10/30/2001

「計算材料力学」課題 1

中谷 彰宏

レポート提出日：11 月 9 日 (金) 講義開始時
(プログラムリストを添付すること．)

ハミルトニアン,

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

で記述される 1 次元調和振動子系に対して，時刻 $t = 0$ で，$q = 1$, $p = 0$ とする．系の時間発展を追跡する問題を考える．q と p を成分とする 2 成分の相空間上のベクトルを定義し，オイラー法，修正オイラー法 (2 次のルンゲ・クッタ法)，4 次のルンゲ・クッタ法，それぞれに対して，Δt と，時刻 t のベクトル値 $(q(t), p(t))$ を与えれば，時刻 $t + \Delta t$ のベクトル値 $(q(t+\Delta t), p(t+\Delta t))$ をを返す関数を作り，以下の内容について検討しなさい．

1. $q(t)$, $p(t)$ をそれぞれ横軸，縦軸にとり，パラメータ t の曲線の軌跡のグラフを描きなさい．
2. それぞれの解法に対し，さまざまな Δt に対して，ハミルトニアンの保存性，時間対称性，計算時間の比較を行ないなさい．
3. 適当な時間ステップ Δt の選択について考察しなさい．
4. 速度ベルレ法,

$$\begin{aligned}
p(t + \frac{\Delta t}{2}) &= p(t) - \frac{\Delta t}{2} q(t) \\
q(t + \Delta t) &= q(t) + p(t + \frac{\Delta t}{2})\Delta t \\
p(t + \Delta t) &= p(t + \frac{\Delta t}{2}) - \frac{\Delta t}{2} q(t + \Delta t)
\end{aligned}$$

   を用いてプログラムを作成し上と同様の検討をしなさい．

【参考】常微分方程式の初期値問題,

$$\frac{dX_I(t)}{dt} = F_I(X(t), t), \qquad X_I(t_0) = X_I^0, \qquad (I = 1, 2, \cdots, N) \tag{2}$$

の数値解法として，オイラー法，修正オイラー法 (2 次のルンゲ・クッタ法)，4 次のルンゲ・クッタ法の手順を以下に示す．ここで，$X(t) = (X_1(t), \cdots, X_N(t))$ である．

オイラー法

$$X_I(t + \Delta t) = X_I(t) + F_I(X(t), t)\Delta t \tag{3}$$

修正オイラー法 (2 次のルンゲ・クッタ法)

$$X_I(t + \Delta t) = X_I(t) + k_I^{(2)} \Delta t \tag{4}$$

ここで，$k_I^{(2)}$ は，以下の手順で計算する．

$$k_I^{(1)} = F_I(X(t), t) \tag{5}$$

$$k_I^{(2)} = F_I\left(X(t) + k^{(1)}\frac{\Delta t}{2}, t + \frac{\Delta t}{2}\right) \tag{6}$$

$k^{(1)} = (k_1^{(1)}, \cdots, k_N^{(\nu)})$ である．

4 次のルンゲ・クッタ法

$$X_I(t+\Delta t) = X_I(t) + k_I \Delta t \tag{7}$$

ここで，k_I は,

$$k_I = \frac{1}{6}\left(k_I^{(1)} + 2k_I^{(2)} + 2k_I^{(3)} + k_I^{(4)}\right) \tag{8}$$

で与えられ，$k_I^{(1)}$，$k_I^{(2)}$，$k_I^{(3)}$，$k_I^{(4)}$ は,

$$k_I^{(1)} = F_I(X(t), t) \tag{9}$$

$$k_I^{(2)} = F_I\left(X(t) + k^{(1)}\frac{\Delta t}{2}, t + \frac{\Delta t}{2}\right) \tag{10}$$

$$k_I^{(3)} = F_I\left(X(t) + k^{(2)}\frac{\Delta t}{2}, t + \frac{\Delta t}{2}\right) \tag{11}$$

$$k_I^{(4)} = F_I\left(X(t) + k^{(3)}\Delta t, t + \Delta t\right) \tag{12}$$

を順に計算することにより得られる．ここで，$k^{(\nu)} = (k_1^{(\nu)}, k_2^{(\nu)}, \cdots, k_n^{(\nu)})$ (ただし，$\nu = 1,2,3,4$) である．