3 偏微分方程式.

従属変数 ϕ が2つ以上の独立変数に依存する場合

$$\phi(x, y, z, \cdots).$$

物理で重要となるのは、2次元2階偏微分方程式に帰着される.

$$a\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + b\frac{\partial^2\phi}{\partial x\partial y} + c\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + d\frac{\partial\phi}{\partial x} + e\frac{\partial\phi}{\partial y} + f\phi + g = 0.$$

i) $b^2 < ac$ 楕円型 (Elliptic) → Laplace's Eq.
ii) $b^2 > ac$ 双曲型 (Hyperbolic) → Wave Eq.
iii) $b^2 = ac$ 放物型 (Parabolic) → Diffusion / Schrödinger Eq.

3-1. Elliptic Equations.

例1). Laplace Eq. $$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} = 0$$

・一様な導体中の熱や電気の定常流
・非圧縮流体の無渦流

Poisson Eq. $$\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} = f(x, y)$$

・電荷密度ρの2次元電子分布に伴う電位$V(x, y)$

$$\Rightarrow \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} + \frac{\rho}{\varepsilon} = 0.$$

通常これらの式は、

①. 閉じた空間の端で境界条件を持つ.
②. すべての微分は空間についてのみである.

⟹ 時間に依存しない平衡状態や定常状態を記述する

3章の行列演算のところで扱う

3-2 Hyperbolic Equations.

代表的な例として1次元の Wave Equation を取り上げる.

$$\frac{\partial^2 y}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = 0. \qquad ①$$

書きかえて.

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + c\frac{\partial}{\partial x}\right)\underbrace{\left(\frac{\partial}{\partial t} - c\frac{\partial}{\partial x}\right) y}_{z\text{ とする}} = 0. \qquad ②$$

$$\Longrightarrow \quad \frac{\partial z}{\partial t} + c\frac{\partial z}{\partial x} = 0 \quad (3a), \qquad \frac{\partial y}{\partial t} - c\frac{\partial y}{\partial x} = z \quad (3b)$$

第1式(3a)は y に依らず独立に解ける, 第2式(3b)は, 第1式で決まる z を用いて解ける. どちらの式も数値計算の技術的には同じようなものであるので, ①を数値的に解くことは, (3a)を与えられた境界条件のもとで解くことに帰着する.

→ 通常は $z(x,t) = z_0(x)$ at $t=0$ の形で初期条件として与えられる.

3-2-1. Simple method.

・空間微分 → 中心差分. ⇒ 2次精度
・時間微分 → Euler 法.(前進差分). ⇒ 1次精度

を用いて ③a を差分形にする.

$$z_j^{n+1} = z_j^n - \frac{c\delta t}{2\delta x}\left(z_{j+1}^n - z_{j-1}^n\right) \qquad ④$$

(ただし、上付添字は時間、下付は場所を表す.)

④の精度を求める.

$$z_j^{n+1} - z_j^n = \delta t \left.\frac{\partial z}{\partial t}\right|_j^n + \frac{1}{2}\delta t^2 \left.\frac{\partial^2 z}{\partial t^2}\right|_j^n + \cdots \qquad ⑤$$

$$z_{j+1}^n - z_{j-1}^n = 2\delta t \left.\frac{\partial z}{\partial x}\right|_j^n + \frac{1}{3}\delta t^3 \left.\frac{\partial^3 z}{\partial x^3}\right|_j^n + \cdots \qquad ⑥$$

⑤.⑥を④へ代入.

$$\delta t \left.\frac{\partial z}{\partial t}\right|_j^n + \frac{1}{2}\delta t^2 \left.\frac{\partial^2 z}{\partial t^2}\right|_j^n + \cdots$$

$$= -\frac{c\delta t}{2\delta x}\left(2\delta x \left.\frac{\partial z}{\partial x}\right|_j^n + \frac{1}{3}\delta t^3 \left.\frac{\partial^3 z}{\partial x^3}\right|_j^n + \cdots\right).$$

一方. ③a は.

$$\left.\frac{\partial z}{\partial t}\right|_j^n = -c \left.\frac{\partial z}{\partial x}\right|_j^n \qquad (\Leftarrow \text{Exact.})$$

両者を比較すると. tについて 2次以上、xについて 3次以上が異なることがわかる.

⟹. 時間の1次、空間の2次の精度を持つことが確かめられた.

$\boxed{④ の安定性}$

平面波の解をあらかじめ与えて考える.

$z_j^n = v^n \exp(ikx_j)$

$$\therefore\ v^{n+1} e^{ikx_j} = v^n e^{ikx_j} - \frac{c\delta t}{2\delta x} v^n \left(e^{ikx_{j+1}} - e^{ikx_{j-1}} \right)$$

$$v^{n+1} = \left[1 - i \frac{c\delta t}{\delta x} \sin(k\delta x) \right] v^n$$

$v^{n+1} \Rightarrow v^{n+1} + \delta v^{n+1}$

$v^n \Rightarrow v^n + \delta v^n$

then $$\delta v^{n+1} = \left[1 - i \frac{c\delta t}{\delta x} \sin(k\delta x) \right] \delta v^n \quad ⑦$$

$$\left| [\cdots] \right|^2 = 1 + \left(\frac{c\delta t}{\delta x} \right)^2 \sin^2(k\delta x) > 1.$$

NG.

3-2-2 the Lax method.

Simple method ④ に少し変更を加える.

$$z_j^{n+1} = \frac{1}{2}\left(z_{j+1}^{n} + z_{j-1}^{n}\right) - \frac{c\delta t}{2\delta x}\left(z_{j+1}^{n} - z_{j-1}^{n}\right) \qquad ⑧$$

前回と同様に. $z_j^n = v^n \exp(ikx_j)$ を入れて. 安定性を見ると....

$$\delta v^{n+1} = \left[\cos(k\delta x) - i\frac{c\delta t}{\delta x}\sin(k\delta x)\right]\delta v^n \qquad ⑨$$

$$\left|[\cdots]\right|^2 = \cos^2(k\delta x) + \left(\frac{c\delta t}{\delta x}\right)^2 \sin^2(k\delta x)$$

$$= 1 - \sin^2(k\delta x)\left(1 - \left(\frac{c\delta t}{\delta x}\right)^2\right)$$

∴安定性の条件は、 $\frac{\delta x}{\delta t} \geq c$ for all k.

物理的には、音速が δx 伝わるに要する時間 $\simeq \delta x/c$ より δt は小さくなければならない //.

2-2-3. その他の方法.

- the Lelevier method.
- the Lax-Wendroff method.
- the Leap-Frog method.
- the Quasi-Second Order method.

See. "Numerical Recipes".

2-3. Parabolic Equations.

代表的な例として. Diffusion Eq. を取り上げる.

$$\frac{\partial u}{\partial t} - K\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \qquad ①$$

Hyperbolic Equations 同様に. 通常.

$$u(x,t) = u_0(x) \quad \text{at} \quad t=0.$$

で与えられる初期条件のもとで時間発展を求める.

2-3-1. Simple method.

空間 → 中心差分. → 2次
時間 → Euler 法. → 1次

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{K\delta t}{\delta x^2}\left(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n\right) \qquad ②$$

平面波を代入して. 安定性を見ると.

$$\delta v^{n+1} = \left[1 - \frac{4K\delta t}{\delta x^2}\sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right)\right]\delta v^n \qquad ③$$

安定性の条件は.

$$\delta t \leq \frac{1}{2}\frac{\delta x^2}{K}$$

一見良い様に見えるが. δx^2 というのは. 極少量なので.
δt が大きくとれないという大問題がかくされている.

3-3-2. the Dufort-Frankel method.

$$u_j^{n+1} = u_j^{n-1} + \frac{2K\delta t}{\delta x^2}\left(u_{j+1}^{n} - (u_j^{n+1} + u_j^{n-1}) + u_{j-1}^{n}\right)$$

とひとまず②風に書くが．これは．左右両辺に $n+1$ がある．

⇒ $n+1$ を左辺に集めて．整理すると．

$$u_j^{n+1} = \left(\frac{1-\alpha}{1+\alpha}\right)u_j^{n-1} + \left(\frac{\alpha}{1+\alpha}\right)(u_{j+1}^{n} + u_{j-1}^{n})$$

with. $\alpha \equiv \frac{2K\delta t}{\delta x^2}$ （陽解法）.

⟶ 安定性の条件が常に満たされる．（計算略）

3-3-3 the Crank - Nicholson method.

◎ Simple method では.

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{\delta x^2}\left(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n \right) \equiv \left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_j^n$$

◎ Crank - Nicholson では

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{2}\left(\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_j^n + \left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_j^{n+1} \right)$$

$$= \frac{1}{2\delta x^2}\left(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n + u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} - u_{j-1}^n \right)$$

$$\therefore\ u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{k\delta t}{2\delta x^2}\left(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n + u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} - u_{j-1}^n \right) \quad ①$$

(時間について2次の精度).

$n+1$ を左辺, n を右辺へ.

$$-u_{j+1}^{n+1} + \left(2+\frac{2}{\alpha}\right)u_j^{n+1} - u_{j-1}^{n+1} = \underbrace{u_{j+1}^n - \left(2-\frac{2}{\alpha}\right)u_j^n + u_{j+1}^n}_{(\equiv d_j^n)} \quad ②$$

(with. $\alpha \equiv k\delta t/\delta x^2$). $j = 1, 2, \cdots, N$

これは. N元連立方程式なので. $\overbrace{②式}^{N コの}$は.独立でない → 陰解法.

$u_1^n = u_1^0$, $u_N^n = u_N^0$ という固定境界条件の場合....

$$\begin{array}{l} \Rightarrow \\ \\ \\ \\ \Rightarrow \end{array}
\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & & & \\
-1 & 2+2/\alpha & -1 & 0 & & 0 & \\
0 & -1 & 2+2/\alpha & -1 & & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 & 0 & & & -1 & 2+2/\alpha & -1 \\
 & & & & & & 1
\end{bmatrix}
\begin{pmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ \vdots \\ \\ u_{N-1}^{n+1} \\ u_N^{n+1} \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} d_1^n \\ d_2^n \\ \vdots \\ \\ d_{N-1}^n \\ d_N^n \end{pmatrix}$$

$j=1$ と $j=N$ の行は.境界条件によって異なる.

$u_j^n = v^n \exp(ikx_j)$ を代入して安定性を見る.

$$-\alpha v^{n+1}\exp(ikx_{j+1}) + (2+2\alpha)v^{n+1}\exp(ikx_j) - \alpha v^{n+1}\exp(ikx_{j-1})$$
$$= \alpha v^n \exp(ikx_{j+1}) + (2-2\alpha)v^n \exp(ikx_j) + \alpha v^n \exp(ikx_{j-1})$$

$$v^{n+1}\left(2+2\alpha-2\alpha\cos(k\delta x)\right)$$
$$= v^n\left(2-2\alpha+2\alpha\cos(k\delta x)\right)$$

$$\therefore\ \delta v^{n+1} = \frac{1-\alpha+\alpha\cos(k\delta x)}{1+\alpha-\alpha\cos(k\delta x)}v^n$$
$$= \frac{1-2\alpha\sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right)}{1+2\alpha\sin^2\left(\frac{k\delta x}{2}\right)}v^n.$$

すべてのkについて.常に 1より小さい. → 絶体安定 //.

Crank-Nicolson の陰解法について.
(N-1) 個の格子点がある場合.

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & 0 & & \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & 0 & & \\ 0 & 0 & a_4 & b_4 & c_4 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & & 0 & a_{N-1} & b_{N-1} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \\ \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ \\ d_{N-1} \end{pmatrix}$$

a, b, c, b は既知. $\longrightarrow$ $u_1 \sim u_{N-1}$ を求める.

Gauss 消去法

第1式と第2式から u_1 を消去. (第2'式)
第2'式と第3式 〃 u_2 〃 (第3'式)

u_i について線形のみ.

~~第(i-2)式と第(i-1)式から u_{i-1} を消去(第(i-1)'式)~~
第(i-1)'式と第i式から u_{i-1} を消去 (第i'式).

$$\alpha_{i-1} u_{i-1} - c_{i-1} u_i = S_{i-1} \qquad (i-1)'$$
$$-a_i u_{i-1} + b_i u_i - c_i u_{i+1} = d_i \qquad i$$

$$\alpha_i u_i - c_i u_{i+1} = S_i \qquad \cdots\cdots (1)$$

$$\alpha_i = b_i - \frac{a_i c_{i-1}}{\alpha_{i-1}}, \quad S_i = d_i + \frac{a_i S_{i-1}}{\alpha_{i-1}} \qquad (i = 2, 3, \cdots)$$

(ただし、$\alpha_1 = b_1$, $S_1 = d_1$)

連立方程式の最後の1対は.

$$\alpha_{N-2} u_{N-2} - c_{N-2} u_{N-1} = S_{N-2}$$
$$-a_{N-1} u_{N-2} + b_{N-1} u_{N-1} = d_{N-1}$$

$$\alpha_{N-1} u_{N-1} = s_{N-1} \quad \cdots\cdots \text{②}$$

∴ ②より. $u_{N-1} = \dfrac{s_{N-1}}{\alpha_{N-1}}$

①より. $u_i = \dfrac{s_i + c_i u_{i+1}}{\alpha_i} \quad (i = N-2, N-3, \cdots, 1)$

○ これで、すべての u_i が求まる. //

反復法 uについて非線形でもok. ex. $\dfrac{\partial u}{\partial t} = k\left(\dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(u)\right)$ (TDGL)

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{k\delta t}{2\delta x^2}\Big(\underbrace{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}_{\text{未知}} + u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n\Big)$$

○
$$= \frac{1}{2}\alpha\left(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}\right) + \underbrace{b^n}_{\text{既知}}$$

- とりあえず $\underbrace{\text{右辺と左辺を別のものと考え、}}_{\text{ある試行的な値を右辺に代入し、}}$ 左辺を求める.
- その結果を、右辺に代入した値と較べて、両者が等しくなるまで何度もくり返す.

i) 最も簡単な方法.

$$(u_j^{n+1})^{\ell+1} = \frac{1}{2}\alpha\left[(u_{j+1}^{n+1})^{\ell} - 2(u_j^{n+1})^{\ell} + (u_{j-1}^{n+1})^{\ell}\right] + b^n$$

$\longrightarrow$ $0 < \alpha \leq 1/2$ のみ収束.

ii) Jacobi 反復法.

$$(u_j^{n+1})^{\ell+1} = \frac{1}{2}\alpha\left[(u_{j+1}^{n+1})^{\ell} - 2(u_j^{n+1})^{\ell+1} + (u_{j-1}^{n+1})^{\ell}\right] + b^n$$

$$(u_j^{n+1})^{\ell+1} = \frac{\alpha}{2(1+\alpha)}\left[(u_{j+1}^{n+1})^{\ell} + (u_{j-1}^{n+1})^{\ell}\right] + \frac{b^n}{1+\alpha}$$

$\longrightarrow$ すべてのαについて収束.

iii) Gauss - Seidel 反復法.

jについては値の小さな方から順に格子点を計算するので,
$(u_j^{n+1})^{\ell+1}$を求める時点で$(u_{j-1}^{n+1})^{\ell+1}$は既知である.

$$\therefore\ (u_j^{n+1})^{\ell+1} = \frac{\alpha}{2(1+\alpha)}\left[(u_{j+1}^{n+1})^{\ell} + (u_{j-1}^{n+1})^{\ell+1}\right] + \frac{b^n}{1+\alpha}$$

$\longrightarrow$
- すべてのαについて収束.
- 収束速度は Jacobi 法の2倍.