運動方程式の数値計算法

運動方程式は，物体の質量を m ，物体に加わる力を F ，物体の加速度を a とすると，次のようになる。

$$ma = F$$

ここで加速度 a は位置 x の時間による二階微分 $\dfrac{d^2x}{dt^2}$ であるので，運動方程式は実際には二階微分方程式となる。また力は一般に，位置 x ，速度 v ，時間 t の関数なので $F(x,v,t)$ と書くことにする。すると運動方程式は次のようになる。

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = F(x,v,t)$$

これを，速度 v を用いて連立一階微分方程式に書き直すと，次のようになる。

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = v \\ \dfrac{dv}{dt} = \dfrac{1}{m}F(x,v,t) \end{cases}$$

これに微分方程式の数値計算でよく用いられる４次の Runge-Kutta 法を適用すると，ある時刻の位置と速度（i 番目の位置 x_i と速度 v_i ）から微少時間 Δt 後の位置と速度（$i+1$ 番目の位置 x_{i+1} と速度 v_{i+1}）は次のようにして求めることができる。

$$\begin{aligned}
k_1 &= \Delta t \cdot v_i \\
l_1 &= \Delta t \cdot F(x_i, v_i, t_i)/m \\
k_2 &= \Delta t \cdot (v_i + l_1/2) \\
l_2 &= \Delta t \cdot F(x_i + k_1/2, v_i + l_1/2, t_i + \Delta t/2)/m \\
k_3 &= \Delta t \cdot (v_i + l_2/2) \\
l_3 &= \Delta t \cdot F(x_i + k_2/2, v_i + l_2/2, t_i + \Delta t/2)/m \\
k_4 &= \Delta t \cdot (v_i + l_3) \\
l_4 &= \Delta t \cdot F(x_i + k_3, v_i + l_3, t_i + \Delta t)/m
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
v_{i+1} &= v_i + (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)/6 \\
x_{i+1} &= x_i + (l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4)/6
\end{aligned}$$

実際には，空間の次元数 m と物体の個数 n の積 mn だけの自由度について上式を連立させて解く。

（加藤徳善）