p'' + p''')$	$p_{n+1} = p_n - \frac{1}{6}\delta t\,(q_n + 2q' + 2q'' + q''')$
$q' = q_n + \frac{1}{2}\delta t\, p_n$ $q'' = q_n + \frac{1}{2}\delta t\,(p_n - \frac{1}{2}\delta t\, q_n)$ $q''' = q_n + \delta t\,(p_n - \frac{1}{2}\delta t\,(q_n + \frac{1}{2}\delta t\, p_n))$	$p' = p_n - \frac{1}{2}\delta t\, q_n$ $p'' = p_n - \frac{1}{2}\delta t\,(q_n + \frac{1}{2}\delta t\, p_n)$ $p''' = p_n - \delta t\,(q_n + \frac{1}{2}\delta t\,(p_n - \frac{1}{2}\delta t\, q_n))$
$\therefore q_{n+1} = \left(1 - \frac{\delta t^2}{2} + \frac{\delta t^4}{24}\right) q_n + \left(\delta t - \frac{1}{6}\delta t^3\right) p_n$	$p_{n+1} = \left(1 - \frac{\delta t^2}{2} + \frac{\delta t^4}{24}\right) p_n + \left(-\delta t + \frac{1}{6}\delta t^3\right) q_n$

$$\begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 - \frac{\delta t^2}{2} + \frac{\delta t^4}{24} & \delta t - \frac{1}{6}\delta t^3 \\ -\delta t + \frac{1}{6}\delta t^3 & 1 - \frac{\delta t^2}{2} + \frac{\delta t^4}{24} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix}$$

$$\det[\cdots] = 1 - \frac{1}{72}\delta t^6 + \frac{1}{24^2}\delta t^8$$