

## 第 II 部

微分方程式による  
物理現象のモデル化

## 9 運動学

Newton の運動方程式は基本的には 2 階の常微分方程式です。それを次のように考えて、 $v$  と  $x$  の連立 1 階微分方程式として計算します。

$$\frac{dx}{dt} = v, \quad \frac{dv}{dt} = f(x, v, t)$$

## 9.1 落体運動

## 9.1.1 速度に比例する抵抗がある場合

静かな大気中を落下する雨粒には、一定の大きさの重力と速度に比例する大きさの空気抵抗が働きます。したがって、Newton の運動方程式は、

$$m \frac{dv}{dt} = mg - b_1 v$$

となり、初期条件  $v(0) = 0$  の下で解析解は

$$v = \frac{mg}{b_1} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{b_1}{m}t\right) \right\}$$

となることは知っての通りです。数値計算を行って、解析解と比較しましょう。

**例題 2** (雨粒の落下運動)  $m = 1 \text{ kg}$ ,  $g = 9.8 \text{ m s}^{-2}$  とし、初速度  $v_0$ ,  $b_1$  を適当に設定して、解析解と数値解とを比較するスクリプトを組みなさい。また、タイトルに  $v_0$ ,  $k$  を表示するように工夫しなさい。

[解] スクリプトを rain.m に、結果を図 14 に示します。

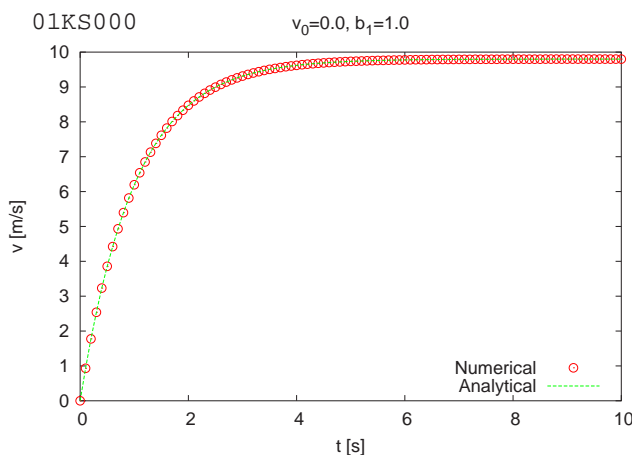


図 14 速度に比例する抵抗が働く落体運動

## リスト10 rain.m

```

1: function dx = rain(x,t)
2:   global G M B1
3:   dx(1) = G - B1*x(1)/M;
4: endfunction
5:
6: global G M B1
7: G=9.8; M=1.0; B1=1.0;
8: V0=0;
9:
10: t=linspace(0, 10, 101);
11: X0=[V0];
12: z=lsode("rain", X0, t);
13: v=M*G/B1*(1-exp(-B1*t/M));
14:
15: Title=sprintf("v_0=%1f, b_1=%1f", V0, B1);
16: xlabel("t [s]")
17: ylabel("v [m/s]")
18: text(0.05,0.95, "{/Courier=28 01KS000}", \
19:      "Units","screen")
20: title(Title);
21: gset key bottom
22: gset pointsize 1.5
23: plot(t, z(:,1), "@16;Numerical;");
24: hold on
25: plot(t, v, "-2;Analytical;");
26: pause
27:
28: gset term postscript enhanced color eps \
29:      "Helvetica" 20
30: gset out "rain.eps"
31: replot

```

**問題15** (雨粒の落下運動) の数値解と解析解の誤差を図に示すスクリプトを考えなさい。

**問題16** 速度の 2 乗に比例する空気抵抗がある場合の数値解を求め、解析解と比較するスクリプトを考えなさい。

**問題17** (万有引力) 地表近くでは物体に働く力は一定とみなせますが、遠く離れると万有引力の法則より距離の自乗に反比例します。地表からロケットを打ち上げるような場合には、当然このような力を考える必要があります。ロケットの運動を数値解析して、解析解と比較しなさい。

☞ ロケットの地球の中心からの距離を  $r$ 、万有引力定数を  $G$ 、地球の質量を  $M$  半径を  $R$  とすると、重力加速度  $g$  は地表 ( $r = R$ ) において  $g = MG/R^2$  と定義されますから、Newton の運動方程式は

$$\frac{dv}{dt} \left( = -\frac{MG}{r^2} \right) = -\frac{gR^2}{r^2}$$

となります。一次元運動をするものとして解析解は、初速度  $v_0$  と脱出速度  $\sqrt{2gR}$  の大小関係を条件に

(i)  $v_0 < \sqrt{2gR}$ : 脱出速度未満では、頂点 ( $v = 0$  のときの時間を  $T^*$  とおく) までは

$$\begin{aligned} & \sqrt{2gR\xi_0} t \\ & = -R \left[ \rho \sqrt{\frac{1}{\rho\xi_0} - 1} + \frac{1}{\xi_0} \tan^{-1} \sqrt{\frac{1}{\rho\xi_0} - 1} \right] \end{aligned}$$

$$-\left(\sqrt{\frac{1}{\xi_0}-1} + \frac{1}{\xi_0} \tan^{-1} \sqrt{\frac{1}{\xi_0}-1}\right) \\ = F(\rho)$$

頂点を過ぎると

$$t = 2T^* - F(\rho) / \sqrt{2gR\xi_0}$$

(ii)  $v_0 = \sqrt{2gR}$ : 脱出速度では,

$$t = \frac{2}{3}R \left(\rho^{\frac{3}{2}} - 1\right) / \sqrt{2gR}$$

と表されます. ここに,  $\rho = r/R$ ,  $\xi_0 = \left(1 - \frac{v_0^2}{2gR}\right)$  です. 初速度を  $v_0 = \beta\sqrt{2gR}$  と表して, パラメータ  $\beta = 1, 0.999, 0.99, 0.9, 0.8$  とした場合の結果を図15に示します.

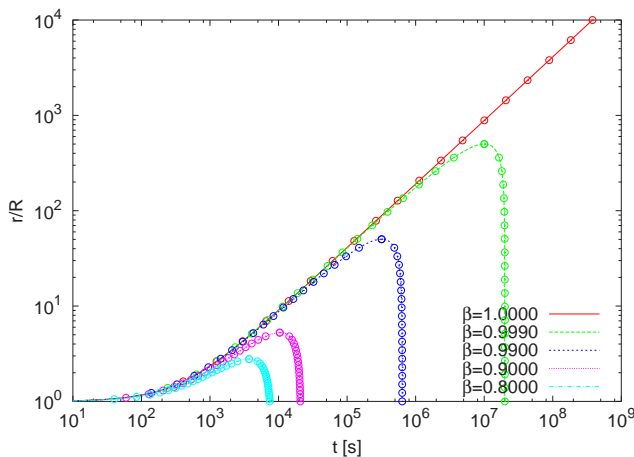


図 15 万有引力 (逆 2 乗則) 下のロケットの運動

## 9.2 放物運動

### 9.2.1 速度に比例する抵抗がある場合

地表で斜めに投げ上げられた物体の運動は (風が横から吹いたりしなければ) 平面内で運動します. 鉛直上向きを  $y$  軸, 水平方向を  $x$  軸とすると, 空気の抵抗を考慮して, 運動方程式は一般に,

$$\frac{dx}{dt} = v_x, \quad m \frac{dv_x}{dt} = -b_1 v_x - b_2 |v| v_x \\ \frac{dy}{dt} = v_y, \quad m \frac{dv_y}{dt} = -b_1 v_y - b_2 |v| v_y - g$$

と書き表わされます. ここに  $b_1, b_2$  は, それぞれ速度に比例する空気抵抗の係数, 速度の自乗に比例する空気抵抗の係数です. 実測によると, 断面積がある程度大きな物体に対して  $b_1|v| \ll b_2|v|^2$  であることがわかっていますから,  $b_2$  のみを考慮して

$$\frac{dv_x}{dt} = -\frac{b_2}{m} v_x \sqrt{v_x^2 + v_y^2} = F(v_x, v_y)$$

$$\frac{dv_y}{dt} = -\frac{b_2}{m} v_y \sqrt{v_x^2 + v_y^2} - g = G(v_x, v_y)$$

を数値計算してみましょう.

**例題 3** 地上から初速  $V_0$  で投げ放たれた物体の運動を, 速度の 2 乗に比例する空気抵抗を考慮して図示するスクリプトを組みなさい. また, 放たれた際の傾角をパラメータにして軌跡がどう変化するか判るように工夫なさい.

[解] 傾角を 15 度ずつ大きくしていきながら軌跡を重ねて表示するスクリプトの例を parab.m に, またその結果を図 16 に示します. 初速  $v_0$ , 抵抗の比例定数  $b_2$  をタイトルに含ませています.

リスト 11 parab.m

```
1: function dx = parab(x,t)
2:   global M B2 G;
3:   dx(1) = x(2);
4:   dx(3) = x(4);
5:   dx(2) = - B2/M*x(2)*sqrt(x(2)^2+x(4)^2);
6:   dx(4) = - B2/M*x(4)*sqrt(x(2)^2+x(4)^2) - G;
7: endfunction
8:
9: function ret=torad(angle)
10:  ret = pi*angle/180;
11: endfunction
12:
13:
14: global M B2 G;
15: M=1; B2=0.15; G=9.8;
16: V0=10;
17: gset yrange [0:];
18: axis([0, 6])
19: xlabel("x [m]")
20: ylabel("y [m]")
21: Title=sprintf("%Times=28 v_0 = %.1f, b_2 = %.2f", \
22: V0, B2);
23: title(Title);
24: text(0.05,0.95,"01ks000","Units","screen", \
25: "FontName", "Courier", "FontSize", 28);
26: hold on
27: for k = 1:5
28:   deg=15*k;
29:   th=torad(deg);
30:   Vx0=V0*cos(th);
31:   Vy0=V0*sin(th);
32:   X0=[0 Vx0 0 Vy0]';
33:   [t,x]=rk4fixed("parab", [0 2], X0, 100, 1);
34:   key = sprintf("-@;angle=%.1f;",k,deg);
35:   plot(x(:,1), x(:,3), key);
36: endfor
37: pause
38: % for creating PostScript figure
39: gset term postscript enhanced eps color \
40: "Helvetica" 20
41: gset out "parab.eps"
42: replot
```

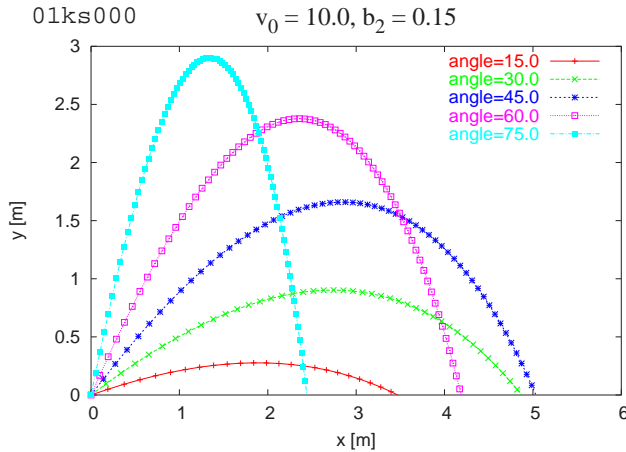


図 16 速度の自乗に比例する空気抵抗がある場合の放物運動

9.2.2 マグナス効果：球の回転

ボールに回転をかけながら投げると曲がります。これは回転によって空気の流れが変化し、速度ベクトル  $V$  と直角方向に力が生ずるためです。回転ベクトル（大きさを回転数、向きを回転の軸） $\omega$  とすると、生ずる力は、図17のように回転ベクトルと速度ベクトルの外積  $\omega \times V$  に比例することが A.Magnus(1853) の研究で示されました。したがって、この横向きの力の発生はマグナス効果と呼ばれます。

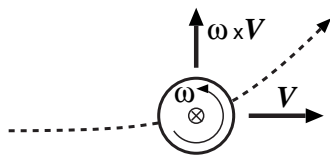


図 17 マグナス効果：ボールの回転によって生ずる横向きの力

水平方向に  $x$  軸，垂直方向に  $y$  軸， $xyz$  を右手系にとって，回転ベクトルが  $z$  軸を向いていたとします。すると，回転ベクトルは  $\omega = (0, 0, \omega)$ ，速度ベクトルは  $xy$  平面内ですから  $v = (v_x, v_y, 0)$  と表されます。これらを代入して，マグナス効果によって生ずる力は，比例定数を  $S_0$  とおいて，

$$S = S_0 \omega \times v = S_0(-\omega v_y, \omega v_x, 0)$$

となります。したがって，空気の抵抗と合わせて以下の運動方程式を得ます。

$$m \frac{v_x}{dt} = -S_0 \omega v_y - b_2 |v| v_x$$

$$m \frac{v_y}{dt} = S_0 \omega v_x - b_2 |v| v_y - g$$

例題 4 マグナス効果を取り入れて，回転させながら投

目次へ

げた軽いボール（卓球の球を想像してください）の運動を数値シミュレートしなさい。

[解] 前問の parab.m にちょっと書き加えれば済みます。スクリプト例 magnus.m と，その結果を図18 に示します。

リスト12 magnus.m

```

1: function dx = parab(x,t)
2:   global G M B2 SW;
3:   dx(1) = x(2);
4:   dx(3) = x(4);
5:   dx(2) = -SW*x(4)-B2/M*x(2)*sqrt(x(2)^2+x(4)^2);
6:   dx(4) = SW*x(2)-B2/M*x(4)*sqrt(x(2)^2+x(4)^2)-G;
7: endfunction
8:
9: function ret=torad(angle)
10:  ret = pi*angle/180;
11: endfunction
12:
13: global G M B2 SW;
14: G=9.8; M=1; B2=0.15; V0=10;
15: axis([0 10 0 5], "equal");
16: Title=sprintf("{}/Times=28 v_0 = %.1f, \
17: b_2 = %.2f}",V0,B2);
18: title(Title);
19: text(0.05,0.95,"01ks000","Units","screen",\
20:      "FontName", "Courier", "FontSize", 28);
21: deg=30; th=torad(deg);
22: Vx0=V0*cos(th); Vy0=V0*sin(th);
23: X0=[0 Vx0 0 Vy0]';
24: hold on
25:
26: for k = 1:3
27:   SW = 1.5*k;
28:   [t,x]=rk4fixed("parab", [0 5], X0, 100, 1);
29:   key = sprintf("-@;Magnus=%.1f;",SW);
30:   plot(x(:,1), x(:,3), key);
31: endfor
32: pause
33: % for creating PostScript figure
34: gset term postscript enhanced eps color \
35:      "Helvetica" 20
36: gset out "magnus.eps"
37: replot
    
```

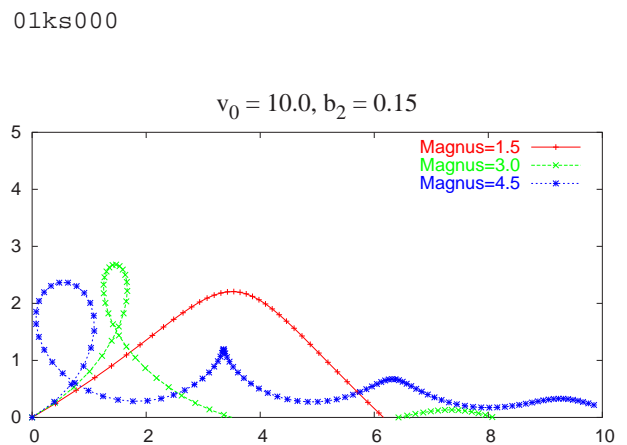


図 18 スピンをかけながら投げ上げた軽い珠の軌跡：マグナス効果

**問題18** (川を渡る船) 船が川岸の一点 P から  $l$  離れた真正面の対岸の一点 O に進むとき, 船の進路を求めなさい. ただし, 川は一定速度  $v_R$  で流れ, 船の推進速度は  $v_B$  で船は常に O 点に向かっていくものとします. 船の運動を数値解析し, その軌跡を描くスクリプトを考えなさい. また, 解析解と比較しなさい.

☞ 点 O を原点にして OP の向きに  $x$  軸, 川の流れの向きに  $y$  軸をとると, 運動方程式は,

$$\frac{dy}{dx} = \frac{y - \beta\sqrt{x^2 + y^2}}{x} \quad \left( \beta = \frac{v_R}{v_B} \right)$$

となり, 解析解

$$y(x) = \frac{l}{2} \left\{ \left( \frac{x}{l} \right)^{1-\beta} - \left( \frac{x}{l} \right)^{1+\beta} \right\}$$

を得ます.  $l = 1$  として描いた例を, 図 19 に示します.

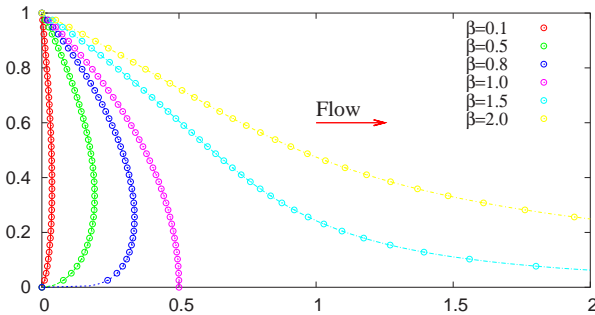


図 19 川を渡る船の軌跡

## 10 (線形) 振動

### 10.1 単振り子

天井から糸で吊されたおもりの運動を考えましょう. 厳密な微分方程式は, 鉛直線からの振れ角を  $\theta$  として

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{g}{L} \sin \theta \quad (4)$$

であることは周知のことと思います. ところで, この微分方程式の解は初等関数で表すことができません. 形式的には, 両辺に  $d\theta/dt$  をかけて  $t$  で積分することで,

$$\begin{aligned} \int \frac{d\theta}{dt} \frac{d^2\theta}{dt^2} dt &= -\frac{g}{L} \int \sin \theta \frac{d\theta}{dt} dt = -\frac{g}{L} \int \sin \theta d\theta \\ \frac{1}{2} \left( \frac{d\theta}{dt} \right)^2 &= \frac{g}{L} (\cos \theta - \cos \Theta) \\ \frac{dt}{d\theta} &= \pm \sqrt{\frac{L}{2g} \frac{1}{\cos \theta - \cos \Theta}} \end{aligned}$$

と変数分離形に帰着されますから, 解けます. 例えば,  $t = 0$  のとき初期静止位置  $\theta = \theta(0)$  から振動を開始したとすると, 半周期  $0 < t < T/2$  ( $T$ : 周期) においては

$$t(\theta) = -\sqrt{\frac{L}{2g}} \int_{\theta}^{\Theta} \frac{d\theta}{\sqrt{\cos \theta - \cos \Theta}}$$

と楕円積分で表せます. しかし,  $\theta(t)$  あるいは任意の時刻の値は結局この積分値を数値的に求めるしかありません. というわけで, 数値シミュレーションには格好の題材です. なお, 周期  $T$  は, 対称性を考えて, 定積分

$$T = 4 \times \left( -\sqrt{\frac{L}{2g}} \int_{\theta}^{\Theta} \frac{d\theta}{\sqrt{\cos \theta - \cos \Theta}} \right)$$

で与えられます.

☞ もう少し解析を進めると,  $\theta$  を  $t$  の関数として, 形式的には

$$\theta(t) = 2 \arcsin \left( \sin \frac{\Theta}{2} \operatorname{sn} \left( \sqrt{\frac{g}{L}} t \right) \right) \quad (5)$$

と表現できます. ここに,  $\operatorname{sn}(u)$  は Jacobi の楕円関数で, 楕円積分の逆関数として,

$$\begin{aligned} u &= \int_0^{\phi} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \theta}} \\ \operatorname{sn}(u) &= \sin \phi, \quad \operatorname{cn}(u) = \cos \phi, \quad \operatorname{dn}(u) = \sqrt{1 - k^2 \sin^2 \phi} \end{aligned}$$

と定義されています. もっとも, 楕円関数は初等関数で表すことが出来ませんから, 結局は数値積分(あるいは級数展開)で値を求めることになります. ところが, 標準関数として用意されていることが多く, その場合にはかなり手間が省けることになります.

微小振幅の場合: 単振動 振幅  $\Theta$  が小さい場合には, 振れ角  $\theta (\leq \Theta)$  も十分小さいので  $\sin \theta = \theta$  とおいて,

$$\frac{d^2\theta}{dt^2} = -\frac{g}{L} \theta \quad (6)$$

の単振動の微分方程式を得ます. これは厳密に解けて, 周期  $2\pi\sqrt{L/g}$  の単振動となることも常識です.

**例題 5** 単振り子の厳密な微分方程式 (4) を数値解析して  $\theta(t)$  を図を描きなさい. また, 解析解の数値積分も計算し, 同じ図面に重ねて表示しなさい. なお, 初期振幅  $\Theta = \theta(0)$  をキー入力できるように工夫すること.

[解] pendulum.m にスクリプトを, また  $\Theta = 0.1, 2.9$  とした場合を図 20 に示します. 微小振幅では周期が 1 秒となるように長さ  $L$  を設定してあります. 大振幅では周期が長くなり, 正弦波形からずれることを確認してください.

## リスト13 pendulum.m

```

1: function dx=pend(x,t)
2:   global G L
3:   dx(1)=x(2);
4:   dx(2)=-G/L*sin(x(1));
5: endfunction
6:
7: function ret=f(x)
8:   global TH0
9:   if x != TH0
10:    ret=1./sqrt(cos(x)-cos(TH0));
11:   else
12:    ret=0;
13:   endif
14: endfunction
15:
16: global G L TH0
17: G=9.8; L=G/(2*pi)^2;
18: TH0=input("TH0 = ");
19: tha=linspace(-TH0,TH0,20);
20: for k=1:20
21:   ta(k)=-sqrt(L/(2*G))*quad("f", TH0, tha(k));
22: endfor
23: t=linspace(0,2,200);
24: th=lsode("pend", [TH0; 0], t);
25:
26: xlabel("{/Helvetica-Oblique t} [s]");
27: ylabel("{/Symbol-Oblique q} [rad]");
28: text(0.05,0.95,"01ks000","Units","screen",\
29:      "FontName", "Courier", "FontSize", 28);
30: title("Pendulum: Strict");
31: gset pointsize 1.5
32: gset format y "%.2f"
33: plot(t, th(:,1), "-;o.d.e;");
34: hold on
35: plot(ta, tha, "@26;Integration;");
36: pause
37: gset term postscript enhanced color eps \
38:      "Helvetica" 20
39: filename=sprintf("out \\"pendulum-%.3f.eps\"", TH0);
40: gset(filename);
41: replot

```

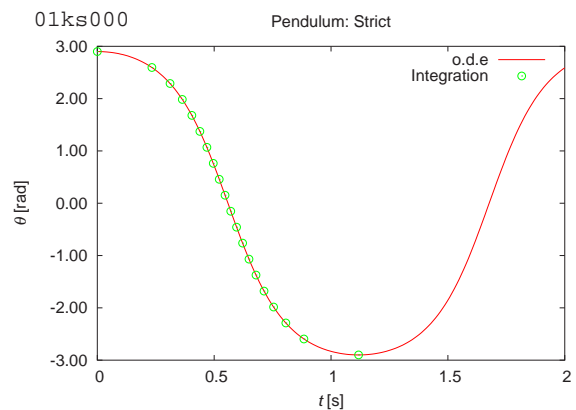
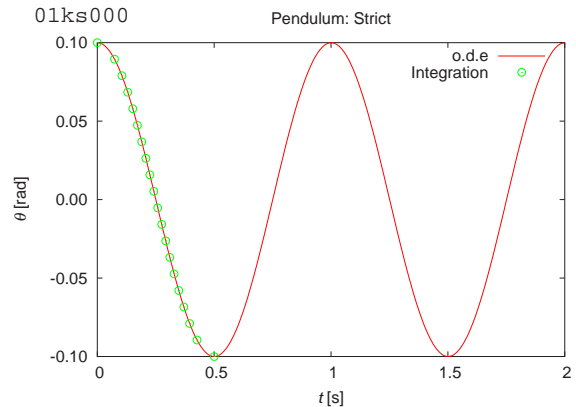


図 20 厳密な単振り子の解：微小振幅  $\theta = 0.1$  と大振幅  $\theta = 2.9$  の場合の相違，大振幅では周期が 1 秒よりも相当に長いし，正弦波形でなくなる。

🚧 (剛体振り子) 糸で吊した振り子では，初期振幅  $\theta$  が  $\pi/2$  を越えることはできません．張力が負になりたってしまうからです．剛体振り子は同じ方程式に従いますが，振幅や速度に制限がありません．

**問題19** 単振り子の厳密な微分方程式 (4) を数値解析解と形式的な解析解 (5) を同じ図面に重ねて表示するスクリプトを考えなさい．

👉 Octave で Jacobi の楕円関数を得るには  $m = k^2$  とおいて，以下のように呼び出します．

```
[sn, cn, dn] = ellipj(u, m)
```

**問題20** 単振り子の厳密な微分方程式 (4) と近似微分方程式 (6) の数値解を比較するスクリプトを考えなさい．

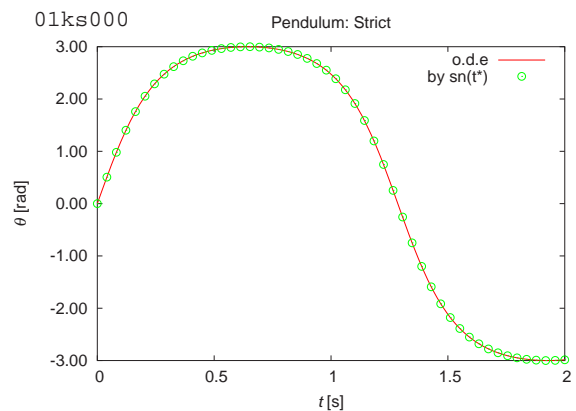


図 21 厳密な単振り子の解：Jacobi の楕円関数で表した解析解との比較 ( $\theta = 3.0$ )



### 10.1.1 位相図

平面運動の状態は，横軸に  $x$ ，縦軸に  $v$  を取って描くと整理しやすくなります．そのような図は相平面と呼ばれます．

**問題21** (単振り子の相平面図) (剛体)単振り子の運動について，初期速度や初期振幅をパラメータにして，相平面図を描いてみなさい．

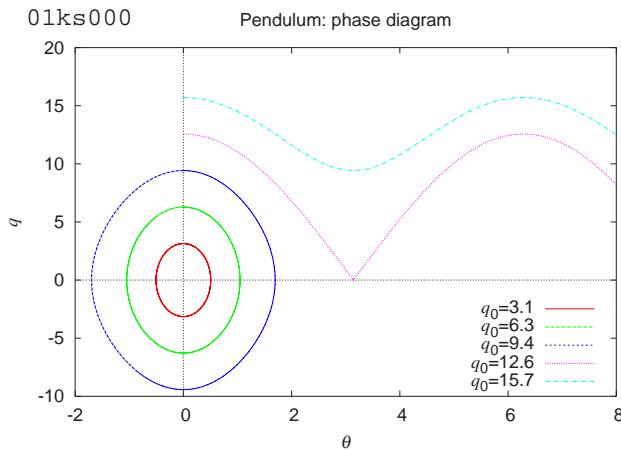


図 22 (剛体)単振り子の位相図：初期位置を  $\theta = 0$  として，初速度  $q_0 = q(0)$  ( $q = d\theta/dt$ ) をパラメータに描いた．

## 11 非線形振動とカオス

非線形振動方程式は関数解析が困難であることから，数値解析の格好の活躍の場です．いわゆる自励振動や，周期的な外力に対するカオス解の出現は，数値解析して描かれた位相図やポアンカレ図（系に固有な一定の周期で位相空間に点を打って描かれる図）により直観的な理解が可能となります．

### 11.0.2 減衰振動

粘性抵抗力を  $-D\frac{dx}{dt}$ ，復元力を  $-kx$  と，線形にモデル化し，さらに外力  $f\cos\omega t$  が作用している振動子の微分方程式は

$$\frac{d^2x}{dt^2} + D\frac{dx}{dt} + kx = f\cos\omega t \quad (D > 0) \quad (7)$$

と表わされ， $D^2 - 4k < 0$  の場合には減衰振動を示し，解析解は以下のようになります．

$$x(t) = Ae^{-\frac{D}{2}t} \cos\left(\sqrt{k - \frac{D^2}{4}}t + \theta\right)$$

$$+ \frac{f}{\sqrt{(k - \omega^2)^2 + (D\omega)^2}} \cos(\omega t + \phi)$$

$$\left[ \phi = -\arctan \frac{D\omega}{k - \omega^2} \right]$$

ここに， $A, \theta$  は初期条件から決定される任意定数です．振幅の時間変化  $x(t)$  は，図 23 に示されるように，固有振動が残っている初期の過渡状態から外力の振動数と同じ振動数を持つ定常状態に推移していきます．

解析解と数値解の振幅  $x(t)$  を同時に描くスクリプトの例を `dumpx.m` に示します． $D, k, f$  の値を PS ファイル名にも含ませるように工夫しています (38-40 行)．実行時には  $D =$  と促してきますから，値をキー入力してください．

リスト 14 `dumpx.m`

```

1: function dx = dump(x,t)
2:   global D K F W
3:   dx(1) = x(2);
4:   dx(2) = -D*x(2)-K*x(1)+F*cos(W*t);
5: endfunction
6:
7: global D K F W
8: K=1.0; W=pi/2; x0=1.0; dx0=0.5;
9: T=80; N=T/0.1+1;
10: D=input("D = ");
11: F=input("F = ");
12:
13: KDW=(K-W^2)^2+(D*W)^2;
14: AC=x0-F*(K-W^2)/KDW;
15: AS=-(dx0+D/2*AC-F*D*W^2/KDW)/sqrt(K-D^2/4);
16: TH=atan(AS/AC);
17: A=AC/cos(TH);
18: PH=-atan2(D*W,K-W^2);
19: t=linspace(0,T,N);
20: X0=[x0; dx0];
21: ax = A*exp(-D/2*t).*cos(sqrt(K-D^2/4)*t+TH) \
22:     + F*cos(W*t+PH)/sqrt(KDW);
23:
24: xlabel("t");
25: ylabel("x(t)");
26: Title=sprintf("#{Times=28 D=%.1f, k=%.1f, \
27: f=%.1f, }{/Symbol=28 w=p/2}", D, K, F);
28: title(Title)
29: text(0.05,0.95, "#{Courie=28 01KS000}", \
30:      "Units", "screen")
31: x=lsode("dump", X0, t);
32: plot(t, x(:,1), "@16;Numerical;")
33: hold on
34: plot(t, ax, "--;Analytical;")
35: pause
36: gset term postscript enhanced color eps \
37:      "Helvetica" 20
38: Fname=sprintf("out \dumpx-%.1f-%.1f-%.1f.eps", \
39:              D, K, F);
40: gset(Fname)
41: replot

```

**例題 6** 自由減衰振動の常微分方程式 (7) の数値解を位相図に描くスクリプトを考えなさい．その際，`val=input("message")` 関数を用いて，外力の大きさ  $f$  と初期条件  $x(0)$  の値を実行時に入力できるようにしなさい．

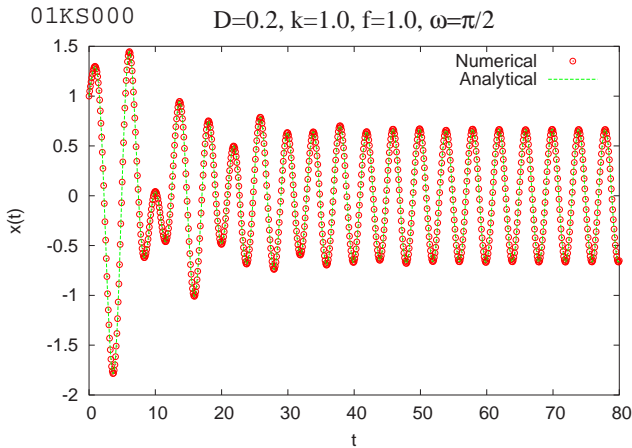


図 23 自由減衰振動子の解析解と数値解の比較：  
 $D = 0.2, k = 1.0, f = 1.0, \omega = \pi/2$  の場合。

[解] dumpx.m を参考にすれば、比較的簡単に作成できるでしょう。dump.m にスクリプトの例を示します。ここでも  $D, k, f$  の値を PS ファイル名にも含ませるように工夫しています (32-34 行) し、実行時には  $x(0) =$  と促してきますから、値をキー入力してください。

アトラクタ では、dump.m を用いて、相平面上の運動について考えてみましょう。まず、外力がない場合 ( $f = 0$ ) には、初期状態が相平面のどこにあっても、十分時間が経つと軌道は原点に漸近します。 $x(0)$  の入力値を変えて確かめてください。このような振る舞いから、この場合の原点はポイントアトラクタであるといわれます (図 24)。

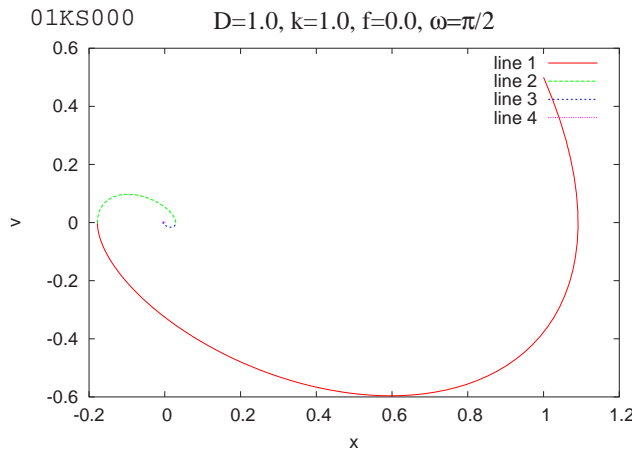


図 24 ポイントアトラクタ：全ての軌道は原点に向かう。  
 $D = 1.0, k = 1.0$  では  $D^2 < 4k$  となり螺旋状に漸近する。

続いて、周期的外力を作用させてみましょう。この場合には、外力の周期に同期した定常解 (閉軌道) へと漸近します。もちろん、初期条件に依りません ( $x(0)$  を変えて確かめてください)。この意味で、この閉軌道は周期的アトラクタと呼ばれます (図 25)。

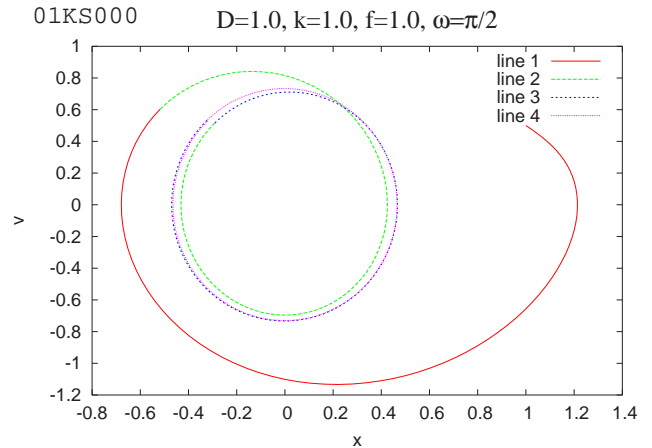


図 25 自由減衰振動子にみられる周期的アトラクタ (楕円)：  
 $D = 1.0, k = 1.0, f = 1.0$  の場合。

リスト15 dump.m

```

1: function dx = dump(x,t)
2:   global D K F W
3:   dx(1) = x(2);
4:   dx(2) = -D*x(2)-K*x(1)+F*cos(W*t);
5: endfunction
6:
7: global D K F W
8: D=1.0; K=1.0; W=pi/2;
9: T=4; N=T/0.05+1;
10: x0=input("x(0) = ");
11: F=input("F = ");
12:
13: X0=[x0; 0.5];
14: t=linspace(0,T,N);
15:
16: xlabel("x");
17: ylabel("v");
18: Title=sprintf("{/Times=28 D=%.1f, k=%.1f, \
19: f=%.1f, }{/Symbol=28 w=p/2}", D, K, F);
20: title(Title)
21: text(0.05,0.95, "{/Courier=28 01KS000}", \
22:       "Units", "screen")
23: for k=0:3
24:   hold on
25:   x=lsode("dump", X0, t);
26:   plot(x(:,1),x(:,2))
27:   X0=[x(N,1); x(N,2)];
28: endfor
29: pause
30: gset term postscript enhanced color eps \
31:       "Helvetica" 20
32: Fname=sprintf("out \"dump-%.1f-%.1f-%.1f.eps\"", \
33:             D, K, F);
34: gset(Fname)
35: replot
    
```

**問題22** 相平面ではなく振幅の時間変化  $x(t)$  を描くようにスクリプトを変えなさい。また、抵抗係数、外力を 0.01 ~ 1.0 の範囲にとって描いてみなさい。

## 11.0.3 Duffin 方程式

$x^3$  に比例する非線形項を含む duffin 方程式をシミュレートします。もともとは

$$\frac{d^2x}{dt^2} + kx + \beta x^3 = f \cos \omega t$$

のように復元力として線形項  $-kx$  に (微小) 非線形項  $-\beta x^3$  が加わった形の研究でした。この場合には,  $\beta$  の符号によって解の挙動が変化しますが, カオスが現れることはありません。それに対して, 減衰振動系に非線形項を導入した

$$\frac{d^2x}{dt^2} + D \frac{dx}{dt} + \beta x^3 = f \cos \omega t$$

の形では, ある条件下で図26の様にカオスが出現します。この図は, 相平面上の点のある間隔 (一般には外力の周期の整数倍) で点描したものでポアンカレ図とも呼ばれます。周期的な解ならば点が数個現れるだけですが, カオスになると複雑な模様を描かれるようになります。

ポアンカレ図を描くスクリプト例を duffin.m に示します。外力の大きさ  $f$  を可変としています。  $6.5 < f < 7.9$  でカオスとなるようです。ただし, 解析にはかなり時間がかかります。

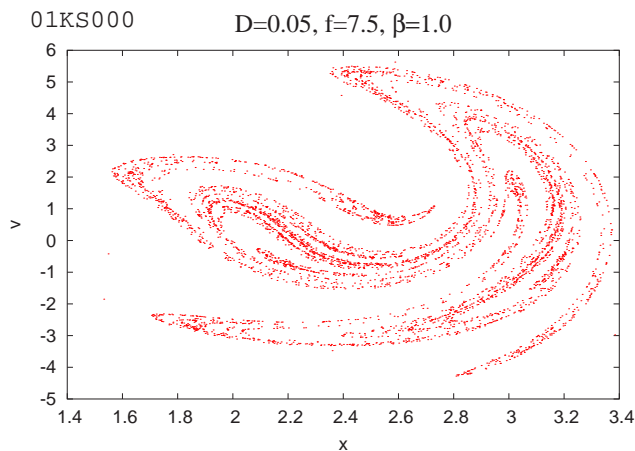


図 26 Duffin 方程式の解:  $D = 0.05$ ,  $\beta = 1.0$ ,  $f = 7.5$ ,  $x(0) = 0.0$ ,  $\omega = 1.0$  の場合にポアンカレ図に現れるストレンジ (カオス) アトラクター。

## リスト16 duffin.m

```

1: function dx = duffin(x,t)
2:   global D B F
3:   dx(1) = x(2);
4:   dx(2) = -D*x(2)-B*x(1)^3+F*cos(t);
5: endfunction
6:
7: global D B F
8: D=0.05; B=1.0; x0=0.0; dx0=0.0;
9: T=2*pi; N=T/0.01+1;
10: F=input("F = ");
11:
12: t=linspace(0,T,N);
13: X0=[x0; dx0];
14:
15: xlabel("x");
16: ylabel("v");
17: Title=sprintf("{/Times=28 D=%.2f, f=%.1f, \
18: {/Symbol=28 b=%.1f}", D, F, B);
19: title(Title)
20: text(0.05,0.95, "{/Courier=28 01KS000}", \
21:      "Units","screen")
22: for k=1:5000
23:   if rem(k,100)==0 k endif
24:   x=lsode("duffin", X0, t);
25:   X0=[x(N,1); x(N,2)];
26:   xv(k,1)=x(N,1); xv(k,2)=x(N,2);
27: endfor
28: plot(xv(:,1), xv(:,2), ".1;");
29: pause
30: gset term postscript enhanced color eps \
31:      "Helvetica" 20
32: Fname=sprintf("out \"duffin-%.1f-%.1f-%.1f.eps\"", \
33:      D, B, F);
34: gset (Fname)
35: replot

```

## 11.1 Lorenz 方程式

**問題23** カオス解を示すものとしてあまりにも有名な Lorenz の微分方程式

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= -\sigma(x-y) \\ \frac{dy}{dt} &= Rx - y - xz \\ \frac{dz}{dt} &= xy - bz \end{aligned}$$

を数値解析しましょう。

- (i) Lorenz が初めてカオスの振舞いの解を発見した, パラメータの組み合わせ  $R = 28$ ,  $\sigma = 10$ ,  $b = 8/3$  の場合について, 3次元プロットを描きなさい。
- (ii) パラメータ  $R$  を  $1 \leq R \leq 30$  で変化させて様子が変わるか調べてみなさい。分類の方法については“カオス”に関する書籍を参考にしなさい<sup>1</sup>。

<sup>1</sup>例えば J.M.T. Thompson & H.B. Stewart 著, 橋口 住久 訳:『非線形力学とカオス』(オーム社, 1988)



リスト17 lorenz.m

```

1: function dx = lorenz(x,t)
2:   global s R b;
3:   dx(1) = -s*(x(1)-x(2));
4:   dx(2) = R*x(1)-x(2)-x(1)*x(3);
5:   dx(3) = x(1)*x(2)-b*x(3);
6: endfunction
7:
8: global s R b
9: s=10; R=28; b=8/3;
10: t=linspace(0,30,3000);
11: x=lsode("lorenz", [0; 0.03; 0], t);
12:
13: Title=sprintf("/Times=28 \
14: {/Symbol s}=%.1f, R=%.1f, b=8/3}", s, R);
15: title(Title)
16: text(0.50,0.05,"01ks000","Units","screen",\
17:      "FontName", "Courier", "FontSize", 28);
18: gset parametric
19: gset border 5+16
20: gset xtics 10; gset ytics 10; gset ztics 10
21: gset size 0.7,1.0; gset ticslevel 0
22: gsplot x title "";
23: view(30,30);
24: pause
25:
26: gset term postscript enhanced color eps \
27:      "Helvetica" 20
28: gset out "lorenz.eps"
29: replot
    
```

$\sigma=10.0, R=28.0, b=8/3$

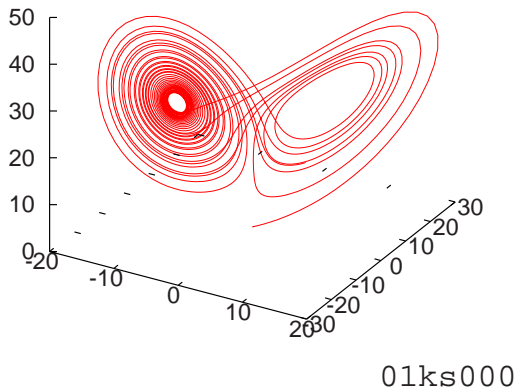


図 27 Lorenz カオスアトラクタ :  $\sigma = 10, R = 28, b = 8/3$

**問題24** (Rössler 方程式) 独の医学者 Otto Rössler の発見した, 次の微分方程式によるカオスアトラクタを描いてみなさい.

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= -y - z \\ \frac{dy}{dt} &= x + ay \end{aligned}$$

[目次へ](#)

$$\frac{dz}{dt} = b + xz - cz$$

☞  $a = 0.2, b = 0.2, c = 5.6, (x_0, y_0, z_0) = (1, 0, 0)$  の場合を図 28 に示します.

$a=0.2, b=0.2, c=5.6$

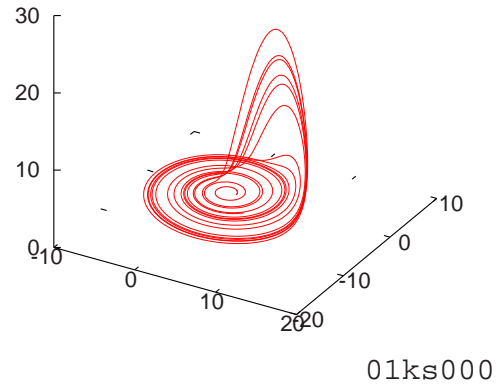


図 28 Rössler カオスアトラクタ :  $a = 0.2, b = 0.2, c = 5.6$

**問題25** (Silnikov 方程式) Silnikov の微分方程式によるカオスアトラクタを描いてみなさい.

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= y \\ \frac{dy}{dt} &= z \\ \frac{dz}{dt} &= -az - y + bx(1 - cx - dx^2) \end{aligned}$$

☞ パラメータ  $a = 0.4, b = 0.65, c = 0.0, d = 1.0$ , 初期値  $(x_0, y_0, z_0) = (0.1, 0.1, 0.2)$  とした場合を図 29 に示します.

$a=0.4, b=0.7, c=0.0, d=1.0$

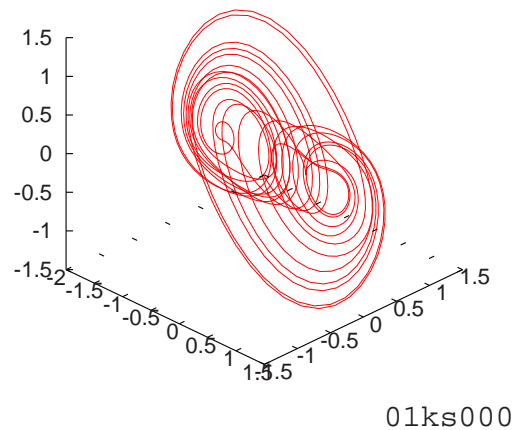


図 29 Silnikov カオスアトラクタ : 初期値には敏感であり, この図は  $(x_0, y_0, z_0) = (0.1, 0.1, 0.2)$  としている.

## 11.2 van der Pol 方程式

自励振動を記述する微分方程式の1つとして有名なファンデルポル方程式

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \mu(1-x^2)\frac{dx}{dt} + x = 0 \quad (\mu > 0) \quad (8)$$

を数値解析してみましょう。この微分方程式の解の振る舞いの特徴付けているのは、第2項(減衰項)です。振幅  $x$  が小さく  $x^2 < 1$  の場合には、係数が負となり、すなわち“負の減衰”となって、振幅は増大します。逆に  $x^2 > 1$  では、係数が正となり減衰します。このような系では、初期状態に係わらず、一定の周期的な運動に近付くことが期待されます。その周期運動は相空間でリミットサイクル(極限閉軌道)と呼ばれる1つの閉曲線を描きます。もちろん、これは周期的アトラクタと考えられます。

**例題7** 外力がない場合のファンデルポル方程式(8)の数値解析解を求めて位相図を示すスクリプトを考えなさい。

[解]  $\mu = 1.0$  とした場合のスクリプト例 vanderpol0.m と、その結果を図30に示します。

リスト18 vanderpol0.m

```

1: function dx = vanderpol(x,t)
2:   global MU
3:   dx(1)=x(2);
4:   dx(2)= MU*(1-x(1)^2)*x(2)-x(1);
5: endfunction
6:
7: global MU
8: MU=1.0;N=201;
9: X0=[0.0; 1.0];
10: t=linspace(0,10,N);
11:
12: xlabel("x");
13: ylabel("v");
14: Title=sprintf("{/Symbol=28 m=%.1f}", MU);
15: title(Title)
16: text(0.05,0.95, "{/Courier=28 01KS000}", \
17:      "Units","screen")
18: for k=0:3
19:   hold on
20:   x=lsode("vanderpol", X0,t);
21:   plot(x(:,1),x(:,2))
22:   X0=[x(N,1); x(N,2)];
23: endfor
24: pause
25: gset term postscript enhanced color eps \
26:      "Helvetica" 20
27: gset out "vanderpol0.eps"
28: replot

```

### 11.2.1 外力による励振

外力を与える形式についてシミュレートしましょう。

$$\frac{d^2x}{dt^2} - \mu(1-x^2)\frac{dx}{dt} + kx = f \cos \omega t \quad (\mu > 0)$$

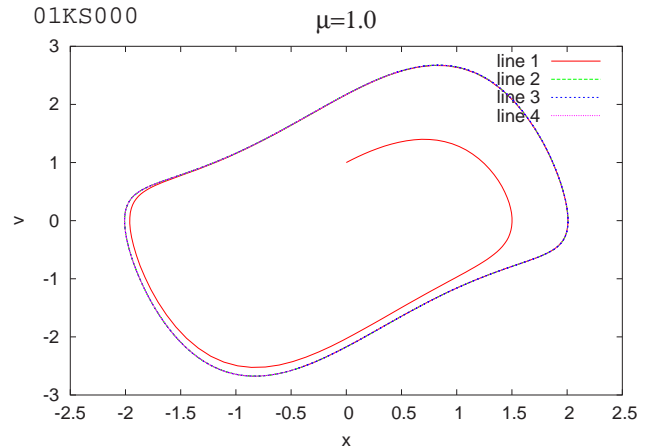


図30 Van der pol 方程式の数値解：楕円(調和振動)からずれたリミットサイクルがみられる。

**問題26**  $\mu = 1.0, k = 1.0, f = 2.0, \omega = 2\pi$  初期条件  $x(0) = 0, \dot{x}(0) = -3.0$  の場合の振幅  $x(t)$  を示すスクリプトを考えなさい。

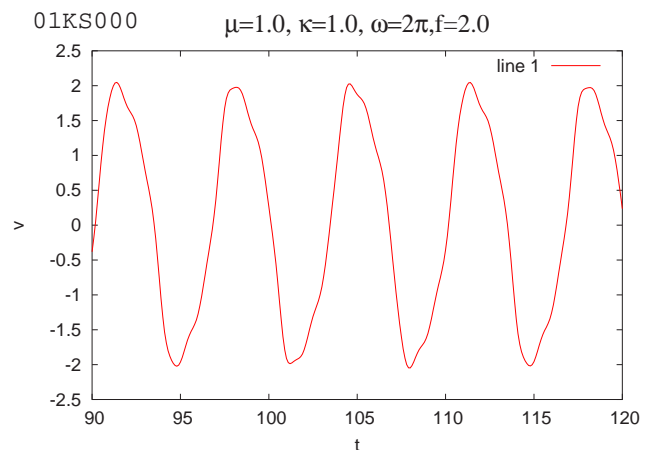


図31 Van der pol 方程式の数値解： $\mu = 1.0, k = 1.0, f = 2.0, \omega = 2\pi$  初期条件  $x(0) = 0.0, \dot{x}(0) = -3.0$  の場合の振幅。

**問題27**  $\mu < 0$  とするとどんな事態になるか調べてみなさい。

## 11.3 クーロン散乱

クーロン力による荷電粒子の散乱の実験として、Rutherford が行った金の原子核(原子核モデル)による  $\alpha$  粒子の散乱はあまりにも有名です。 $^{226}_{88}\text{Ra}$  の  $\alpha$  崩壊で生成されたエネルギー 5.3 MeV の  $\alpha$  粒子に作用するクーロン力は、金の原子核を極座標の原点として、

$$f = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_\alpha Z_{\text{Au}} e^2}{r^2}$$

と表されます．ここに， $\alpha$  粒子と金の原子核の荷数をそれぞれ  $Z_\alpha$ ,  $Z_{Au}$  とおいています． $f$  の  $x$ ,  $y$  成分はそれぞれ

$$f_x = f \cos \theta = f \frac{x}{r}, \quad f_y = f \sin \theta = f \frac{y}{r}$$

となりますから，運動方程式

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{Z_\alpha Z_{Au} e^2}{4\pi\epsilon_0 m_\alpha} \frac{x}{r^3}, \quad \frac{d^2y}{dt^2} = \frac{Z_\alpha Z_{Au} e^2}{4\pi\epsilon_0 m_\alpha} \frac{y}{r^3}$$

を得ます．この連立微分方程式を解けば良いのですが，MKSA 単位系で数値を扱うと，計算途中で倍精度実数の範囲を逸脱してしまう恐れがありますから，単位系を次のように取ることとします．質量  $\text{MeV}/c^2$ ，長さ  $\text{fm} = 10^{-15} \text{ m}$ ，速度  $c = 3.0 \times 10^8 \text{ m/s}$ ．すると，微細構造定数  $\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}$ ， $\hbar c \simeq 200 \text{ MeV fm}$ ， $Z_\alpha = 2$ ， $Z_{Au} = 79$  より

$$\frac{d^2x}{dt^2} = 0.0614 \frac{x}{r^3}, \quad \frac{d^2y}{dt^2} = 0.0614 \frac{y}{r^3}$$

と書き換えられます．運動エネルギー  $K = 5.3 \text{ MeV}$  の  $\alpha$  粒子の速度は  $v = \sqrt{K/m}$  より， $v_0 = 0.053 [c]$  と与えられます．

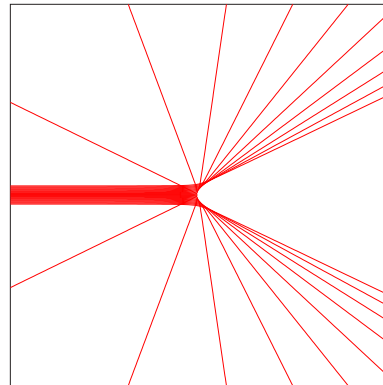
リスト19 rutherford.m

```

1: function hitkb()
2:   fprintf(stderr, " Hit any key for continue.\n");
3:   pause
4: endfunction
5:
6: function dx = ruther(x,t)
7:   r = sqrt(x(1)^2+x(3)^2);
8:   dx(1) = x(2);
9:   dx(2) = 0.0614*x(1)/r^3;
10:  dx(3) = x(4);
11:  dx(4) = 0.0614*x(3)/r^3;
12: endfunction
13:
14: V0=0.053;
15: axis([-2000, 2000, -2000, 2000], "equal", "off");
16: title("Rutherford Scattering of 5.3 MeV He");
17: text(0.75,0.05,"01ks000","Units","screen",\
18:      "FontName", "Courier", "FontSize", 28);
19: hold on
20:
21: for y0 = -95:10:95
22:   x0=-2000; vx0=V0; vy0=0;
23:   X0=[x0 vx0 y0 vy0]';
24:   [t,x]=rk4fixed("ruther", [0 100000], X0, 200, 1);
25:   plot(x(:,1), x(:,3), "-1;");
26: endfor
27: hitkb();
28:
29: axis([-400, 400, -400, 400], "equal", "off");
30: replot
31: hitkb();
32:
33: % for creating PostScript figure
34: gset term postscript enhanced eps color \
35:      "Helvetica" 20
36: gset out "rutherford-z.eps"
37: replot
38: axis([-2000, 2000, -2000, 2000], "equal", "off");
39: gset out "rutherford.eps"
40: replot

```

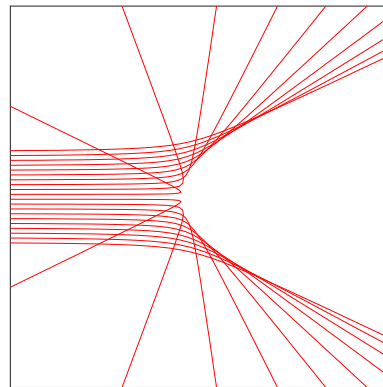
Rutherford Scattering of 5.3 MeV He



01ks000

図 32 Au による He の Rutherford 散乱

Rutherford Scattering of 5.3 MeV He



01ks000

図 33 Au による He の Rutherford 散乱：中心付近の拡大図

**問題28** 原子の中に正の点電荷（原子核）があるというモデルに対して、『原子の中に正電荷が一樣に分布している』という，もう一つの原子モデルを仮定（もちろん誤りです）したらどうなるか考えてみなさい．

☞  $\alpha$  粒子が受ける力は，原子の内部と外部で関数が異なり

$$f(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{0.0614}{R^3} \vec{r} & (r \leq R) \\ \frac{0.0614}{r^3} \vec{r} & (r > R) \end{cases}$$

と表されます．すなわち，原子内部での斥力が減少するため，大角散乱が起こらなくなります．これは実験事実と矛盾するので誤りと結論されます．

## 11.4 3次元運動

3次元では基本的に6つの変数  $x, y, z, v_x, v_y, v_z$  に対する連立微分方程式となります．が，単に数が増えただけ

で計算が複雑になることはありません．むしろ結果を 3 次元的に表示する工夫（鳥瞰図など）が必要です．

### 11.4.1 直交電磁界中の荷電粒子

直交する一様磁界  $\vec{B} = (0, 0, B_z)$  と一様電界  $\vec{E} = (0, E_y, 0)$  の中での荷電粒子の運動を数値シミュレートしましょう．もちろん考える力は，クーロン力とローレンツ力です．

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = q\vec{E} + q\vec{v} \times \vec{B}$$

クーロン力が位置に依らず一定なので，計算は非常に簡単です．結果を  $x-y$  平面の 2 次元プロットしてみると，どうもイメージが掴めません．実は，一様磁界の方向すなわち  $z$  軸の回りに円運動しながら， $x$  軸方向に回転の中心が移動するのです（ $y$  方向に電界があるからといって，その方向に移動するのではない点に注意してください）．このような運動はドリフト運動と呼ばれます．言葉で説明しなくとも，一目見てすぐにわかるように，立体的な図示をしてみましょう．

リスト20 emdrift.m

```

1: function dx = em(x,t)
2:   global q m Ey Bz
3:   dx(1) = x(2);
4:   dx(3) = x(4);
5:   dx(5) = x(6);
6:   dx(2) = q*x(4)*Bz/m;
7:   dx(4) = (q*Ey - q*x(2)*Bz)/m;
8:   dx(6) = 0;
9: endfunction
10:
11: global q m Ey Bz
12: m=1.0; q=1.0; Ey=1.5; Bz=3.0;
13:
14: t=linspace(0,20,201);
15: X0=[0, -1, 0, 0, 0, 0.5];
16: r=lsode("em", X0, t);
17: axis([-5 5 -5 5 0 10], "square");
18: xlabel("x");
19: ylabel("y");
20: Title=sprintf("{/Times=28 E_y=%.1f, B_z=%.1f}", \
21:   Ey, Bz);
22: title(Title);
23: text(0.05,0.95,"{/Courier=28 01ks000}", "Units", \
24:   "screen")
25:
26: rr=[r zeros(201,1)];
27: gset parametric
28: gset ticslevel 0
29: gset grid; gset nokey;
30: gplot rr using 1:3:5, rr using 1:3:7 ;
31: pause
32: % for creating PS figure
33: gset term postscript enhanced color eps \
34:   "Helvetica" 20
35: gset out "emdrift.eps"
36: replot

```

01ks000

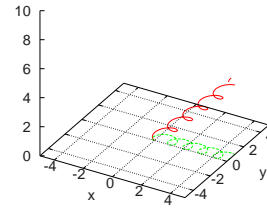
 $E_y=1.5, B_z=3.0$ 

図 34 直交電磁界中の荷電粒子のドリフト運動

## 12 力学：微分方程式以外の問題

### 12.1 逐次近似法

#### 12.1.1 3個の質点のつり下げ：計算物理学基礎編，p.193

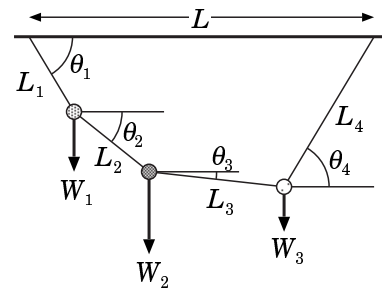


図 35 3個のおもりの吊り下げ

**例題 8** 図35に示したように，3個のおもりが，4本の糸でつながれ，天井からつり下げられている．この時の，4本の糸にかかる張力と糸が水平面となす角度  $T_i, \theta_i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) を求めなさい．

**[解]** 各々のおもりに対する力のつり合い条件を考えれば，満たすべきつり合いの式は以下のように簡単に求められます．

$$\sum_{i=1}^4 L_i \cos \theta_i - L = 0 \quad (9)$$

$$\sum_{i=1}^4 L_i \sin \theta_i = 0 \quad (10)$$

$$T_i \cos \theta_i - T_{i+1} \cos \theta_{i+1} = 0 \quad (i = 1, 2, 3) \quad (11)$$

$$T_i \sin \theta_i - T_{i+1} \sin \theta_{i+1} - W_i = 0 \quad (i = 1, 2, 3) \quad (12)$$

ところが，この 8 個の変数  $T_i, \theta_i$  に対する 8 個の連立方程式は非線形であるため，解析的に解くことはできません．数値計算を行って近似解を求める道を探ることとなります．

考え方は単純で，真の解に近づくように漸化式

$$x_{i+1} = x_i + \Delta x_i \quad (x_i = T_i, \theta_i) \quad (13)$$

を組み, 許容誤差  $\epsilon$  よりも  $\Delta x_i$  が小さくなったところで, 十分な近似が得られたとするものです. 初期値を適当 (本当は適切に) に与えなければなりません, ここでは簡単に思いつく, 3 個のおもりが一直線に並んだ場合にします.

途中, 行列計算が必要になるので, 数値計算ツール Octave にうってつけの問題です. 糸の長さ  $L_1 = L_2 = L_3 = 1$ ,  $L_4 = 3$ ,  $L =$  可変, おもりのおもさ  $W_1 = W_3 = 1.0$ ,  $W_2 =$  可変 としたスクリプト例を mass3.m に示します. ただし, このスクリプトは  $\theta_1, \theta_2, \theta_3 > 0$ ,  $\theta_4 < 0$  である場合のみに対応しています. 式 (12) と式 (11) の  $i = 3$  については  $x_i$  の時点の範囲で厳密に計算し (22 行), 式 (9) と式 (10) および式 (11) の  $i = 1, 2$  について, 0 からのズレを  $\Delta x_i$  と考えます (24, 25, 26, 27 行). 収束させるためには,  $\Delta x_i$  に適当な係数 (11, 12 行で定義) をかけて補正しなければなりません.

$L = 4$ ,  $W_2 = 2$  の場合の結果を図 36 に示します.

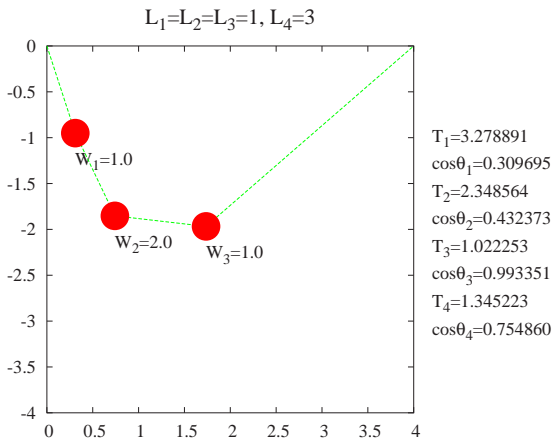


図 36 3 個のおもりの吊り下げ:  $L = 4$ ,  $W_2 = 2$

#### リスト 21 mass3.m

```

1: e=1e-8;
2: d1=1;ds=1;
3: L1=1;L2=1;L3=1;L4=3;L=4;
4: W1=1;W2=1;W3=1;
5: W2=input("W2 = ");
6: L=input("L = ");
7: c1=(L^2+(L1+L2+L3)^2-L4^2)/(2*L*(L1+L2+L3));
8: c2=c1;c3=c1;
9: c4=(L^2+L4^2-(L1+L2+L3)^2)/(2*L*L4);
10: W=[W1;W2;W3;0];
11: a=0.1;
12: b=0.01;
13: while( abs(d1)>e || abs(d2)>e || abs(ds)>e \
14:         || abs(dc)>e )
15:     s1=sqrt(1-c1^2);s2=sqrt(1-c2^2);
16:     s3=sqrt(1-c3^2);s4=-sqrt(1-c4^2);
17:     A=[s1,-s2,0,0;0,s2,-s3,0;0,0,s3,-s4;0,0,c3,-c4];
18:     X=A\W;
19:     t1=X(1);t2=X(2);t3=X(3);t4=X(4);
20:     d1 = t1*c1-t2*c2;
21:     d2 = t2*c2-t3*c3;
22:     dc = L1*c1+L2*c2+L3*c3+L4*c4-L;
23:     ds = L1*s1+L2*s2+L3*s3+L4*s4;
24:     z1 = c1 - a*d1/t1;
25:     z2 = c2 - a*d2/t2;
26:     z3 = c3 - b*dc/L4;
27:     s4 = s4 - b*ds/L4;
28:     z4 = sqrt(1-s4^2);
29:     c1=z1;c2=z2;c3=z3;c4=z4;
30:     if c3 >=1 c3=1; endif
31: endwhile
32: s1=sqrt(1-c1^2);s2=sqrt(1-c2^2);
33: s3=sqrt(1-c3^2);s4=-sqrt(1-c4^2);
34: r1=real([L1*c1, -L1*s1]);
35: r2=r1+real([L2*c2, -L2*s2]);
36: r3=r2+real([L3*c3, -L3*s3]);
37: r=[0 0; r1; r2; r3; L 0];
38: axis([0,4,-4,0], "equal");
39: gset pointsize 5
40: label1=sprintf("W_1=%.1f", W1);
41: label2=sprintf("W_2=%.1f", W2);
42: label3=sprintf("W_3=%.1f", W3);
43: lt1=sprintf("T_1=%.1f", t1);
44: lc1=sprintf("cos{/Symbol q}_1=%.1f", c1);
45: lt2=sprintf("T_2=%.1f", t2);
46: lc2=sprintf("cos{/Symbol q}_2=%.1f", c2);
47: lt3=sprintf("T_3=%.1f", t3);
48: lc3=sprintf("cos{/Symbol q}_3=%.1f", c3);
49: lt4=sprintf("T_4=%.1f", t4);
50: lc4=sprintf("cos{/Symbol q}_4=%.1f", c4);
51: title("{/Times=24 L_1=L_2=L_3=1, L_4=3}");
52: text(r1(1), r1(2)-0.3, label1);
53: text(r2(1), r2(2)-0.3, label2);
54: text(r3(1), r3(2)-0.3, label3);
55: text(4.2,-1.0, lt1);text(4.2,-1.3, lc1);
56: text(4.2,-1.6, lt2);text(4.2,-1.9, lc2);
57: text(4.2,-2.2, lt3);text(4.2,-2.5, lc3);
58: text(4.2,-2.8, lt4);text(4.2,-3.1, lc4);
59: hold on
60: plot(r(:,1), r(:,2), "-;");
61: plot(r(2:4,1), r(2:4,2), "@17;");
62: pause
63: gset term postscript enhanced color eps \
64:     "Times" 20
65: gset out "mass3.eps"
66: replot

```



## 13 化学反応

数理物理学 I で学習した, 化学反応のシミュレーションをいくつか取り扱ってみましょう.

### 13.1 非可逆反応

**例題 9** (化学反応: 質量作用の法則) 不可逆な化学反応  $A + B \rightarrow C$  における生成分子  $C$  の分子数  $x$  の時間変化を考えます. 初期状態では,  $A, B$  の分子数はそれぞれ  $a, b$  であり,  $C$  の分子数は 0 であったとします. 比例定数を  $k$  とおけば, 反応を支配する微分方程式は

$$\frac{dx}{dt} = k(a-x)(b-x)$$

となります. この変数分離形の微分方程式は簡単に解析解が求まり,

$$x(t) = \begin{cases} ab \frac{e^{\gamma t} - e^{-\gamma t}}{ae^{\gamma t} - be^{-\gamma t}} & \left[ \gamma = \frac{a-b}{2}k \right] \quad (a > b) \\ a - \frac{1}{kt + 1/a} & (a = b) \end{cases}$$

と与えられます.

$a = 1$  とし, 反応定数  $k$  と物質  $B$  の初期分子数  $b$  を与えるようにして, 数値解と解析解を図示するスクリプトを考えなさい.

[解] chemreact0.m にスクリプト例を,  $b = 0.9, k = 1.0$  を入力した結果を図 37 に示します. 入力された  $b$  の値が 1 (すなわち  $a = b$ ) であるかによって解析解を場合分けしています.

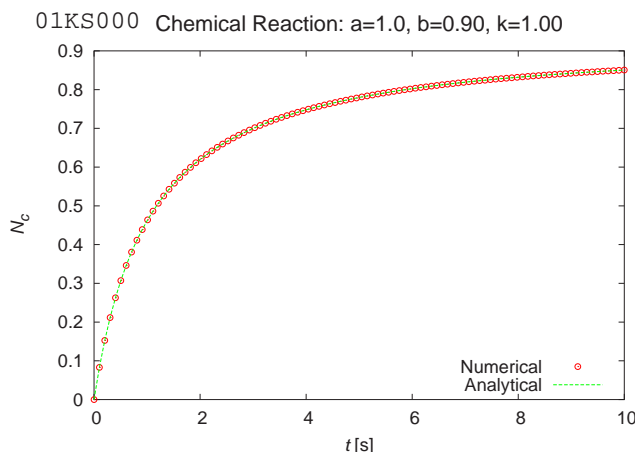


図 37 非可逆な化学反応  $A + B \rightarrow C$  における反応物生成量の時間変化

### リスト 22 chemreact0.m

```
1: function dx=react(x,t)
2:   global K A B
3:   dx(1)=K*(A-x(1))*(B-x(1));
4: endfunction
5:
6: global K A B
7: A=1.0;
8: B=input("B = "); K=input("K = ");
9: G=(A-B)*K/2.0;
10: t=linspace(0,10,100);
11: if B == 1
12:   xa = A - 1./(K*t+A^(-1));
13: else
14:   xa = A*B*(exp(G*t)-exp(-G*t))./(
15:     (A*exp(G*t)-B*exp(-G*t)));
16: endif
17: x=lsode("react", [0], t);
18: gset key bottom
19: text(0.05,0.95, "{/Courier=28 01KS000}", \
20:   "Units", "screen")
21: Title=sprintf("{/=24 Chemical Reaction: \
22: a=1.0, b=%.2f, k=%.2f}", B, K);
23: title(Title);
24: xlabel("{/Helvetica-Oblique t} [s]")
25: ylabel("{/Helvetica-Oblique N_c}")
26: hold on
27: plot(t, x, "@16;Numerical;");
28: plot(t, xa, "-;Analytical;");
29: pause
30: gset term postscript enhanced color eps \
31:   "Helvetica" 20
32: filename=sprintf\
33: ("out \chemreact0-b%.2f-k%.2f.eps\", B, K);
34: gset(filename);
35: replot
```

### 13.2 可逆反応

**問題 29** (可逆反応)  $2A \rightleftharpoons X$  なる可逆反応により, 分子  $A$  から分子  $X$  が生成する. 任意の時刻での  $X$  の分子数  $x(t)$  を求めなさい. ただし, 初め  $A$  の分子数は  $2a$ ,  $X$  の分子数は  $x(0) = 0$  であったとする. また,  $2A \rightarrow X$  およびその逆反応の  $2A \leftarrow X$  の反応定数をそれぞれ  $k_1, k_2$  とおきなさい.

☞ 反応を支配する微分方程式は

$$\frac{dx}{dt} = k_1(a-x)^2 - k_2x$$

となります. 変数分離をして積分を実行し一般解を求め, 初期条件より任意定数を決定して, 解析解は

$$x(t) = \beta_2 \frac{e^{k_1 \Delta \beta t} - 1}{e^{k_1 \Delta \beta t} - \beta_2 / \beta_1}, \quad (\Delta \beta = \beta_1 - \beta_2)$$

と与えられます. ここに,  $\beta_1, \beta_2$  は, 二次方程式

$$x^2 - (2a + k_2/k_1)x + a^2 = 0$$

の根で,  $0 < \beta_2 < \beta_1$  です. 図 38 に,  $a = 1.0, k_1 = 1.0, k_2 = 0.1$  の場合を示します.

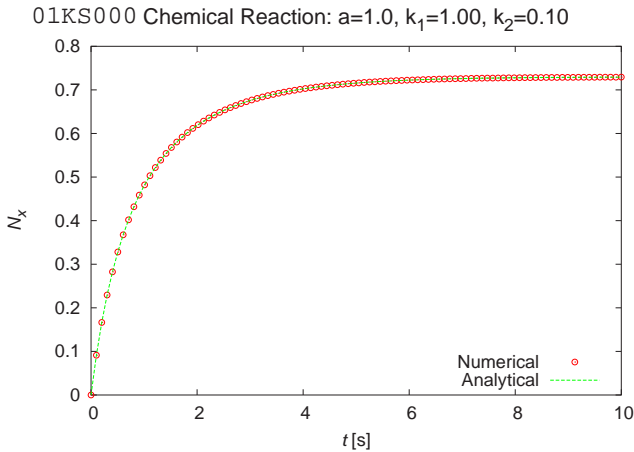


図 38 可逆反応  $2A \leftrightarrow X$  における  $X$  の量の時間変化

## 14 量子力学

量子力学においては, Newton の運動方程式に代わって, Shrödinger 方程式で粒子の運動が記述されます.

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \mathcal{H}\psi(\mathbf{r}, t) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (14)$$

微分方程式としてみた場合, 時間  $t$  に関して 1 階, 座標  $\mathbf{r}$  に関して 2 階の偏微分方程式 (波動型) ですから, Runge-Kutta 法などによって数値的に解くことが可能です.

$\mathcal{H}$  が時間に依存しない場合には, 波動関数は

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

のように, 時間と空間に変数分離することができ, 時間に依存しない Shrödinger 方程式

$$\mathcal{H}\phi(\mathbf{r}) = \mathcal{E}\phi(\mathbf{r})$$

を解くこととなります. この方程式は, ハミルトニアン  $\mathcal{H}$  の固有値方程式 とみることができます. したがって, 一般には行列を使った数値解法が適用できます.

### 14.1 井戸の中の粒子の固有値問題

Octave には行列の固有値を求める関数があります. したがって, まずは微分方程式を連立の差分方程式に変換し, 行列の固有値問題として解く方法を学習しましょう.

#### 14.1.1 中央に高い壁がある平坦な井戸

$x = 0, 1$  に無限に高い壁を持ち, また中央部分に有限の高さの壁がある, 平坦な井戸の中の粒子の固有値問題を, 行列の固有値問題として解きます. もちろん, ポテンシャル

ル壁の高さを 0 にすれば単なる平坦な井戸の問題となります.

#### リスト23 eigen.m

```

1: N=256;
2: V0=100.0;
3: XM=1.0;
4: W0=1.0/16;
5: h=XM/N;
6: VD=2/h/h;
7: VDT=-1/h/h;
8:
9: SD=diag(VDT*ones(1,N-2),1);
10: D=diag(VD*ones(1,N-1));
11: A=SD+D+SD.';
12: for i = 1 : N-1
13:   if ( abs(i*h-0.50) <= W0) A(i,i)=VD+V0; endif
14: endfor
15: [G,E]=eig(A);
16:
17: x=linspace(1/N, 1.0-1/N, N-1);
18: ptx1=0.5-W0; ptx2=0.5+W0;
19: ptv=0.9*G(N/2,1);
20: ptx=[0, ptx1, ptx1, ptx2, ptx2,1];
21: pt=[0, 0, ptv, ptv, 0, 0];
22:
23: hold on
24: grid
25: gset key left
26: Title = \
27: sprintf("{/Times=28 Width=1/16, Height=%.1f}", \
28:         V0);
29: title(Title);
30: text(0.05,0.96,"01ks000","Units","screen", \
31:      "FontName", "Courier", "FontSize", 28)
32: for k=1:3
33:   key=sprintf("-@;E%d = %5.1f;",k,E(k,k));
34:   plot(x, G(1:N-1,k), key);
35: endfor
36: plot(ptx, pt,"-4;Potential;");
37: pause
38: % for creating PostScript figure
39: gset term postscript enhanced eps color \
40:      "Helvetica" 18
41: gset out "eigen.eps"
42: replot
    
```

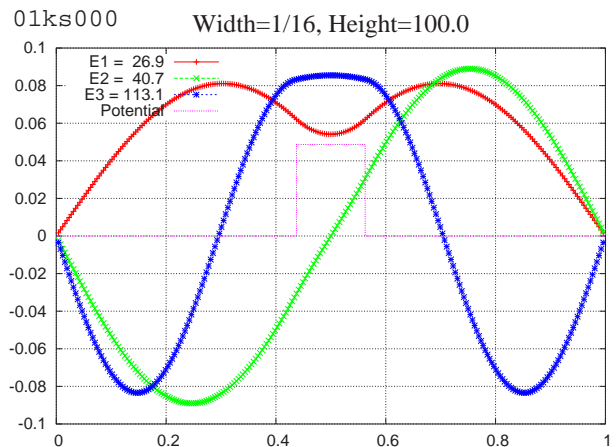


図 39 中央に高い壁がある平坦な井戸の中の粒子の固有値

14.1.2 複数のポテンシャル壁がある平坦な井戸

規則的なポテンシャル壁が複数ある場合です。この例では、波動関数を描いていますが、エネルギー固有値を下から順に表示していくと縮退していることが一目瞭然で、結晶固体中の電子のエネルギー準位に構造（バンド）が現れることの原理を理解できます。

リスト24 eigenmul.m

```

1: N=256;
2: VP=10000.0;
3: XM=1.0;
4: WP=1/32+eps;
5: h=XM/N;
6: VD=2/h/h;
7: VDT=-1/h/h;
8: SD=diag(VDT*ones(1,N-2),1);
9: D=diag(VD*ones(1,N-1));
10: A=SD+D+SD.';
11: Title=sprintf("{/Times=28 Periodic Potential: \
12: VP=%6.1f}", VP);
13: title(Title);
14: text(0.05, 0.95, "01ks000", "Units", "screen", \
15:     "FontName", "Courier", "FontSize", 28 );
16:
17: for k=1:N-1
18:     if(abs(k*h-1/16) <= WP | abs(k*h-3/16) <= WP |
19:        abs(k*h-5/16) <= WP | abs(k*h-7/16) <= WP |
20:        abs(k*h-9/16) <= WP | abs(k*h-11/16) <= WP |
21:        abs(k*h-13/16) <= WP | abs(k*h-15/16) <= WP
22:        ) A(k,k)=VD+VP ;
23:     endif
24: endfor
25: [G,E]=eig(A);
26: x=linspace(h, XM-h, N-1);
27: hold on
28: for k=1:4
29:     key=sprintf("-;E%d=%6.1f;", k, E(k,k));
30:     plot(x, G(1:N-1, k), key);
31: endfor
32: pause
33: % for creating PostScript figure
34: gset term postscript enhanced eps color 20
35: gset out "eigenmul.eps"
36: replot
    
```

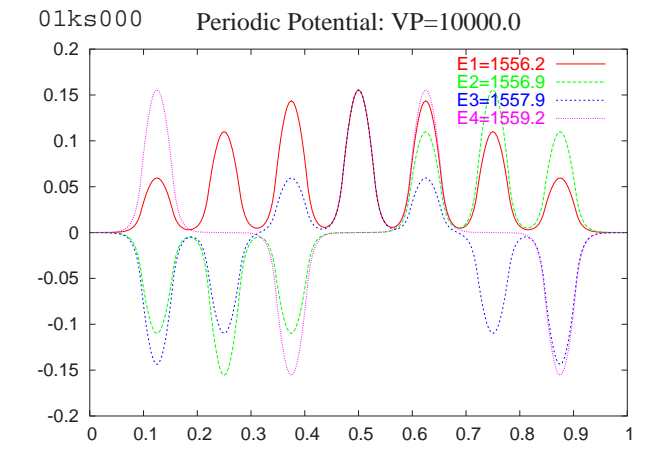


図 40 規則的に配列したポテンシャル壁を持つ井戸の中の電子のエネルギー固有値と固有関数

**問題30** 固有状態  $k$  に対して、エネルギー固有値  $E_k$  をプロットするスクリプトを考えなさい。

👉 例を図 41 に示します。

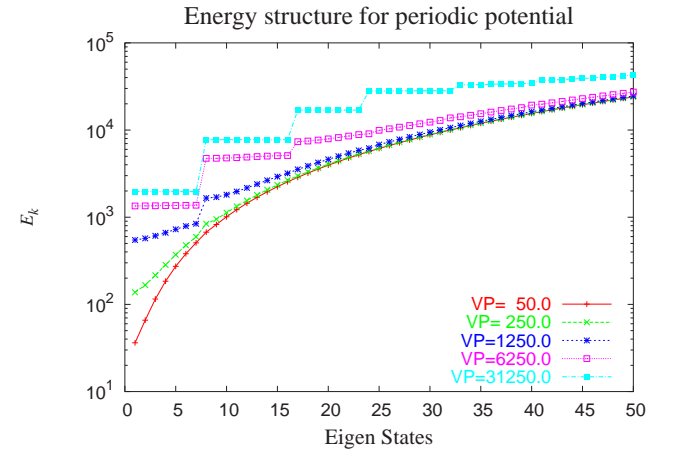


図 41 規則的に配列したポテンシャル壁を持つ井戸の中の電子のエネルギー固有値：ポテンシャルが大きいと縮退する。

14.2 波束の運動

時間に依存する Shrödinger 方程式 (14) の問題を考えましょう。本質は同じなので 1次元の Shrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \psi(x, t)$$

の数値解を求める。空間座標  $x$  を  $H$  に分割して  $x_k$  とし、2次微分を差分に置き換えると、

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x_k, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi(x_{k+1}, t) - 2\psi(x_i, t) + \psi(x_{k-1}, t)}{H^2} + V(x_k)\psi(x_k, t)$$

となり、 $\psi(x_k, t)$  に関する  $N$  次の連立微分方程式に帰着します。したがって、初期条件  $t = 0$  における  $\psi(x_k, 0)$  を与えて、octave の常微分方程式ソルバーで解くことが可能です。ところが、標準関数 lsode は、残念ながら複素数に対応していません、そこで Runge-Kutta 法の実装 rk4fixed を使わざるを得ません。分割数 500 ともなると相当に時間がかかり、少しでも速い lsode を使いたいのですが、我慢しましょう。

👉 計算速度を求めるならば、やはり C や Fortran でプログラムすべきです。Octave は数式にできるだけ近い形で表現できることが最大の特長であり、人間へのインターフェースを重視しているため、計算自体が遅くなることはあるのはやむを得ません。

**例題10** Schiff の教科書<sup>2</sup> に従って, 単位系を  $\hbar = 1$ ,  $m = 1/2$  と選定して, 区間  $[-1, 1]$  の中央に, 幅 0.064 ( $=VW$ ) 高さ (実は深さ)  $-(70.7\pi)^2$  ( $=VH$ ) のポテンシャルを設定します.  $\psi$  の初期条件には,  $x$  軸の正方向に運動量を持つ波束


$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi(\Delta x)^2}} \exp \left[ -\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{4(\Delta x)^2} + \frac{i\langle p \rangle}{\hbar} x \right]$$

をとります. ここに,  $\Delta x = 0.035$  ( $=DX$ ),  $\langle p \rangle = 50\pi$  ( $=MP$ ) です.

分割数  $N = 500$  ( $=DIM$ ), 時間間隔  $\Delta t = H^2/4$  ( $=DT$ ) として, 700 ステップまで波束の運動を計算し, 100 ステップ毎の波形を表示するスクリプトを組みなさい.

[解] スクリプトを schiff-gv.m に, その結果を図 42 に示します. 800 ステップ計算し終わってから表示するように組むと, 実行時にはあまりに待ち時間が長くなります. そこで, 100 ステップ毎に結果を表示し, その時点初期条件にして再度計算するという構成にしています. 28,49 行の (単純) 転置  $X \cdot'$  を複素共役転置  $X'$  と間違えないでください.

PS ファイル schiff.eps が出来ませんが, 途中経過を見るには, 以下のように PS ファイルビューア gv を `-watch` オプション付きで起動してください.

```
gv -watch schiff.eps & 
```

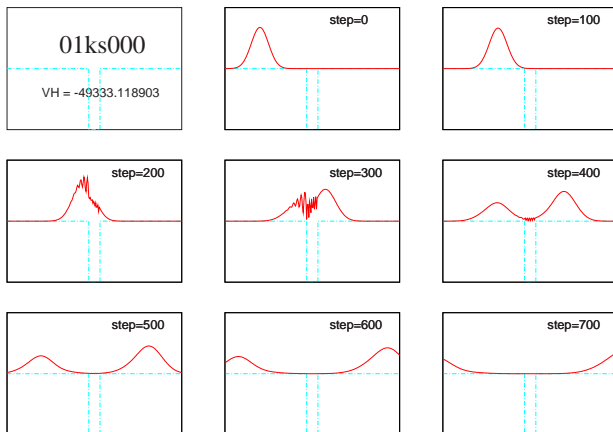


図 42 矩形井戸ポテンシャルによる波束の散乱

リスト25 schiff-gv.m

```
1: function dx = schiff(x,t)
2:   global DIM H V
3:   dx(1) = 0; dx(DIM+1) = 0;
4:   for k=2:DIM
5:     dx(k) = i*(x(k+1)-2*x(k)+x(k-1))/H^2 \
6:           - i*V(k)*x(k);
7:   endfor
8: endfunction
9:
10: global DIM H V
11: DX=0.035; MP=50*pi; VW=0.064; VH=-(70.7*pi)^2;
12: DIM=500; X0=-0.3; H=2.0/DIM;
13: DT=H^2/4; NSTEP=700;
14:
15: AX=linspace(-1,1,DIM+1);
16: x0=zeros(1,DIM+1);
17:
18: for k=1:DIM+1
19:   x = (k-DIM/2-1)*H;
20:   x0(k) = exp(-(x-X0)^2/(4*DX^2) \
21:             + i*MP*x)/(2*pi*(DX)^2)^0.25;
22:   if abs(x) < VW/2 V(k)=VH; else V(k)=0; endif
23: endfor
24:
25: axis([-0.5, 0.5, -5, 5],"off")
26: Px=[-1, -VW/2, -VW/2, VW/2, VW/2, 1];
27: Py=[0, 0, -5, -5, 0, 0];
28: p0=x0.';
29: gset term postscript enhanced eps color
30: gset out "schiff.eps"
31: subplot(3,3,1)
32: vh=sprintf("VH = %f",VH);
33: text(-0.2, 2.0, "{/Times=28 01ks000}");
34: text(-0.3, -2.0, vh);
35: plot(Px, Py, "-5;");
36: text();subplot(3,3,2)
37: text(0.1,4.0,"step=0");
38: plot(Px, Py, "-5;");
39: plot(AX, abs(p0), "1;");
40:
41: ITVL=100; TF=DT*ITVL;
42: for k=1:NSTEP/ITVL
43:   [t phi]=rk4fixed("schiff", [0 TF], p0, ITVL, 1);
44:   text(); subplot(3,3,k+2)
45:   st=sprintf("step=%d",k*ITVL);
46:   text(0.1,4.0, st);
47:   plot(Px, Py, "-5;");
48:   plot(AX, abs(phi(ITVL,:)), "1;");
49:   p0=phi(ITVL,:).';
50: endfor
```

## 15 熱統計力学

統計熱力学は, 巨視的な物理量を微視的な物理量の統計平均 (あるいはその揺らぎの程度) として捉えることを原理としています.

$$\langle A \rangle = \sum_{x_j} A(x_j) P(x_j)$$

温度  $T$  が保たれるカノニカル・アンサンブルにおいて, エネルギー  $E(x_j)$  の状態が出現する確率  $P(x_j)$  は, ボルツマン因子  $\exp[-E(x_j)/kT]$  に比例し

$$P(x_j) = \frac{1}{Z(T)} e^{-E(x_j)/kT}$$

<sup>2</sup>L.I. Schiff, 量子力学 (井上健 訳), 吉岡書店

と表されます．ここに分配関数  $Z$  は全ての状態和をとったもので

$$Z(T) = \sum_{x_j} e^{-E_j/kT}$$

で与えられます．この分配関数が求まってしまえば問題は解けたこととなりますが，一般には単純な場合にしか求めることができません．

数値シミュレーションでは，乱数を用いて系の微視的状态をボルツマン因子に比例するよう出現させ，そのアンサンブル平均を計算することになります．ところが，その状態数は極めて多く，もちろん全てにわたる和を計算することはできません．そこで，最も大きな寄与がある部分（平衡状態）を抽出する必要が生じます．それには，遷移確率を用いたマルコフ鎖による平衡状態の生成という手法が有効です．

### 15.1 イジング模型

イジング模型は，電子スピンの相互作用に基づき，物質の強磁性と常磁性の相転移を説明するモデルとして有名です．動的モンテカルロ法により，温度  $T$  の平衡状態を出現させ，系の内部エネルギー  $U$ ，磁化  $M$  あるいはそれらの揺らぎから比熱  $C$ ，磁気感受率  $\chi_m$  を計算してみましょう．次元に拘らずイジング模型では，ハミルトニアンを

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i$$

とおきます． $s_i$  はスピン変数で，位置  $i$  に固定され値は（簡単のため） $\pm 1$  を取るとします．また，隣り合う 2 つのスピン間の相互作用のみ（もっと範囲を広げることもできます）を考えて，それらのペアの和をとるという意味で  $\langle i,j \rangle$  と表し，交換相互作用の強さを  $J$  とおきます．

比熱を基本定義通り

$$C = \frac{dE}{dT}$$

と， $U$  の（数値）微分で求めるのは数値解析して得られる  $U$  の揺らぎが大きいため不正確となります．そこで，内部エネルギーの揺らぎとの関係式

$$C = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{kT^2}$$

より求めます．同様に，磁界  $H \rightarrow 0$  における磁気感受率  $\chi_m$  も，磁化  $M$  の揺らぎとの関係式を用いて計算します．

$$\chi_m = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{kT}$$

#### 15.1.1 1次元イジング模型

1次元については分配関数が理論的に求まり， $N \rightarrow \infty$  の熱力学的極限をとると， $H = 0$  のときの粒子 1 個あた

りの平均エネルギー  $E/N$  と比熱  $C/N$  は，

$$\begin{aligned} \frac{E}{N} &= -J \tanh \beta J \\ \frac{C_H}{N} &= \frac{1}{N} \frac{\partial E}{\partial T} = k(\beta J)^2 \operatorname{sech}^2 \beta J \end{aligned}$$

で与えられます．また磁化  $M/N$ ，磁気感受率  $\chi/N$  は

$$\begin{aligned} \frac{M}{N} &= \frac{\sinh \beta H}{\sqrt{\sinh^2 \beta H + e^{-4\beta J}}} \\ \frac{\chi}{N} &= \frac{1}{N} \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{\beta e^{-4\beta J} \cosh \beta H}{(\sinh^2 \beta H + e^{-4\beta J})^{3/2}} \end{aligned}$$

特に  $H = 0$  では

$$\frac{\chi_0}{N} = \left. \frac{\chi}{N} \right|_{H=0} = \beta e^{2\beta J}$$

と与えられます．この結果は，相転移は起こらないことを示しています．

**例題11** 外部磁界がない ( $H = 0$ ) 場合について， $N$  粒子の 1 次元イジング模型の，1 粒子あたりの内部エネルギー  $E/N$ ，比熱  $C/N$ ，磁気感受率の逆数  $N/\chi_0$  を動的モンテカルロ法により数値的に求め，厳密解と比較しなさい．

[解] メトロポリス法によるスクリプトを `ising-1d-m.m` に，その結果の例を図 43 に示します．バラツキが大きいのので，かなり試行回数を増やさなければなりませんが， $kT \sim 0$  付近の  $M$  の挙動を除けば，厳密解にかなり良く一致します．特に内部エネルギー  $E$  の一致は見事です．

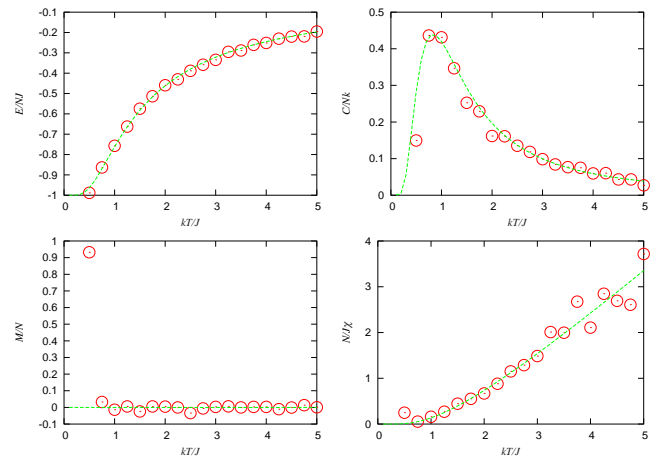


図 43 1次元イジング模型の動的モンテカルロ法による数値解析．厳密解と良く一致している．

粒子数  $N$  の 1 次元イジング模型の熱力学的極限 ( $N \rightarrow \infty$ ) での分配関数  $Z$  の対数を  $N$  で割った値は以下のように与えられます．

$$\begin{aligned} \log \lambda &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z \\ &= \log \left[ e^{\beta J} \left( \cosh \beta H + \sqrt{\sinh^2 \beta H + e^{-4\beta J}} \right) \right] \\ &= \beta J + \log \left( \cosh \beta H + \sqrt{\sinh^2 \beta H + e^{-4\beta J}} \right) \end{aligned}$$



したがって,  $\log \lambda$  から粒子 1 個当たりの内部エネルギー  $E/N$ , 比熱  $C/N$ , 磁化  $M/N$ , 磁気感受率  $\chi/N$  は, 以下のように求まります.

$$u = E/N = -\frac{\partial \log \lambda}{\partial \beta}, \quad C_H/N = \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_H$$

$$m = M/N = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log \lambda}{\partial H}, \quad \chi/N = \frac{\partial m}{\partial H}$$

### リスト26 ising-1d-m.m

```

1: N=100; J=1; H=0.0;
2: im=0:N-1; im(1)=N; ip=2:N+1; ip(N)=1;
3: Neq=5*N; Samp=200; DIV=19;
4:
5: rand("seed",time);
6: spin=ones(1,N);
7: T=linspace(0.5,5,DIV);
8: for kt=1:DIV
9:   e1=0;e2=0;mag1=0;mag2=0;
10:  for ks=1:Samp
11:    for kq=1:Neq
12:      is=ceil(N*rand);
13:      de=J*2*spin(is)*(spin(im(is))+spin(ip(is)));
14:      % Metropolis
15:      if de > 0 & exp(-de/T(kt)) < rand spin(is) *= -1;
16:    else spin(is) *= -1;
17:    endif
18:  endfor
19:  mag1=mag1+sum(sum(spin));
20:  mag2=mag2+sum(sum(spin))^2;
21:  e1=e1-J*(spin*shift(spin,-1)');
22:  e2=e2+(J*(spin*shift(spin,-1)'))^2;
23: endfor
24:  M(kt)=mag1/Samp; M2(kt)=mag2/Samp;
25:  E(kt)=e1/Samp; E2(kt)=e2/Samp;
26:  X(kt)=(M2(kt)-M(kt).^2)./T(kt)/N
27:  C(kt)=(E2(kt)-E(kt).^2)./T(kt).^2/N;
28: endfor
29:
30: Ta=linspace(0.1,5,50);
31: Ea=-tanh(J./Ta);
32: Ca=(J./Ta).^2./cosh(J./Ta).^2;
33: Ma=sinh(H./Ta)./sqrt(sinh(H./Ta).^2 + exp(-4*J./Ta))
34: Xa=exp(2*J./Ta)./Ta;
35: RX=1./X
36: RXa=1./Xa
37:
38: gset term postscript enhanced eps color 12
39: gset out "ising_1d_m.eps"
40: gset nokey
41: gset pointsize 2.0
42: gset xtics 1
43: gset ytics 0.1
44: gset xlabel "{/Times-Italic kT/J}"
45:
46: subplot(2,2,1)
47: ylabel("{/Times-Italic E/NJ}")
48: plot(T, E/N, "@16;","Ta, Ea, "-2;");
49: subplot(2,2,2)
50: ylabel("{/Times-Italic C/Nk}")
51: plot(T, C, "@16;","Ta, Ca, "-2;");
52: subplot(2,2,3)
53: ylabel("{/Times-Italic M/N}")
54: plot(T, M/N, "@16;","Ta, Ma/N, "-2;");
55: subplot(2,2,4)
56: gset ytics 1
57: gset format y "%.1f"
58: ylabel("{/Times-Italic N/J}{/Symbol-Oblique c}")
59: plot(T, RX, "@16;","Ta, RXa, "-2;");

```

### 15.1.2 2次元イジング模型

2次元イジング模型の  $H = 0$  の場合の厳密解は, 1944年にオンサガー (Onsager) によって導かれていて,

$$\frac{E}{N} = -J \coth 2\beta J \left[ 1 + \frac{2}{\pi} \kappa_1 K(\kappa) \right]$$

$$\frac{C_H}{N} = k(\beta J \coth 2\beta J)^2 \frac{2}{\pi} \left[ 2K(\kappa) - 2E(\kappa) - (1 - \kappa_1) \left( \frac{\pi}{2} + \kappa_1 K(\kappa) \right) \right]$$

$$\kappa = \frac{2 \tanh 2\beta J}{\cosh 2\beta J}, \quad \kappa_1 = 2(\tanh 2\beta J)^2 - 1$$

と与えられることが示されました. ここに,  $K(\kappa)$ ,  $E(\kappa)$  は第1種, 第2種完全楕円積分で

$$K(\kappa) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \theta}}$$

$$E(\kappa) = \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \theta} d\theta$$

と定義されています. また相転移温度  $T_c$  は,  $kT_c/J \simeq 2.269$  であり, 比熱が発散することも示されました. しかしながら,  $H \neq 0$  の場合には, 級数展開などの近似解しか求まらず, 数値解析は最も有望な手段となっています.

**問題31** 外部磁界がない ( $H = 0$ ) 場合について,  $N = L \times L$  粒子の2次元イジング模型の, 1粒子あたりの内部エネルギー  $E/N$ , 比熱  $C/N$ , 磁気感受率  $\chi_0/N$  を動的モンテカルル口法により数値的に求めなさい. 交換相互作用の強さ  $J$  は  $J = 1$  としなさい.

👉 1次元に比べると, 解析的には格段に難しくなりますが, 数値解析上は素直に行列を用いて2次元に拡張すればよいだけです. 結果の例を図44に示します.

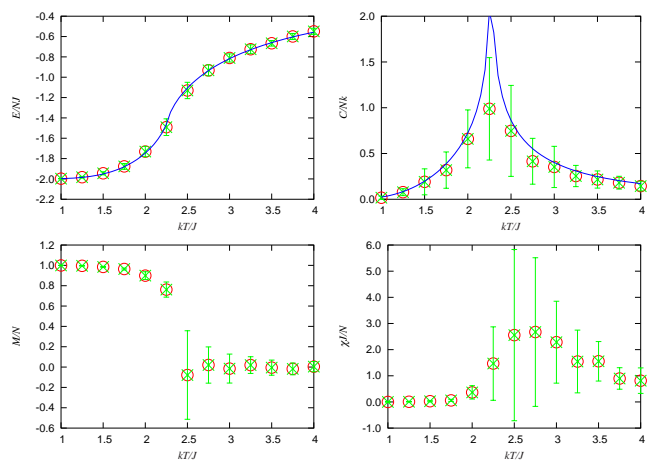


図44 2次元イジング模型 ( $N = 256 = 16^2$ ) の内部エネルギー  $E$ , 比熱  $C$ , 磁化  $M$  および磁気感受率  $\chi$  の動的モンテカルル口法による数値解

**問題32** 外部磁界がない ( $H = 0$ ) 場合について,  $N = L \times L \times L$  粒子の 3 次元イジング模型の, 1 粒子あたりの内部エネルギー  $E/N$ , 比熱  $C/N$ , 磁気感受率  $\chi_0/N$  を動的モンテカルロ法により数値的に求めてみなさい.

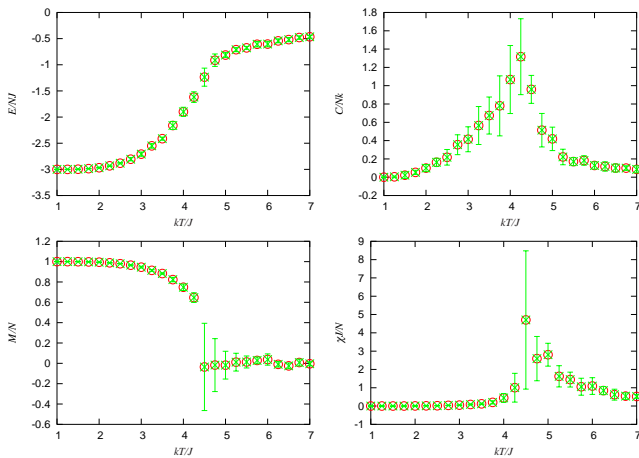


図 45 3 次元イジング模型 ( $N = 216 = 6^3$ ) の内部エネルギー  $E$ , 比熱  $C$ , 磁化  $M$  および磁気感受率  $\chi$  の動的モンテカルロ法による数値解

**問題33**  $N = L \times L$  粒子の 2 次元イジング模型の, 温度  $T$  における平衡状態を動的モンテカルロ法により実現し, スピンのマップを表示するスクリプトを考えなさい. 交換相互作用の強さ  $J$  は  $J = 1$  としなさい.

☞ Octave でイメージを表示させる関数の内, 最も簡単なものは

```
imagesc(M)
```

です.



図 46 2 次元イジング模型 ( $N = 4096 = 64^2$ ) の動的モンテカルロ法による平衡状態のマップ. 左: 低温時 ( $kT/J = 0.1$ ), 右: 高温時 ( $kT/J = 5.0$ )

## 16 電気回路

### 16.1 RL 回路

図 47 のように抵抗  $R$  とインダクタンス  $L$  および電源  $E(t)$  を直列に接続した, いわゆる  $RL$  直列回路を流れる電流  $I(t)$  を解析します.

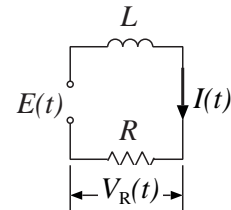


図 47  $RL$  直列回路

閉回路を 1 周する経路に含まれる電圧の総和が 0 であるというキルヒホッフの第 1 法則を適用した式を整理して, 以下のような  $I(t)$  に対する微分方程式が得られます.

$$\frac{dI(t)}{dt} + \frac{R}{L}I(t) = \frac{E(t)}{L} \quad (15)$$

さて, 電源電圧  $E(t)$  に応じて解が決まりますが, 定電圧  $E(t) = E_0$  に対し, 初期条件  $I(0) = 0$  を満たす解析解は,

$$I(t) = \frac{E_0}{R} \left( 1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \right) \quad (16)$$

$$V_R(t) = RI(t) = E_0 \left( 1 - e^{-\frac{t}{\tau}} \right) \quad (17)$$

となることは, 何度も数理物理学 I で学習しました. ここに,  $V_R(t)$  は抵抗の両端の電圧です.

では octave を用いて数値解を求めてみましょう. 数値解を計算し, 図を表示する octave のスクリプト r1-s0.m をリスト 1 に示します.

リスト 27 r1-s0.m

```
1: function dx = rcs(x,t)
2:   global R L E;
3:   dx(1)=E/L-R/L*x(1);
4: endfunction
5:
6: ## R(ohm), L(H), E(V), I(A)
7: global R L E;
8: E=1.0; R=1.0; L=1.0;
9:
10: [T,Y]=rk4fixed("rcs", [0,5], [0;0], 100, 1);
11: plot(T, Y(:,1));
12: pause;
```

**例題 12** ( $RL$  直列回路) 解析解と数値解を比較してみましょう. 実は 1 つの図に両方を表示しても, 数値解の精度が良ければ解析解と重なっていて区別できないはず. そこで, 続いてその差を別の図に表示するスクリプトを考えなさい.

[解] 解析解の時間ベクトルを数値解の時間ベクトルと同一にすると見やすい図ができます (12 行) .  $x, y$  軸のラベルもつけましょう (14-15 行) . 別の図を描くには “hold off” を実行して重ね書きを解除する必要があります (21 行) .

リスト28 rl-s.m

```

1: function dx = rcs(x,t)
2:   global R L E;
3:   dx(1)=E/L-R/L*x(1);
4: endfunction
5:
6: ## R(ohm), L(H), E(V), I(A)
7: global R L E;
8: E=1.0; R=1.0; L=1.0;
9: tau=L/R;
10:
11: [T,Y]=rk4fixed("rcs", [0,5], [0;0], 100, 1);
12: YA=E/R*(1-exp(-T/tau));
13:
14: title("01ks000");
15: xlabel("Time (s)");
16: ylabel("I (A)");
17: grid;
18: plot(T, Y(:,1), "o", "Numerical");
19: hold on;
20: plot(T, YA, "r", "Theoretical");
21: pause();
22: hold off;
23: ylabel("Diff. I (A)");
24: plot(T, Y(:,1)-YA, "b", "Difference");
25: pause;
    
```

**問題34** gnuplot には 2 組の  $x, y$  軸を持つ図を描く機能があります . octave からは , 同じ  $x$  軸に対して異なる  $y$  軸で表示させるには , 次のように  $t, y$  ベクトルを組みにしたデータ行列 data を作成して , gplot で axis オプションを指定することにより可能となります (“gset y2tics” は右側の  $y_2$  軸の目盛を表示させるための命令です) .

```

data=[t,y];
gset y2tics
gplot data axis x1y2
    
```

上記命令を用いて , 解析解 , 数値解 , 両者の差を 1 つの図に表示するスクリプトを考えなさい .

☞ 例を図 48 に示します .

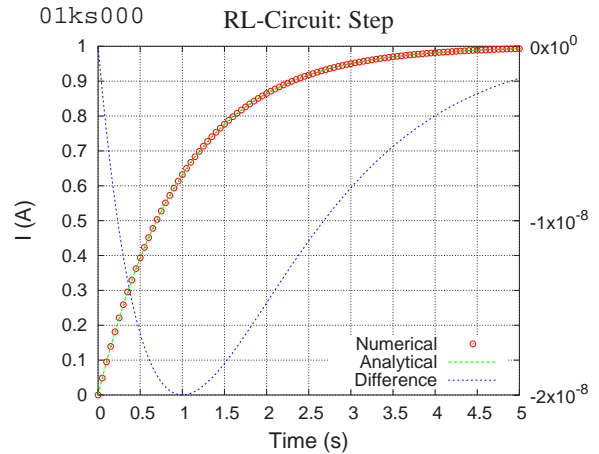
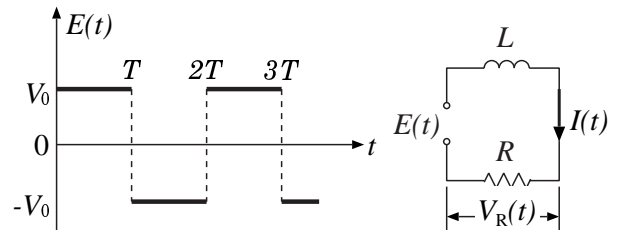


図 48 解析解と数値解 , およびその差を同時に表示した図の例

**問題35** ( $RL$  直列回路矩形波に対する応答)  $RL$  直列回路に  $E(t)$  として次のような矩形波を入力した場合を数値解析し , 解析解と比較しなさい .

$$E(t) = E(t + 2T), \quad E(t) = \begin{cases} V_0 & (0 < t < T) \\ -V_0 & (T < t < 2T) \end{cases}$$



☞ 数理物理学 I で学習したように , ラプラス変換により , 以下の無限級数解が得られます .

$$i(t) = \frac{V_0}{R} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left\{ h(t - nT) \Theta(t - nT) - h(t - (n+1)T) \Theta(t - (n+1)T) \right\},$$

$$\left[ \tau = \frac{L}{R}, \quad h(t) = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right]$$

$V_0 = 1, R = 1, \tau = 1 (L = 1)$  の場合の抵抗の両端の電圧  $V_R$  , インダクタの両端の電圧  $V_L$  を図 49 に示します .  $V_L$  には電源電圧 (1 V) よりも大きい電圧がかかることが判ります .

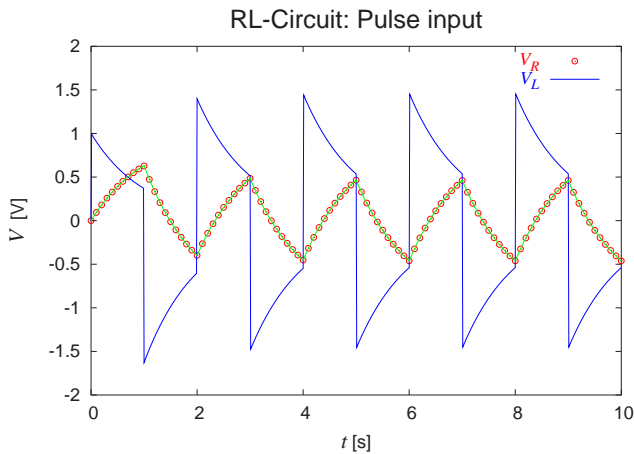
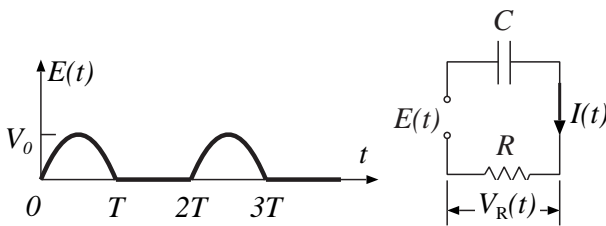


図 49 RL 直列回路のパルス入力応答

**例題13** (RC 直列回路の半波整流波に対する応答) RC 直列回路に  $E(t)$  として次のような半波整流を入力した場合を数値解析して, 解析解と比較しなさい.



**解** 数理物理学 I ではラプラス変換によって解析解が次のように求まりました.

$$i(t) = \frac{V_0 \omega}{R \left( \omega^2 + \frac{1}{\tau^2} \right)} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \sqrt{\omega^2 + \frac{1}{\tau^2}} \sin(\omega t - n\pi + \beta) - \frac{1}{\tau} \exp \left[ -\frac{1}{\tau} \left( t - n\frac{\pi}{\omega} \right) \right] \right\} \Theta \left( t - n\frac{\pi}{\omega} \right),$$

$$\left[ \omega = \frac{2\pi}{2T} = \frac{\pi}{T}, \tau = RC, \beta = \arctan \frac{1}{\omega\tau} \right]$$

ところで, 正直に  $i(t)$  を求めるには, 入力電圧  $E(t)$  の微分  $dE/dt$  も用意しなければならないので, 少し大変です. そこで, コンデンサーの電荷  $q(t) = \int i(t) dt$  の方程式とを考え直しましょう. すると, 微分方程式は

$$\frac{dq(t)}{dt} + \frac{q(t)}{RC} = \frac{E(t)}{R}$$

となり,  $dE/dt$  の計算が不要となります. また, 無限級数解は

$$q(t) = \frac{V_0}{R \left( \omega^2 + \frac{1}{\tau^2} \right)} \sum_{n=0}^{\infty} \left\{ \omega \exp \left[ -\frac{1}{\tau} \left( t - n\frac{\pi}{\omega} \right) \right] \right.$$

$$\left. - \sqrt{\omega^2 + \frac{1}{\tau^2}} \cos(\omega t - n\pi + \beta) \right\} \Theta \left( t - n\frac{\pi}{\omega} \right),$$

$$\left[ \omega = \frac{2\pi}{2T} = \frac{\pi}{T}, \tau = RC, \beta = \arctan \frac{1}{\omega\tau} \right]$$

と表されます.

$V_0 = 1, R = 1$  とし,  $C$  の値 ( $\tau = RC$ ) をパラメータとして入力できるスクリプトを rc-halfrect-a2.m に示します.  $q(t)$  が求めれば  $V_C = q/C$  よりコンデンサーの両端の電圧が求まり, さらに抵抗の両端の電圧が  $V_R = E - V_C$  で計算できます.  $\tau = 1 (C = 1)$  の場合の抵抗の両端の電圧  $V_R$ , コンデンサーの両端の電圧  $V_C$  を図 50 に示します.  $C$  が大きくなると, 整流作用が機能し,  $V_C$  に直流成分が現われてきます.

リスト29 rc-halfrect-a2.m

```

1: function [ret] = Qa(t,w,tau,n)
2: [nt,mt]=size(t); rt=1/tau; b=atan(rt/w);
3: for k=1:nt
4: if t(k) >= n*pi/w
5: ret(k) = -sqrt(w^2+rt^2)*cos(w*t(k)-n*pi+b) \
6: +w*exp(-rt*(t(k)-n*pi/w));
7: else ret(k) = 0; endif
8: endfor
9: endfunction
10:
11: function ret=E(t,T)
12: ret=sin(pi*t/T).*(sign(sin(pi*t/T))+1)/2;
13: endfunction
14:
15: function dx = rc(x,t)
16: global R C T;
17: dx(1)=-x(1)/(R*C) + E(t,T)/R;
18: endfunction
19:
20: global R C T;
21: N=200; T=1; R=1.0; W=pi/T;
22: C=input("C = "); Tau=R*C;
23:
24: [t,x]=rk4fixed("rc", [0,10*T], [0], N, 1);
25: es=E(t,T); [n,m]=size(t); qa=zeros(n,m);
26: for k=0:10
27: qa = Qa(t,W,Tau,k); qa += qa;
28: endfor
29: qa *= 1/(R*(W^2+Tau^(-2)));
30: index=[1:2:n];
31: tsp=t(index,:); xsp=x(index,:); esp=es(index,:);
32:
33: title("{/=28 RC-Circuit: Halfrectified wave}")
34: xlabel("{/Times-Italic=24 t} [s]");
35: ylabel("{/Times-Italic=24 V} [V]");
36: gset xrange [0:10]; gset xtics 1;
37: plot(tsp, esp-xsp(:,1)/C, "@16;V_R;" , \
38: tsp, xsp(:,1)/C, "@36;V_C;" , \
39: t, es-qa/C, "2;" , \
40: t, qa/C, "7;" );
41: pause();
42:
43: gset term postscript enhanced solid eps color 20
44: gset out "rc-halfrect-a2.eps"
45: replot
    
```

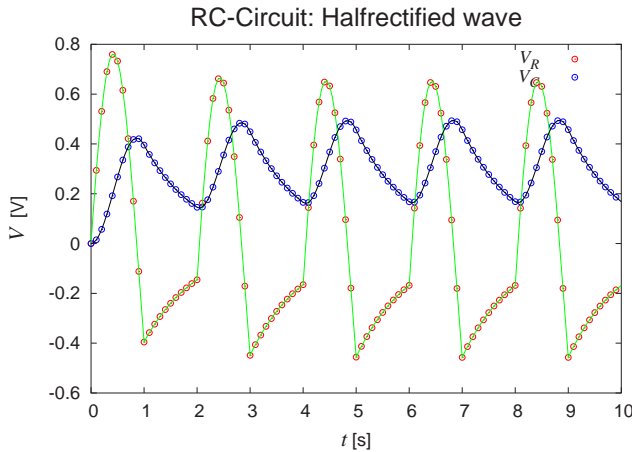


図 50 RC 直列回路の半波整流波入力応答

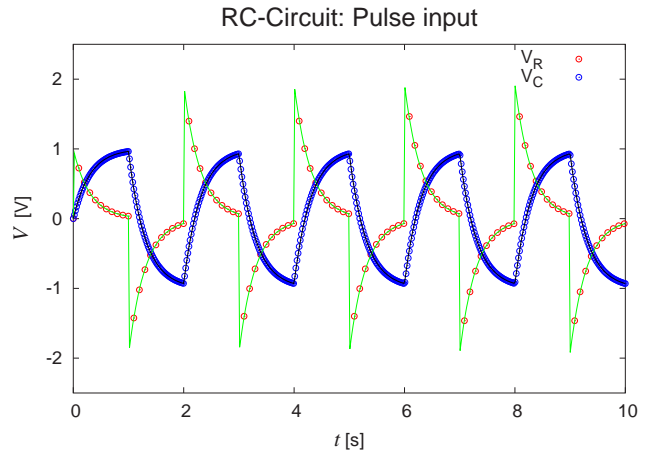
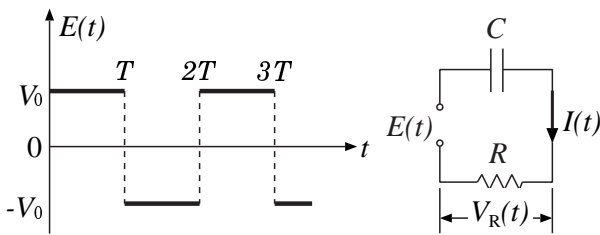


図 51 RC 直列回路のパルス入力応答

**問題36** (*RC* 直列回路の矩形波に対する応答) *RC* 直列回路に  $E(t)$  として前問の矩形波を入力した場合を数値解析しなさい。



☞ コンデンサーの電荷  $q(t)$  についての1階微分方程式

$$\frac{dq(t)}{dt} + \frac{q(t)}{RC} = \frac{E(t)}{R}$$

を、数理物理学 I で学習したラプラス変換を用いて解いて、以下の無限級数解が得られるはずだ。

$$q(t) = CV_0 \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left\{ h(t - nT) \theta(t - nT) - h(t - (n+1)T) \theta(t - (n+1)T) \right\},$$

$$\left[ \tau = RC, h(t) = 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right]$$

$q(t)$  が解れば、電圧は  $V_C = q/C$ ,  $V_R = E - V_C$  の関係式より計算できます。  $V_0 = 1, R = 1, \tau = 0.3 (C = 0.3)$  の場合の抵抗の両端の電圧  $V_R$ , コンデンサーの両端の電圧  $V_C$  を図 51 に示します。この回路は簡単な微分回路になっていて、入力波形(矩形波)を微分した、鋭いひげが  $V_R$  に現れています。

## 16.2 RLC 回路

**例題14** (*RLC* 直列回路) 図 52 に示すような *RL* 回路にコンデンサー  $C$  を加えた *RLC* 直列回路を流れる電流  $I(t)$  を解析しなさい。

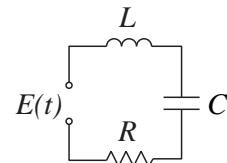


図 52 RLC 直列回路

[解] キルヒホッフの電圧則は、 $q(t) = \int I(t) dt$  に対して

$$L \frac{d^2 q(t)}{dt^2} + R \frac{dq(t)}{dt} + \frac{q(t)}{C} = E(t)$$

ですから、全体を  $L$  で割って、

$$\frac{d^2 q(t)}{dt^2} + \frac{R}{L} \frac{dq(t)}{dt} + \frac{1}{LC} q(t) = \frac{1}{L} E(t) \quad (18)$$

が求める 2 階の定数係数線形微分方程式です。まずは、 $E(t) \equiv 0$  の場合を考えましょう。これは減衰振動の式 (7) (p.26) の右辺を 0 と置いたものと同じです。したがって、減衰振動となる条件下で一般解は、 $A, \theta$  を任意定数(初期条件で決定される)

$$q(t) = Ae^{-\frac{t}{\tau}} \cos\left(\sqrt{\omega_0^2 - \frac{1}{\tau^2}} t + \theta\right)$$

$$\left[ \tau = \frac{2L}{R}, \omega_0^2 = \frac{1}{LC} \right]$$

$$\text{減衰振動となる条件: } \omega_0^2 - \frac{1}{\tau^2} > 0$$

となります。



$L = 1.0\text{H}$ ,  $C = 0.03\text{F}$  に固定し  $R$  を可変にし, 初期条件を  $q(0) = CV_C(0) = C \, dq(0)/dt = I(0) = 0$  としたときに  $V_C(t) = q(t)/C$  を表示するスクリプトを `rlc-input.m` に, また  $R = 1.0\Omega$  を与えた場合を図 53 に示します.

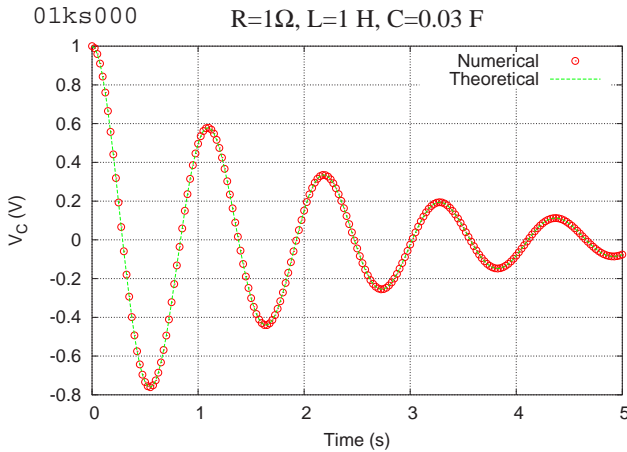


図 53 RLC 直列回路

リスト 30 `rlc-input.m`

```

1: function dx = rlc(t,x)
2:   global R L C;
3:   dx(1)=x(2);
4:   dx(2)=-R/L*x(2)-x(1)/(L*C);
5: endfunction
6:
7: global R L C;
8: R=input("R = ");
9: L=1.0; C=0.03;
10: tau=2*L/R;
11: w=sqrt(1/(L*C)-1/(tau^2));
12:
13: [T,X]=rk4fixed("rlc", [0,5], [C;0], 200, 0);
14: XA=exp(-T/(tau)).*(cos(w*T)+1/(w*tau)*sin(w*T));
15: xlabel("Time (s)"); ylabel("V_C (V)");
16: TITLE=sprintf("/Times=28 R=%g{/Symbol=28 W}, \
17: L=%g H, C=%g F)", R, L, C);
18: title(TITLE);grid;
19: text(0.05,0.95,"01ks000","Units","screen",\
20:      "FontName", "Courier", "FontSize", 28);
21:
22: plot(T, X(:,1)/C, "@16;Numerical;");
23: hold on;
24: plot(T,XA, ";Theoretical;");
25: pause();
26: % for creating PS figure
27: gset pointsize 1.2
28: gset term postscript enhanced color eps \
29:      "Helvetica" 20
30: gset out "rlc-input.eps"
31: replot

```

**問題37** (RLC 直列回路: 自由振動) 例題において, 各電圧  $V_R$ ,  $V_C$ ,  $V_L$  を表示してみなさい.

**問題38** (RLC 直列回路: 正弦波に対する応答)  $E(t) = E_0 \cos \omega t$  の場合を数値解析し, 解析解と比べてみなさい.

**問題39** (RLC 直列回路: 三角波に対する応答)  $E(t)$  が次のような三角波である場合を数値解析しなさい.

$$E(t) = E(t + 2T), \quad E(t) = \begin{cases} \frac{t}{T} & (0 < t < T) \\ 2 - \frac{t}{T} & (T < t < 2T) \end{cases}$$

**問題40** (RLC 直列回路: 矩形波に対する応答) RL 直列回路に  $E(t)$  として次のような矩形波を入力した場合を数値解析しなさい.

$$E(t) = E(t + 2T), \quad E(t) = \begin{cases} V_0 & (0 < t < T) \\ -V_0 & (T < t < 2T) \end{cases}$$