計算機で偏微分方程式を解こう

目次

- 計算機で偏微分方程式を解く

計算機で偏微分方程式を解く
はじめに

- 下の方程式を計算機を使って解こう.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x}\left(-D\frac{\partial T}{\partial x}\right) = D\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

- この手の方程式の数値解法は複数ある. ここでは下の二つの方法を考える.
  - 有限差分法
    - オイラー法(時間前進差分)
    - 時間後退差分
  - 有限体積法

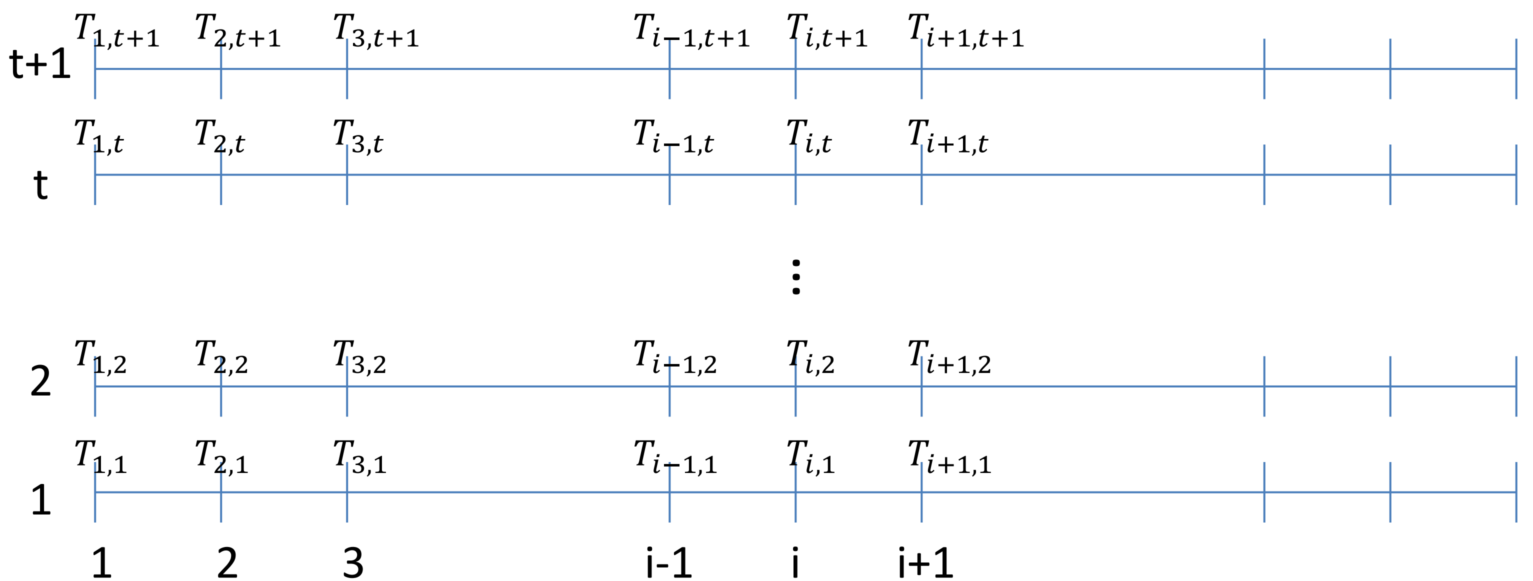
計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (1)

- 微分方程式を計算機を使って解くためには, 離散化する必要がある.
  - つまり, 連続的な温度分布,
    $$T = T(x, t)$$
    は, 多数の離散的な値,
    $$T = T(x_1, t_1), T(x_2, t_1), \ldots,$$
    $$T(x_1, t_2), T(x_2, t_2), \ldots$$
    で表現される.

計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (2)

- ここで, 下のように書くことにする.

$$T_{1,1} = T(x_1, t_1), \qquad T_{2,1} = T(x_2, t_1), \ldots$$
$$T_{1,2} = T(x_1, t_2), \qquad T_{2,2} = T(x_2, t_2), \ldots$$



計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (3)

- 微分はどのように離散化された形で表現されるのか?
- 微分の定義を思い出してみよう.

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{T(x,t+\Delta t) - T(x,t)}{\Delta t}$$

  – そこで, 下のように離散化しよう.

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t} \sim \frac{T(x,t+\Delta t) - T(x,t)}{\Delta t}$$

計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (4)

- しかし, この説明はテキトー.
  - テイラー展開の式展開から求めるのが「正しい」.

$$T(x,t+\Delta t)=T(x,t)+\frac{\partial T(x,t)}{\partial t}(\Delta t)+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial t^2}(\Delta t)^2+\cdots$$

より

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t}=\frac{T(x,t+\Delta t)-T(x,t)}{\Delta t}+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial t^2}(\Delta t)+\cdots$$

したがって,

$$\frac{\partial T(x,t)}{\partial t}\sim\frac{T(x,t+\Delta t)-T(x,t)}{\Delta t}$$

の離散化は, $O(\Delta t)$ の誤差があることになる.

計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (5)

- 同様に, t の時刻の値を用いれば, 右辺は下のように離散化される.

$$D\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \sim D\frac{T(x+\Delta x,t)-2T(x,t)+T(x-\Delta x,t)}{(\Delta x)^2}$$

  – なお, この時の誤差は, $O\left((\Delta x)^2\right)$ である.

- 両辺を合わせると下のようになる.

$$\frac{T(x,t+\Delta t)-T(x,t)}{\Delta t} = D\frac{T(x+\Delta x,t)-2T(x,t)+T(x-\Delta x,t)}{(\Delta x)^2}$$

- さらに, 先のページの記法を用いると下のようになる.

$$\frac{T_{i,l+1}-T_{i,l}}{\Delta t} = D\frac{T_{i+1,l}-2T_{i,l}+T_{i-1,l}}{(\Delta x)^2}$$

計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (6)

- 次のプログラムは, 0≦x≦1 において, T = sin(x) の分布を出力する. このプログラムを作成して実行してみよう.

```
program diffeq
  implicit none
  real(8), parameter :: pi = acos(-1.0d0)
  integer, parameter :: nx = 101
  real(8) :: x_X(nx)
  real(8) :: x_Temp(nx)
  real(8) :: x_TempN(nx)
  real(8) :: DelX = 1.0d0 / dble(nx)
  real(8) :: DTime = 1.0d-6
  real(8) :: DiffCoef = 1.0d0
  integer :: i
```

右に続く

```
  do i = 1, nx
    x_X(i) = DelX * dble(i-1)
  end do
  do i = 1, nx
    x_Temp(i) = sin(pi*x_X(i))
  end do
  do i = 1, nx
    write( 6, * ) 0.0d0, x_X(i), x_Temp(i)
  end do
end program diffeq
```

練習問題

- 先のページのプログラムを基にして, 拡散方程式を解くプログラムを作りなさい. ただし, 初期条件は, $T(x,0) = \sin(\pi x)$ とし, 境界条件は, $T(0,t) = T(1,t) = 0$ とすること.
  1. まずは, t = 1e-6 s 後の T の分布を求めると良い.
  2. 次に, さらに時間が進んだ後の T の分布を求めると良い.

計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (7)

- これまで, 離散化した式で, 安定に計算できるかどうかを検討していなかった. ここでは, von Neumann の安定性解析によって, 安定に計算できる条件を考えよう.
- これまでの結果により, 拡散方程式は下のように離散化される.

$$\frac{T_{i,l+1} - T_{i,l}}{\Delta t} = D\,\frac{T_{i+1,l} - 2T_{i,l} + T_{i-1,l}}{(\Delta x)^2}$$

- 後々の式変形のため, ここでは i を j で置き換える.（虚数単位と区別できないので.）

$$\frac{T_{j,l+1} - T_{j,l}}{\Delta t} = D\,\frac{T_{j+1,l} - 2T_{j,l} + T_{j-1,l}}{(\Delta x)^2}$$

計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (8)

- この離散化式の解を下のように仮定しよう.

$$T_{j,l+1} = AT_{j,l} = A\tilde{T}_m e^{ik_m x_j} = A\tilde{T}_m e^{i\frac{m}{N(\Delta x)}j(\Delta x)} = A\tilde{T}_m e^{i\frac{mj}{N}}$$

  – つまり, 下のような解を考える.
    - x 方向には波数 m の波型
    - 1 時間ステップ計算すると, 解の振幅は A 倍される.
      – A は解の増幅率.
- このとき,「安定が計算できる」とは, 任意の波数に対して下の条件を満たすことである.

$$|A| \leq 1$$

計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (9)

- 先ほどの解を離散化式に代入.
  - つまり,

$$\frac{T_{j,l+1} - T_{j,l}}{\Delta t} = D\,\frac{T_{j+1,l} - 2T_{j,l} + T_{j-1,l}}{(\Delta x)^2}$$

において,

$$T_{j,l+1} = A\tilde{T}_m e^{i\frac{mj}{N}} = AT_{j,l}$$

$$T_{j-1,l} = \tilde{T}_m e^{i\frac{m(j-1)}{N}} = T_{j,l} e^{-i\frac{m}{N}}$$

$$T_{j+1,l} = \tilde{T}_m e^{i\frac{m(j+1)}{N}} = T_{j,l} e^{i\frac{m}{N}}$$

であることを用いると,

計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (10)

$$\frac{AT_{j,l} - T_{j,l}}{\Delta t} = D\,\frac{T_{j,l}e^{i\frac{m}{N}} - 2T_{j,l} + T_{j,l}e^{-i\frac{m}{N}}}{(\Delta x)^2}$$

より,

$$\frac{A-1}{\Delta t} = D\,\frac{e^{i\frac{m}{N}} - 2 + e^{-i\frac{m}{N}}}{(\Delta x)^2} = D\,\frac{2\cos\frac{m}{N} - 2}{(\Delta x)^2}$$

$$A = 1 + 2\frac{(\Delta t)}{\frac{(\Delta x)^2}{D}}\left(\cos\frac{m}{N} - 1\right)$$

$$= 1 - 4\frac{(\Delta t)}{\frac{(\Delta x)^2}{D}}\sin^2\frac{m}{2N}$$

計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (11)

- 以上より, すべての波数に対して$|A| \leq 1$を満たすためには,

$$|A| = \left| 1 - 4 \frac{(\Delta t)}{\frac{(\Delta x)^2}{D}} \sin^2 \frac{m}{2N} \right| \leq 1$$

より,

$$(\Delta t) \leq \frac{1}{2} \frac{(\Delta x)^2}{D}$$

となる. つまり, 安定に計算するためには, 時間, 空間間隔に制限がある.

練習問題

- これまでに作った拡散方程式を解くプログラムを用いて, 時間刻みの値を変化させたときの計算結果の振る舞いを調べなさい.

計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (12)

- 先の離散化では, 右辺に t の時刻の値を用いた.

$$\frac{T_{i,l+1} - T_{i,l}}{\Delta t} = D \frac{T_{i+1,l} - 2T_{i,l} + T_{i-1,l}}{(\Delta x)^2}$$

- しかし, 右辺に t+1 の時刻の値を用いても, 定式化常は何ら問題はない.

$$\frac{T_{i,l+1} - T_{i,l}}{\Delta t} = D \frac{T_{i+1,l+1} - 2T_{i,l+1} + T_{i-1,l+1}}{(\Delta x)^2}$$

$$-\frac{D}{(\Delta x)^2} T_{i-1,l+1} + \left\{\frac{1}{\Delta t} + \frac{2D}{(\Delta x)^2}\right\} T_{i,l+1} - \frac{D}{(\Delta x)^2} T_{i+1,l+1} = \frac{1}{\Delta t} T_{i,l}$$

計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (13)

- 以上より, 下の連立方程式を解けばよい.

$$T_{1,l+1} = T_1$$

$$-\frac{D}{(\Delta x)^2}T_{1,l+1} + \left\{\frac{1}{\Delta t} + \frac{2D}{(\Delta x)^2}\right\}T_{2,l+1} - \frac{D}{(\Delta x)^2}T_{3,l+1} = \frac{1}{\Delta t}T_{2,l}$$

$$-\frac{D}{(\Delta x)^2}T_{2,l+1} + \left\{\frac{1}{\Delta t} + \frac{2D}{(\Delta x)^2}\right\}T_{3,l+1} - \frac{D}{(\Delta x)^2}T_{4,l+1} = \frac{1}{\Delta t}T_{3,l}$$

$$-\frac{D}{(\Delta x)^2}T_{3,l+1} + \left\{\frac{1}{\Delta t} + \frac{2D}{(\Delta x)^2}\right\}T_{4,l+1} - \frac{D}{(\Delta x)^2}T_{5,l+1} = \frac{1}{\Delta t}T_{4,l}$$

$$\cdots$$

$$-\frac{D}{(\Delta x)^2}T_{i-1,l+1} + \left\{\frac{1}{\Delta t} + \frac{2D}{(\Delta x)^2}\right\}T_{i,l+1} - \frac{D}{(\Delta x)^2}T_{i+1,l+1} = \frac{1}{\Delta t}T_{i,l}$$

計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (14)

- 整理.

$$
\begin{aligned}
&T_{1,l+1} &&= T_1 \\
&-\frac{D}{(\Delta x)^2}T_{1,l+1} + \left\{\frac{1}{\Delta t} + \frac{2D}{(\Delta x)^2}\right\}T_{2,l+1} - \frac{D}{(\Delta x)^2}T_{3,l+1} &&= \frac{1}{\Delta t}T_{2,l} \\
&\qquad -\frac{D}{(\Delta x)^2}T_{2,l+1} + \left\{\frac{1}{\Delta t} + \frac{2D}{(\Delta x)^2}\right\}T_{3,l+1} - \frac{D}{(\Delta x)^2}T_{4,l+1} &&= \frac{1}{\Delta t}T_{3,l} \\
&\qquad\qquad -\frac{D}{(\Delta x)^2}T_{3,l+1} + \left\{\frac{1}{\Delta t} + \frac{2D}{(\Delta x)^2}\right\}T_{4,l+1} - \frac{D}{(\Delta x)^2}T_{5,l+1} &&= \frac{1}{\Delta t}T_{4,l}
\end{aligned}
$$

計算機で偏微分方程式を解く 有限差分法 (15)

- 結局下のように書ける.

$$
\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \\
-\frac{D}{(\Delta x)^2} & \left\{\frac{1}{\Delta t}+\frac{2D}{(\Delta x)^2}\right\} & -\frac{D}{(\Delta x)^2} & 0 & 0 & \cdots \\
0 & -\frac{D}{(\Delta x)^2} & \left\{\frac{1}{\Delta t}+\frac{2D}{(\Delta x)^2}\right\} & -\frac{D}{(\Delta x)^2} & 0 & \\
0 & 0 & -\frac{D}{(\Delta x)^2} & \left\{\frac{1}{\Delta t}+\frac{2D}{(\Delta x)^2}\right\} & -\frac{D}{(\Delta x)^2} & \\
 & \vdots & & & &
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
T_{1,l+1} \\
T_{1,l+1} \\
T_{1,l+1} \\
T_{1,l+1} \\
\\
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
T_1 \\
\frac{1}{\Delta t}T_{2,l} \\
\frac{1}{\Delta t}T_{3,l} \\
\frac{1}{\Delta t}T_{4,l} \\
\\
\end{pmatrix}
$$

練習問題

1. 陰解法を用いた場合の線形安定性解析を行い, 安定な計算のための条件を求めなさい.
2. 先のページの説明に基づき, 陰解法で拡散方程式を解くプログラムを作りなさい. ただし, 初期条件は, $T(x,0) = \sin(\pi x)$ とし, 境界条件は, $T(0,t) = T(1,t) = 0$ とすること.

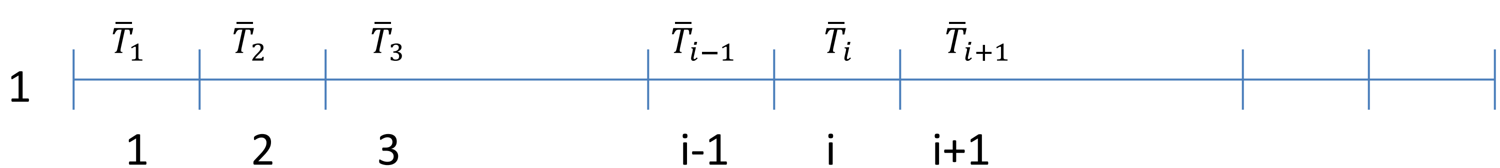
計算機で偏微分方程式を解く
有限体積法 (1)

- 下の方程式は異なる方法でも離散化できる.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -\frac{\partial F}{\partial x} = -\frac{\partial}{\partial x}\left(-D\frac{\partial T}{\partial x}\right) = D\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$$

- 下のように領域を区切り, $x_i - \frac{\Delta x}{2} \leq x_i \leq x_i + \frac{\Delta x}{2}$ の範囲で上の方程式(の最初の方)を平均する.

$$\frac{\partial \bar{T}(x_i)}{\partial t} = -\frac{F\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}\right) - F\left(x_i - \frac{\Delta x}{2}\right)}{\Delta x}$$



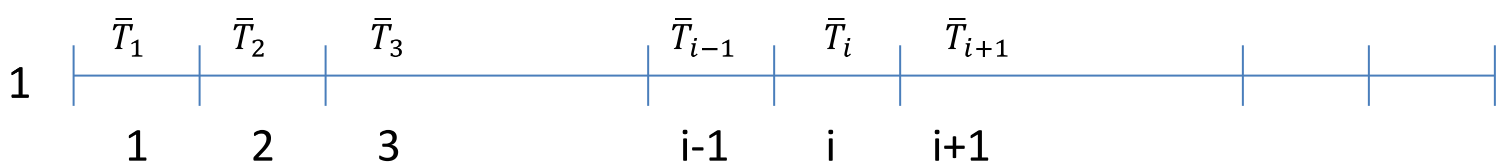
計算機で偏微分方程式を解く
有限体積法 (2)

- ここでさらに, 下のように表現することにする.

$$F\left(x_i + \frac{\Delta x}{2}\right) = -D\,\frac{\bar{T}(x_i + 1) - \bar{T}(x_i)}{\Delta x}$$

- これより, 方程式は下のようになる.

$$\frac{\partial \bar{T}(x_i)}{\partial t} = D\,\frac{\bar{T}(x_i - 1) - 2\bar{T}(x_i) + \bar{T}(x_i + 1)}{(\Delta x)^2}$$

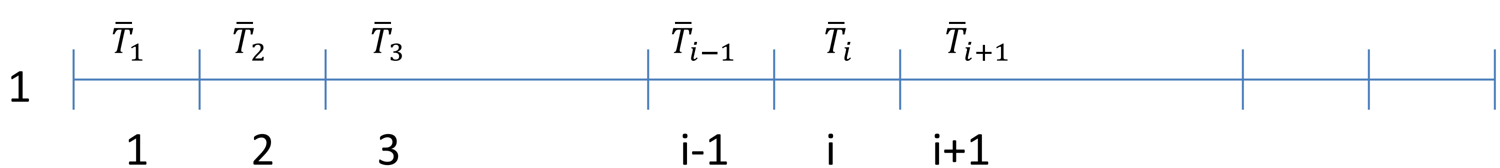


計算機で偏微分方程式を解く 有限体積法 (3)

- 左辺は差分法で離散化すると, 下のようになる.

$$\frac{\bar{T}(x_i, t_{l+1}) - \bar{T}(x_i, t_l)}{\Delta t} = D\frac{\bar{T}(x_i - 1) - 2\bar{T}(x_i) + \bar{T}(x_i + 1)}{(\Delta x)^2}$$

- これは, 有限差分法で離散化した式と同じ形をしているが, 中身は若干意味が違う.



練習問題

- 先のページの説明に基づき, 有限体積法で拡散方程式を解くプログラムを作りなさい. ただし, 初期条件は, $T(x,0) = \sin(\pi x)$ とし, 境界条件は, $T(0,t) = T(1,t) = 0$ とすること.