

数理工学実験
熱方程式の差分法

滝本 亘（学籍番号 1029-33-1175）

2022 年 11 月 14 日

1 問題 1 (拡散方程式の数値解)

1.1 はじめに

拡散方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) = \frac{\partial^2}{\partial x^2}u(x, t) \quad (L = 10) \quad (1.1)$$

を初期条件

$$u_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{1}{2}(x-5)^2} \quad (1.2)$$

の下で数値的に解く。以下の 4 つの場合を考えよ。

(1)

オイラー陽解法

$$u_j^{n+1} - u_j^n \simeq \frac{\Delta t}{\Delta x^2}(u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) \quad (1.3)$$

で境界条件は Dirichlet 境界条件 $u_L = u_R = 0$ を用いて数値的に解け。

刻み幅は $\Delta t = 0.01$, $\Delta x = 0.5(N = 20)$ とせよ。

(2)

オイラー陽解法 (1.3) で境界条件は Neumann 境界条件 $J_L = J_R = 0$ を用いて数値的に解け。

刻み幅は $\Delta t = 0.01$, $\Delta x = 0.5(N = 20)$ とせよ。

(3)

クラנק・ニコルソン法

$$u_j^{n+1} - u_j^n \simeq \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x^2}(u_{j-1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j+1}^{n+1}) + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x^2}(u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) \quad (1.4)$$

で境界条件は Dirichlet 境界条件 $u_L = u_R = 0$ を用いて数値的に解け。

刻み幅は $\Delta t = 0.01$, $\Delta x = 0.05(N = 200)$ とせよ。

(4)

クラנק・ニコルソン法 (1.4) で境界条件は Neumann 境界条件 $J_L = J_R = 0$ を用いて数値的に解け。

刻み幅は $\Delta t = 0.01$, $\Delta x = 0.05(N = 200)$ とせよ。

いずれの場合も $t = 1, 2, 3, 4, 5(n = 100, 200, 300, 400, 500)$ における $u(x, t)$ の値を出力すること。また、得られた $u(x, t)$ の値をそれぞれ一つの図 (横軸 x , 縦軸 u) に図示せよ。

1.2 原理・方法の詳細

1.2.1 オイラー陽解法

1次元空間内での拡散を考える。微粒子の濃度を $C(x, t)$ とする。微粒子の流れを $J(x, t)$ とすると、粒子数の保存を表す連続の式は

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} J(x, t) \quad (1.5)$$

と書ける。また、流れ $J(x, t)$ は濃度勾配に比例すると仮定すると

$$J(x, t) = -D \frac{\partial}{\partial x} C(x, t) \quad (1.6)$$

と表される。これらから拡散方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x, t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} C(x, t) \quad (1.7)$$

が得られる。

以下では $D = 1$ とした拡散方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) \quad (1.8)$$

を考える。

拡散方程式 (1.8) を解くためには初期条件

$$u(x, 0) = u_0(x) \quad (1.9)$$

と境界 $x = 0, L$ における境界条件を考える必要がある。代表的な境界条件には

・ Dirichlet 境界条件: 境界上での u の値が指定されている。

$$u(0, t) = u_L \quad (1.10)$$

$$u(L, t) = u_R \quad (1.11)$$

・ Neumann 境界条件: 境界上での u の微分の値が指定されている。

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = J_L \quad (1.12)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(L, t) = J_R \quad (1.13)$$

の2つがある。

ここでは、時間と空間を離散化して拡散方程式 (1.8) を数值的に解くことを考える。時間と空間の刻み幅をそれぞれ $\Delta t, \Delta x$ とする。($L = N\Delta x$) の離散化された時空間上での平均濃度を

$$u_j^n \equiv \frac{1}{\Delta x} \int_{(j-1)\Delta x}^{j\Delta x} u(y, n\Delta t) dy \quad (1.14)$$

と書く。 u_j^n は区間 $[(j-1)\Delta x, j\Delta x]$ に対して割り当てられていることに注意が必要である。また、 u_0^n, u_{N+1}^n は境界条件のために用いる。方程式 (1.5) を $[n\Delta t, (n+1)\Delta t]$ で積分すると

$$u(x, (n+1)\Delta t) - u(x, n\Delta t) = - \int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} \frac{\partial}{\partial x} J(x, s) ds \quad (1.15)$$

となる。式 (1.15) の右辺の積分を時刻 $n\Delta t$ の値で近似すると

$$u(x, (n+1)\Delta t) - u(x, n\Delta t) \simeq -\Delta t \frac{\partial}{\partial x} J(x, n\Delta t) \quad (1.16)$$

となる。この場合

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} - u_j^n &\simeq -\frac{1}{\Delta x} \int_{(j-1)\Delta x}^{j\Delta x} \Delta t \frac{\partial}{\partial y} J(y, n\Delta t) dy \\ &= -\frac{\Delta t}{\Delta x} [J(j\Delta x, n\Delta t) - J((j-1)\Delta x, n\Delta t)] \end{aligned} \quad (1.17)$$

となる。ただし式 (1.6) より

$$J(j\Delta x, n\Delta t) = -\frac{\partial u}{\partial x}(j\Delta x, n\Delta t) \quad (1.18)$$

である。この量はさらに

$$J(j\Delta x, n\Delta t) \simeq -\frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} \quad (1.19)$$

と近似されるので、差分方程式

$$u_j^{n+1} - u_j^n \simeq \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) \quad (1.20)$$

を得る。

式 (1.20) のような最も単純な差分方程式による数値解法がオイラー陽解法である。以下では

$$c \equiv \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \quad (1.21)$$

と書くことにする。

初期条件は $\{u_j^0\}_{j=1}^N$ と表される。また、境界条件は

• Dirichlet 境界条件:

$$u_0^n = u_L \quad (1.22)$$

$$u_{N+1}^n = u_R \quad (1.23)$$

• Neumann 境界条件:

$$u_0^n = u_1^n - J_L \Delta x \quad (1.24)$$

$$u_{N+1}^n = u_N^n + J_R \Delta x \quad (1.25)$$

と表される。

1.2.2 クランク・ニコルソン法

式 (1.15) において積分をより精度の良い台形公式で近似すると

$$u(x, (n+1)\Delta t) - u(x, n\Delta t) \simeq -\frac{\Delta t}{2} \left[\frac{\partial}{\partial x} J(x, (n+1)\Delta t) + \frac{\partial}{\partial x} J(x, n\Delta t) \right] \quad (1.26)$$

となる。これを用いると

$$u_j^{n+1} - u_j^n \simeq \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j-1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j+1}^{n+1}) + \frac{1}{2} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n) \quad (1.27)$$

を得る。

式 (1.27) がクランク・ニコルソン法である。この方法はオイラー陽解法よりも精度が良くなっている。式 (1.27) を書き直すと

$$-\frac{c}{2}u_{j-1}^{n+1} + (1+c)u_j^{n+1} - \frac{c}{2}u_{j+1}^{n+1} = (1-c)u_j^n + \frac{c}{2}u_{j-1}^n + \frac{c}{2}u_{j+1}^n \quad (1.28)$$

となる。ただし、境界条件は

• Dirichlet 境界条件: $u_0^n = u_L$, $u_{N+1}^n = u_R$ より

$$(1+c)u_1^{n+1} - \frac{c}{2}u_2^{n+1} = (1-c)u_1^n + cu_L + \frac{c}{2}u_2^n \quad (1.29)$$

$$-\frac{c}{2}u_{N-1}^{n+1} + (1+c)u_N^{n+1} = (1-c)u_N^n + cu_R + \frac{c}{2}u_{N-1}^n \quad (1.30)$$

• Neumann 境界条件: $u_0^n = u_1^n - J_L \Delta x$, $u_{N+1}^n = u_N^n + J_R \Delta x$ より

$$\left(1 + \frac{c}{2}\right)u_1^{n+1} - \frac{c}{2}u_2^{n+1} = \left(1 - \frac{c}{2}\right)u_1^n - cJ_L \Delta x + \frac{c}{2}u_2^n \quad (1.31)$$

$$-\frac{c}{2}u_{N-1}^{n+1} + \left(1 + \frac{c}{2}\right)u_N^{n+1} = \left(1 - \frac{c}{2}\right)u_N^n + cJ_R \Delta x + \frac{c}{2}u_{N-1}^n \quad (1.32)$$

である。これらの連立方程式を解く際には LU 分解という方法が用いられる。

式 (1.28) と境界条件 (1.29), (1.30) あるいは (1.31), (1.32) を合わせた連立方程式は $\mathbf{x} \equiv (u_1^{n+1}, \dots, u_N^{n+1})^T$ と既知な量を成分とするベクトル \mathbf{z} 及び、ある行列 \mathbf{A} を用いて

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{z} \quad (1.33)$$

のように表される。 \mathbf{A} は Dirichlet 境界条件では

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1+c & -\frac{c}{2} & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{c}{2} & 1+c & -\frac{c}{2} & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -\frac{c}{2} & 1+c & -\frac{c}{2} \\ 0 & \cdots & 0 & -\frac{c}{2} & 1+c \end{pmatrix} \quad (1.34)$$

Neumann 境界条件では

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1+\frac{c}{2} & -\frac{c}{2} & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{c}{2} & 1+c & -\frac{c}{2} & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -\frac{c}{2} & 1+c & -\frac{c}{2} \\ 0 & \cdots & 0 & -\frac{c}{2} & 1+\frac{c}{2} \end{pmatrix} \quad (1.35)$$

となる。また、 \mathbf{z} は Dirichlet 境界条件では

$$\begin{aligned} z_1 &= (1-c)u_1^n + cu_L + \frac{c}{2}u_2^n \\ z_j &= (1-c)u_j^n + \frac{c}{2}u_{j-1}^n + \frac{c}{2}u_{j+1}^n \quad (2 \leq j \leq N-1) \\ z_N &= (1-c)u_N^n + cu_R + \frac{c}{2}u_{N-1}^n \end{aligned} \quad (1.36)$$

Neumann 境界条件では

$$\begin{aligned}
z_1 &= (1 - \frac{c}{2})u_1^n + cJ_L\Delta x + \frac{c}{2}u_2^n \\
z_j &= (1 - c)u_j^n + \frac{c}{2}u_{j-1}^n + \frac{c}{2}u_{j+1}^n \quad (2 \leq j \leq N-1) \\
z_N &= (1 - \frac{c}{2})u_N^n + cJ_R\Delta x + \frac{c}{2}u_{N-1}^n
\end{aligned} \tag{1.37}$$

である。式 (1.33) から \mathbf{x} を求めるのが目標である。

LU 分解とは \mathbf{A} を上三角行列 \mathbf{U} と下三角行列 \mathbf{L} の積 $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ 分解することである。今、 \mathbf{A} を

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & \cdots & 0 \\ c_1 & a_2 & b_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & c_{N-2} & a_{N-1} & b_{N-1} \\ 0 & \cdots & 0 & c_{N-1} & a_N \end{pmatrix} \tag{1.38}$$

のように書く。

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ c_1 & \alpha_2 & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & c_{N-2} & \alpha_{N-1} & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & c_{N-1} & \alpha_N \end{pmatrix} \tag{1.39}$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \beta_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & 0 & 1 & \beta_{N-1} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{1.40}$$

と置くと、

$$\mathbf{LU} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_1\beta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ c_1 & \alpha_2 + c_1\beta_1 & \alpha_2\beta_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & c_{N-2} & \alpha_{N-1} + c_{N-2}\beta_{N-2} & \alpha_{N-1}\beta_{N-1} \\ 0 & \cdots & 0 & c_{N-1} & \alpha_N + c_{N-1}\beta_{N-1} \end{pmatrix} \tag{1.41}$$

となる。式 (1.38) と式 (1.41) を比較すると

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= a_1 \\
\beta_1 &= \frac{b_1}{\alpha_1} \\
\alpha_2 &= a_2 - c_1\beta_1 \\
\beta_2 &= \frac{b_2}{\alpha_2} \\
&\vdots \\
\alpha_{N-1} &= a_{N-1} - c_{N-2}\beta_{N-2} \\
\beta_{N-1} &= \frac{b_{N-1}}{\alpha_{N-1}} \\
\alpha_N &= a_N - c_{N-1}\beta_{N-1}
\end{aligned} \tag{1.42}$$

のように昇順に L と U を求められる。

次に LU 分解を用いて連立方程式 (1.33) を解く。 $LU\mathbf{x} = \mathbf{z}$ において $U\mathbf{x} \equiv \mathbf{y}$ とおくと

$$L\mathbf{y} = \mathbf{z} \tag{1.43}$$

となる。この式から \mathbf{y} を求め、 $U\mathbf{x} = \mathbf{y}$ から \mathbf{x} を求める。まず $L\mathbf{y} = \mathbf{z}$ は

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ c_1 & \alpha_2 & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & c_{N-2} & \alpha_{N-1} & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & c_{N-1} & \alpha_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_{N-1} \\ z_N \end{pmatrix} \tag{1.44}$$

より、 \mathbf{y} は昇順に

$$\begin{aligned}
y_1 &= \frac{z_1}{\alpha_1} \\
y_2 &= \frac{z_2 - c_1 y_1}{\alpha_2} \\
&\vdots \\
y_{N-1} &= \frac{z_{N-1} - c_{N-2} y_{N-2}}{\alpha_{N-1}} \\
y_N &= \frac{z_N - c_{N-1} y_{N-1}}{\alpha_N}
\end{aligned} \tag{1.45}$$

のように決まる。次に $U\mathbf{x} = \mathbf{y}$ は

$$\begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \beta_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & 0 & 1 & \beta_{N-1} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{pmatrix} \tag{1.46}$$

より、 x は降順に

$$\begin{aligned}
 x_N &= y_N \\
 x_{N-1} &= y_{N-1} - \beta_{N-1}x_N \\
 &\vdots \\
 x_2 &= y_2 - \beta_2x_3 \\
 x_1 &= y_1 - \beta_1x_2
 \end{aligned} \tag{1.47}$$

のように求まる。

1.3 実験方法

この問題では式 (1.14) のように u_j^n に区間 $[(j-1)\Delta x, j\Delta x]$ を割り当てるという離散化を行っている。従って、初期条件は

$$u_j^0 = \frac{1}{2}[u_0((j-1)\Delta x) + u_0(j\Delta x)] \tag{1.48}$$

であると考ええる。また、 $\{u_j^n\}$ をプロットする場合は、各 j に対応する座標として $x = (j-1/2)\Delta x$ を採用する。

(1)

```

1  #include <stdio.h>
2  #include <math.h>
3  #define N 20
4  #define M 500
5
6  double u0(double x){
7      return exp(-0.5*(x-5)*(x-5))/sqrt(2*M_PI);
8  }
9
10 double FE(double dx, double dt){
11
12     double c = dt/(dx*dx);
13     double u[M+1][N+2];
14
15     for(int j=1; j<=N; j++){
16         u[0][j] = (u0((j-1)*dx)+u0(j*dx))/2;
17     }
18
19     u[0][0] = 0;
20     u[0][N+1] = 0;
21
22     for(int i=0; i<M; i++){
23
24         for(int j=1; j<=N; j++){
25             u[i+1][j] = u[i][j] + c*(u[i][j-1]-2*u[i][j]+u[i][j+1]);
26         }
27
28         u[i+1][0] = 0;
29         u[i+1][N+1] = 0;
30     }
31
32     FILE *fp;
33     fp = fopen("1-1", "w");
34

```



```

35     for(int j=1; j<=N; j++){
36         printf("%.2f", j*dx-0.25);
37         fprintf(fp, "%.2f", j*dx-0.25);
38
39         for(int k=1; k<=5; k++){
40             printf("&%.8f", u[100*k][j]);
41             fprintf(fp, "\%.8f", u[100*k][j]);
42         }
43
44         printf("\\\\\\n");
45         fprintf(fp, "\n");
46     }
47
48     fclose(fp);
49 }
50
51 int main(void){
52     double dt = 0.01;
53     double dx = 0.5;
54
55     FE(dx, dt);
56 }

```

(2)

```

1  #include <stdio.h>
2  #include <math.h>
3  #define N 20
4  #define M 500
5
6  double u0(double x){
7      return exp(-0.5*(x-5)*(x-5))/sqrt(2*M_PI);
8  }
9
10 double FE(double dx, double dt){
11
12     double c = dt/(dx*dx);
13     double u[M+1][N+2];
14
15     for(int j=1; j<=N; j++){
16         u[0][j] = (u0((j-1)*dx)+u0(j*dx))/2;
17     }
18
19     u[0][0] = u[0][1];
20     u[0][N+1] = u[0][N];
21
22     for(int i=0; i<M; i++){
23
24         for(int j=1; j<=N; j++){
25             u[i+1][j] = u[i][j] + c*(u[i][j-1]-2*u[i][j]+u[i][j+1]);
26         }
27
28         u[i+1][0] = u[i+1][1];
29         u[i+1][N+1] = u[i+1][N];
30     }
31
32     FILE *fp;
33     fp = fopen("1-2", "w");
34
35     for(int j=1; j<=N; j++){
36         printf("%.2f", j*dx-0.25);
37         fprintf(fp, "%.2f", j*dx-0.25);
38
39         for(int k=1; k<=5; k++){
40             printf("&%.8f", u[100*k][j]);

```

```

41         fprintf(fp, "% .8f", u[100*k][j]);
42     }
43
44     printf("\\\\\\n");
45     fprintf(fp, "\\n");
46 }
47
48 fclose(fp);
49 }
50
51 int main(void){
52     double dt = 0.01;
53     double dx = 0.5;
54
55     FE(dx, dt);
56 }

```

(3)

```

1  #include<stdio.h>
2  #include<math.h>
3  #define N 200
4  #define M 500
5
6  double u0(double x){
7      return exp(-0.5*(x-5)*(x-5))/sqrt(2*M_PI);
8  }
9
10 double CK(double dx, double dt){
11
12     double c = dt/(dx*dx);
13     double u[M+1][N+2];
14
15     for(int j=1; j<=N; j++){
16         u[0][j] = (u0((j-1)*dx)+u0(j*dx))/2;
17     }
18
19     u[0][0] = 0;
20     u[0][N+1] = 0;
21
22     double a_n[N];
23     double b_n[N-1];
24     double c_n[N-1];
25
26     for(int j=0; j<N-1; j++){
27         a_n[j]=1+c;
28         b_n[j]=-c/2;
29         c_n[j]=-c/2;
30     }
31     a_n[N-1]=1+c;
32
33     double a[N];
34     double b[N-1];
35
36     a[0]=a_n[0];
37     for(int j=1; j<N; j++){
38         b[j-1]=b_n[j-1]/a[j-1];
39         a[j]=a_n[j]-c_n[j-1]*b[j-1];
40     }
41
42     for(int i=0; i<M; i++){
43
44         double z[N];
45
46         z[0]=(1-c)*u[i][1]+(c/2)*u[i][2];

```

```

47     for(int j=1; j<N-1; j++){
48         z[j]=(1-c)*u[i][j+1]+(c/2)*u[i][j]+(c/2)*u[i][j+2];
49     }
50     z[N-1]=(1-c)*u[i][N]+(c/2)*u[i][N-1];
51
52     double y[N];
53
54     y[0]=z[0]/a[0];
55     for(int j=1; j<N; j++){
56         y[j]=(z[j]-c.n[j-1]*y[j-1])/a[j];
57     }
58
59     u[i+1][N]=y[N-1];
60     for(int j=N-1; j>0; j--){
61         u[i+1][j]=y[j-1]-b[j-1]*u[i+1][j+1];
62     }
63     u[i+1][0] = 0;
64     u[i+1][N+1] = 0;
65
66 }
67
68 FILE *fp;
69 fp = fopen("1-3","w");
70
71 for(int j=1; j<=N; j++){
72     printf("%.3f", j*dx-0.025);
73     fprintf(fp, "%.3f", j*dx-0.025);
74
75     for(int k=1; k<=5; k++){
76         printf("&%.8f", u[100*k][j]);
77         fprintf(fp, "%8f", u[100*k][j]);
78     }
79
80     printf("\\\\\\n");
81     fprintf(fp, "\\n");
82 }
83
84 fclose(fp);
85 }
86
87 int main(void){
88     double dt = 0.01;
89     double dx = 0.05;
90
91     CK(dx, dt);
92 }

```

(4)

```

1  #include<stdio.h>
2  #include<math.h>
3  #define N 200
4  #define M 500
5
6  double u0(double x){
7      return exp(-0.5*(x-5)*(x-5))/sqrt(2*M_PI);
8  }
9
10 double CK(double dx, double dt){
11
12     double c = dt/(dx*dx);
13     double u[M+1][N+2];
14
15     for(int j=1; j<=N; j++){
16         u[0][j] = (u0((j-1)*dx)+u0(j*dx))/2;

```

```

17     }
18
19     u[0][0] = u[0][1];
20     u[0][N+1] = u[0][N];
21
22     double a_n[N];
23     double b_n[N-1];
24     double c_n[N-1];
25
26     for(int j=0; j<N-1; j++){
27         a_n[j]=1+c;
28         b_n[j]=-c/2;
29         c_n[j]=-c/2;
30     }
31     a_n[0]=1+c/2;
32     a_n[N-1]=1+c/2;
33
34     double a[N];
35     double b[N-1];
36
37     a[0]=a_n[0];
38     for(int j=1; j<N; j++){
39         b[j-1]=b_n[j-1]/a[j-1];
40         a[j]=a_n[j]-c_n[j-1]*b[j-1];
41     }
42
43     for(int i=0; i<M; i++){
44
45         double z[N];
46
47         z[0]=(1-c/2)*u[i][1]+(c/2)*u[i][2];
48         for(int j=1; j<N-1; j++){
49             z[j]=(1-c)*u[i][j+1]+(c/2)*u[i][j]+(c/2)*u[i][j+2];
50         }
51         z[N-1]=(1-c/2)*u[i][N]+(c/2)*u[i][N-1];
52
53         double y[N];
54
55         y[0]=z[0]/a[0];
56         for(int j=1; j<N; j++){
57             y[j]=(z[j]-c_n[j-1]*y[j-1])/a[j];
58         }
59
60         u[i+1][N]=y[N-1];
61         for(int j=N-1; j>0; j--){
62             u[i+1][j]=y[j-1]-b[j-1]*u[i+1][j+1];
63         }
64         u[i+1][0] = 0;
65         u[i+1][N+1] = 0;
66
67     }
68
69     FILE *fp;
70     fp = fopen("1-4","w");
71
72     for(int j=1; j<=N; j++){
73         printf("%.3f", j*dx-0.025);
74         fprintf(fp, "%.3f", j*dx-0.025);
75
76         for(int k=1; k<=5; k++){
77             printf("&%.8f", u[100*k][j]);
78             fprintf(fp, "_%.8f", u[100*k][j]);
79         }
80
81         printf("\\\\\\n");
82         fprintf(fp, "\\n");
83     }
84

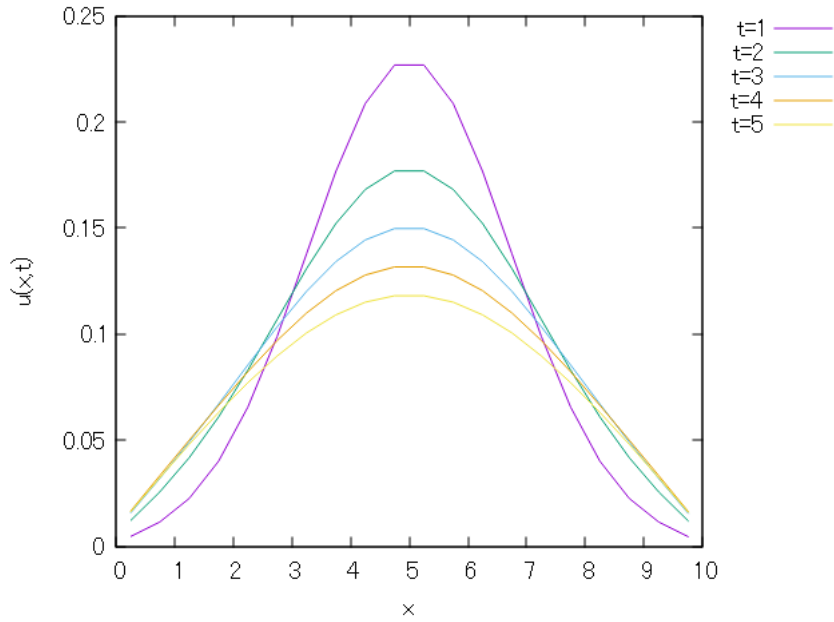
```

```
85     fclose(fp);
86 }
87
88 int main(void){
89     double dt = 0.01;
90     double dx = 0.05;
91
92     CK(dx, dt);
93 }
```

1.4 結果

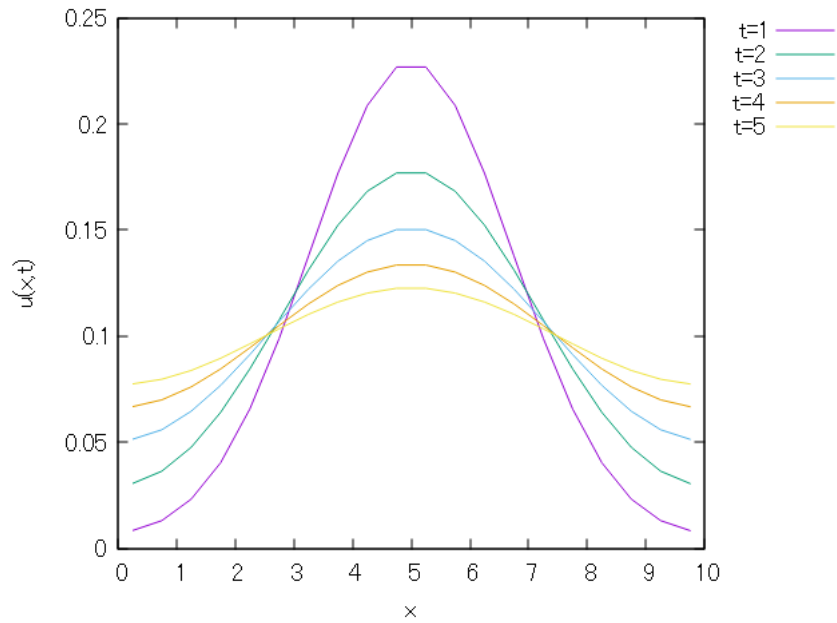
(1)

x	$u(x, 1)$	$u(x, 2)$	$u(x, 3)$	$u(x, 4)$	$u(x, 5)$
0.25	0.00473066	0.01218549	0.01580967	0.01670326	0.01630477
0.75	0.01155420	0.02576286	0.03210569	0.03342273	0.03242227
1.25	0.02266471	0.04185003	0.04920762	0.05009837	0.04813450
1.75	0.04020099	0.06102650	0.06713057	0.06653366	0.06316955
2.25	0.06567331	0.08310940	0.08550295	0.08236481	0.07719194
4.75	0.22675697	0.17685005	0.14972974	0.13170493	0.11810794
5.25	0.22675697	0.17685005	0.14972974	0.13170493	0.11810794
5.75	0.20863758	0.16819439	0.14438659	0.12787507	0.11507050
6.25	0.17667996	0.15213539	0.13422978	0.12047838	0.10914272
6.75	0.13778451	0.13087046	0.12021757	0.10999903	0.10059968
7.25	0.09903642	0.10702863	0.10355947	0.09706705	0.08980993
7.75	0.06567331	0.08310940	0.08550295	0.08236481	0.07719194
8.25	0.04020099	0.06102650	0.06713057	0.06653366	0.06316955
8.75	0.02266471	0.04185003	0.04920762	0.05009837	0.04813450
9.25	0.01155420	0.02576286	0.03210569	0.03342273	0.03242227
9.75	0.00473066	0.01218549	0.01580967	0.01670326	0.01630477



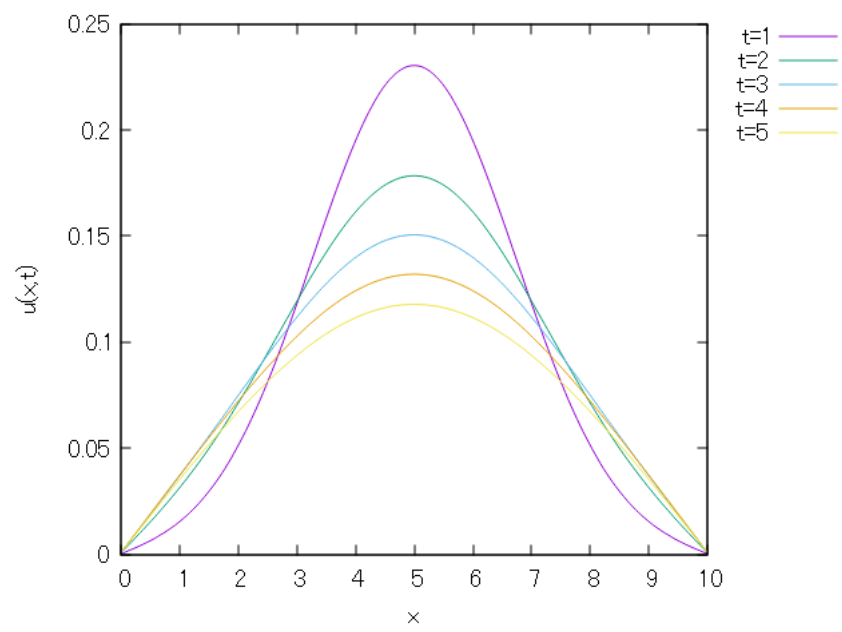
(2)

x	$u(x, 1)$	$u(x, 2)$	$u(x, 3)$	$u(x, 4)$	$u(x, 5)$
0.25	0.00850960	0.03066739	0.05144589	0.06682939	0.07751347
0.75	0.01312011	0.03640481	0.05596939	0.07002702	0.07970402
1.25	0.02327120	0.04770836	0.06466083	0.07612812	0.08387473
1.75	0.04042091	0.06411173	0.07681084	0.08456593	0.08962388
2.25	0.06574809	0.08466488	0.09137206	0.09454500	0.09639525
2.75	0.09906029	0.10778001	0.10700755	0.10510737	0.10353006
3.25	0.13779168	0.13121876	0.12218764	0.11521915	0.11032989
3.75	0.17668199	0.15229131	0.13533900	0.12387171	0.11612510
4.25	0.20863813	0.16826426	0.14503179	0.13018755	0.12034186
4.75	0.22675714	0.17688763	0.15017416	0.13351791	0.12256087
5.25	0.22675714	0.17688763	0.15017416	0.13351791	0.12256087
5.75	0.20863813	0.16826426	0.14503179	0.13018755	0.12034186
6.25	0.17668199	0.15229131	0.13533900	0.12387171	0.11612510
6.75	0.13779168	0.13121876	0.12218764	0.11521915	0.11032989
7.25	0.09906029	0.10778001	0.10700755	0.10510737	0.10353006
7.75	0.06574809	0.08466488	0.09137206	0.09454500	0.09639525
8.25	0.04042091	0.06411173	0.07681084	0.08456593	0.08962388
8.75	0.02327120	0.04770836	0.06466083	0.07612812	0.08387473
9.25	0.01312011	0.03640481	0.05596939	0.07002702	0.07970402
9.75	0.00850960	0.03066739	0.05144589	0.06682939	0.07751347



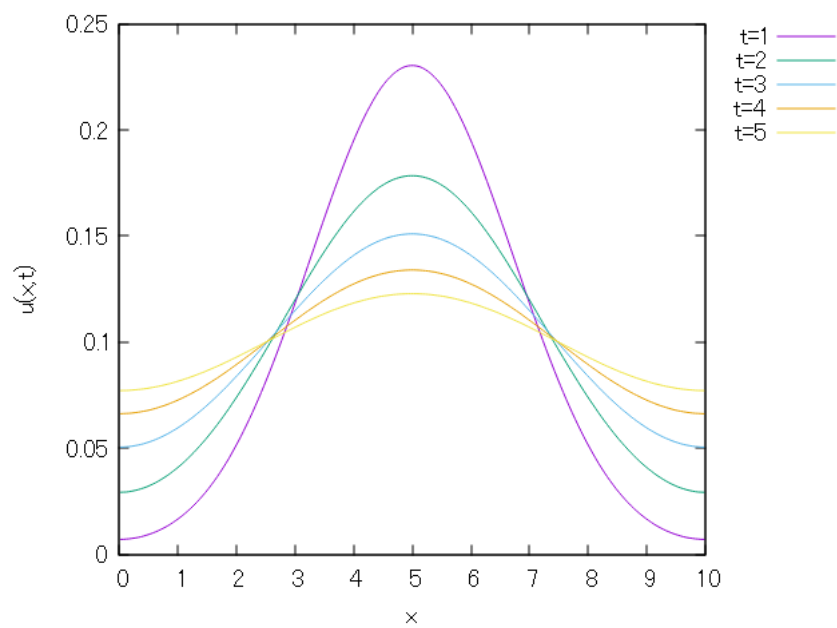
(3)

x	$u(x, 1)$	$u(x, 2)$	$u(x, 3)$	$u(x, 4)$	$u(x, 5)$
0.025	0.00057443	0.00143559	0.00178272	0.00182558	0.00174313
0.075	0.00115145	0.00287264	0.00356582	0.00365107	0.00348597
0.125	0.00173364	0.00431263	0.00534969	0.00547636	0.00522825
0.175	0.00232361	0.00575702	0.00713472	0.00730134	0.00696969
0.225	0.00292393	0.00720726	0.00892127	0.00912593	0.00871000
0.275	0.00353721	0.00866477	0.01070971	0.01095000	0.01044890
0.325	0.00416605	0.01013098	0.01250042	0.01277345	0.01218610
0.375	0.00481304	0.01160728	0.01429372	0.01459617	0.01392132
0.425	0.00548078	0.01309505	0.01608996	0.01641804	0.01565426
0.475	0.00617188	0.01459561	0.01788946	0.01823893	0.01738465
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
4.775	0.22838511	0.17749266	0.15000733	0.13160517	0.11752154
4.825	0.22914769	0.17784863	0.15022643	0.13176369	0.11764889
4.875	0.22972130	0.17811607	0.15039094	0.13188268	0.11774445
4.925	0.23010451	0.17829458	0.15050070	0.13196205	0.11780818
4.975	0.23029635	0.17838391	0.15055561	0.13200175	0.11784005
5.025	0.23029635	0.17838391	0.15055561	0.13200175	0.11784005
5.075	0.23010451	0.17829458	0.15050070	0.13196205	0.11780818
5.125	0.22972130	0.17811607	0.15039094	0.13188268	0.11774445
5.175	0.22914769	0.17784863	0.15022643	0.13176369	0.11764889
5.225	0.22838511	0.17749266	0.15000733	0.13160517	0.11752154
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
9.525	0.00617188	0.01459561	0.01788946	0.01823893	0.01738465
9.575	0.00548078	0.01309505	0.01608996	0.01641804	0.01565426
9.625	0.00481304	0.01160728	0.01429372	0.01459617	0.01392132
9.675	0.00416605	0.01013098	0.01250042	0.01277345	0.01218610
9.725	0.00353721	0.00866477	0.01070971	0.01095000	0.01044890
9.775	0.00292393	0.00720726	0.00892127	0.00912593	0.00871000
9.825	0.00232361	0.00575702	0.00713472	0.00730134	0.00696969
9.875	0.00173364	0.00431263	0.00534969	0.00547636	0.00522825
9.925	0.00115145	0.00287264	0.00356582	0.00365107	0.00348597
9.975	0.00057443	0.00143559	0.00178272	0.00182558	0.00174313



(4)

x	$u(x, 1)$	$u(x, 2)$	$u(x, 3)$	$u(x, 4)$	$u(x, 5)$
0.025	0.00715622	0.02930336	0.05057466	0.06632318	0.07723021
0.075	0.00719989	0.02936193	0.05062108	0.06635593	0.07725258
0.125	0.00728734	0.02947905	0.05071390	0.06642140	0.07729730
0.175	0.00741879	0.02965469	0.05085304	0.06651953	0.07736433
0.225	0.00759457	0.02988880	0.05103838	0.06665022	0.07745359
0.275	0.00781512	0.03018134	0.05126978	0.06681336	0.07756501
0.325	0.00808100	0.03053221	0.05154707	0.06700879	0.07769848
0.375	0.00839284	0.03094134	0.05187001	0.06723634	0.07785386
0.425	0.00875142	0.03140860	0.05223836	0.06749578	0.07803101
0.475	0.00915757	0.03193386	0.05265181	0.06778689	0.07822976
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
4.775	0.22838517	0.17752672	0.15049100	0.13366513	0.12261136
4.825	0.22914775	0.17788149	0.15070122	0.13380095	0.12270168
4.875	0.22972136	0.17814803	0.15085911	0.13390295	0.12276951
4.925	0.23010456	0.17832596	0.15096447	0.13397100	0.12281476
4.975	0.23029640	0.17841498	0.15101718	0.13400504	0.12283740
5.025	0.23029640	0.17841498	0.15101718	0.13400504	0.12283740
5.075	0.23010456	0.17832596	0.15096447	0.13397100	0.12281476
5.125	0.22972136	0.17814803	0.15085911	0.13390295	0.12276951
5.175	0.22914775	0.17788149	0.15070122	0.13380095	0.12270168
5.225	0.22838517	0.17752672	0.15049100	0.13366513	0.12261136
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
9.525	0.00915757	0.03193386	0.05265181	0.06778689	0.07822976
9.575	0.00875142	0.03140860	0.05223836	0.06749578	0.07803101
9.625	0.00839284	0.03094134	0.05187001	0.06723634	0.07785386
9.675	0.00808100	0.03053221	0.05154707	0.06700879	0.07769848
9.725	0.00781512	0.03018134	0.05126978	0.06681336	0.07756501
9.775	0.00759457	0.02988880	0.05103838	0.06665022	0.07745359
9.825	0.00741879	0.02965469	0.05085304	0.06651953	0.07736433
9.875	0.00728734	0.02947905	0.05071390	0.06642140	0.07729730
9.925	0.00719989	0.02936193	0.05062108	0.06635593	0.07725258
9.975	0.00715622	0.02930336	0.05057466	0.06632318	0.07723021



1.5 考察

図より、 $x = 5$ について対象な結果が得られたことが分かる。これは方程式と初期条件の対称性によるものである。

2 問題2 (Fisher 方程式)

2.1 はじめに

拡散方程式に非線形項 $f(u) = u(1 - u)$ を加えた偏微分方程式 (Fisher 方程式)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u(1 - u) + \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (2.1)$$

を考える。この方程式は遺伝学における優性遺伝子の空間伝播を表現するために提案された。初期条件

$$u_0(x) = \frac{1}{(1 + e^{bx-5})^2} \quad (2.2)$$

境界条件 ($L = 200$)

$$u(0, t) = 1 \quad (2.3)$$

$$u(L, t) = 0 \quad (2.4)$$

の下で $b = 0.25, 0.5, 1.0$ の場合に Fisher 方程式をオイラー陽解法

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = f(u_j^n) + \frac{u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n}{\Delta x^2} \quad (2.5)$$

を用いて数値的に解け。ただし、刻み幅は $\Delta x = 0.05 (N = 4000)$, $\Delta t = 0.001$ とし、 $t = 10, 20, 30, 40, (n = 10000, 20000, 30000, 40000)$ の $u(x, t)$ の値を出力すること。また、得られた $u(x, t)$ の値を b の値ごとに一枚の図 (横軸 x , 縦軸 u) に図示せよ。

また、得られた結果について考察せよ。(例えば b の値を様々に変えたときに振る舞いはどのように変わるかを見るなど。)

2.2 実験方法

```
1  #include <stdio.h>
2  #include <math.h>
3  #define N 4000
4  #define M 40000
5  #define L 10000
6
7  double u0(double x){
8      return 1/((1+exp(0.25*x-5))*(1+exp(0.25*x-5)));
9  }
10
11 double fu(double u){
12     return u*(1-u);
13 }
14
15 double FE(double dx, double dt){
16
17     double c = dt/(dx*dx);
18
19     double u[N+2];
20
21     for(int j=1; j<=N; j++){
22         u[j] = (u0((j-1)*dx)+u0(j*dx))/2;
23     }
24
25     u[0]=1;
26     u[N+1]=0;
```

```

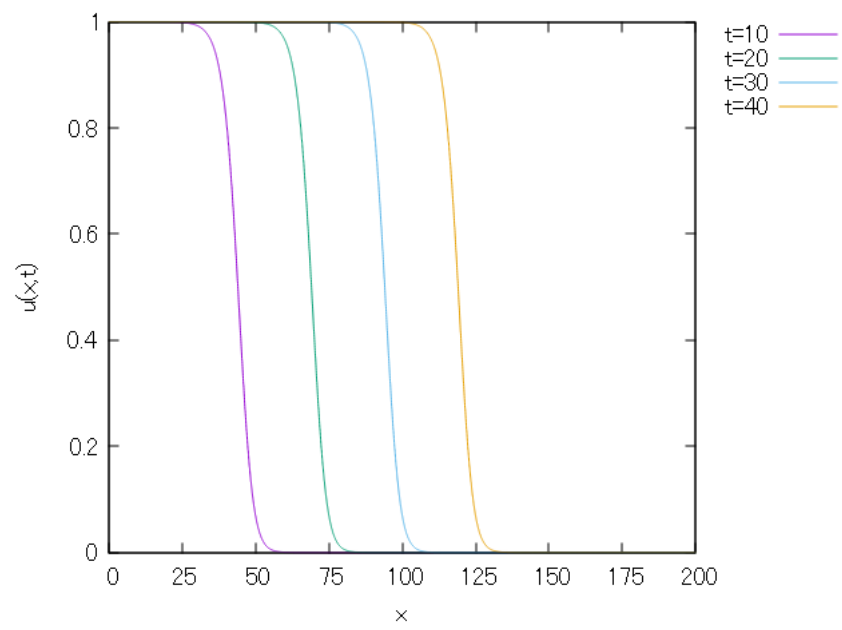
27
28     double x[N+2];
29     double ux[4][N];
30
31     for(int i=1; i<=M; i++){
32         for(int j=1; j<=N; j++){
33             x[j] = u[j] + c*(u[j-1]-2*u[j]+u[j+1]) + fu(u[j])*dt;
34         }
35
36         for(int j=1; j<=N; j++){
37             u[j] = x[j];
38         }
39
40         for(int k=1; k<=4; k++){
41             if(i==k*L){
42                 for(int j=1; j<=N; j++){
43                     ux[k-1][j-1]=u[j];
44                 }
45             }
46         }
47     }
48
49     FILE *fp;
50     fp = fopen("2-1-025","w");
51
52     for(int j=1; j<=N; j++){
53         printf("%.3f", j*dx-0.025);
54         fprintf(fp, "%.3f", j*dx-0.025);
55
56         for(int k=1; k<=4; k++){
57             printf("&%.8f", ux[k-1][j-1]);
58             fprintf(fp, "%8f", ux[k-1][j-1]);
59         }
60
61         printf("\\\\\\n");
62         fprintf(fp, "\\n");
63     }
64 }
65
66 int main(void){
67     double dt = 0.001;
68     double dx = 0.05;
69
70     FE(dx, dt);
71 }

```

2.3 結果

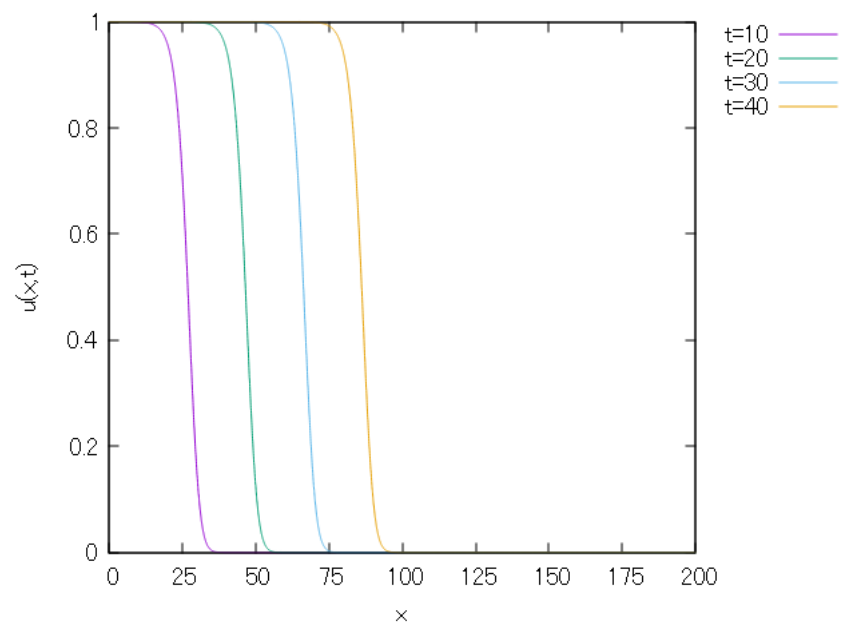
b=0.25

x	$u(x, 10)$	$u(x, 20)$	$u(x, 30)$	$u(x, 40)$
0.025	0.99999997	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.075	0.99999994	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.125	0.99999991	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.175	0.99999988	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.225	0.99999985	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.275	0.99999982	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.325	0.99999979	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.375	0.99999975	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.425	0.99999972	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.475	0.99999969	1.00000000	1.00000000	1.00000000
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
99.775	0.00000000	0.00000034	0.07722454	0.99900476
99.825	0.00000000	0.00000033	0.07556180	0.99898715
99.875	0.00000000	0.00000032	0.07393028	0.99896923
99.925	0.00000000	0.00000031	0.07232959	0.99895099
99.975	0.00000000	0.00000031	0.07075930	0.99893243
100.025	0.00000000	0.00000030	0.06921901	0.99891354
100.075	0.00000000	0.00000029	0.06770830	0.99889432
100.125	0.00000000	0.00000028	0.06622677	0.99887476
100.175	0.00000000	0.00000028	0.06477400	0.99885485
100.225	0.00000000	0.00000027	0.06334959	0.99883459
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
199.525	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.575	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.625	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.675	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.725	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.775	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.825	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.875	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.925	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.975	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000



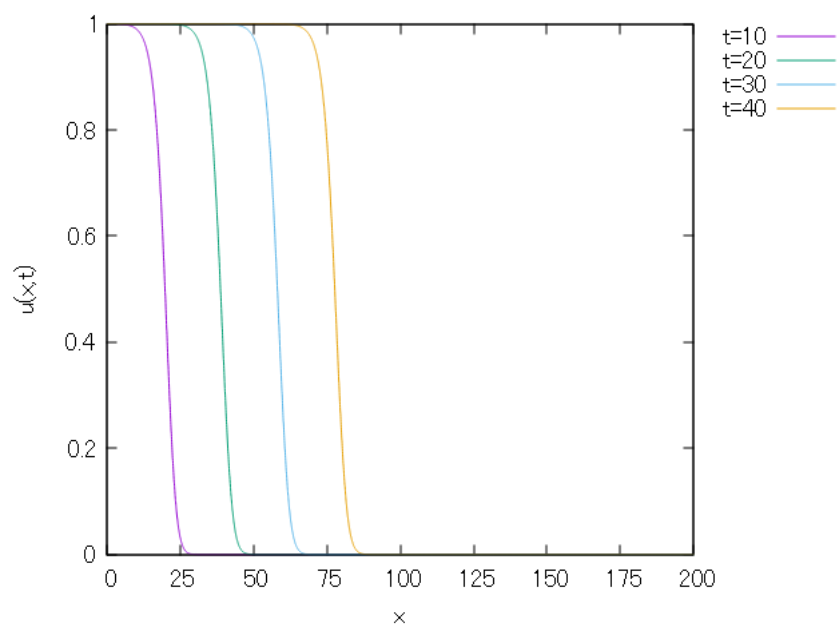
b=0.5

x	$u(x, 10)$	$u(x, 20)$	$u(x, 30)$	$u(x, 40)$
0.025	0.99999970	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.075	0.99999940	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.125	0.99999910	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.175	0.99999879	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.225	0.99999849	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.275	0.99999819	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.325	0.99999788	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.375	0.99999758	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.425	0.99999727	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.475	0.99999696	1.00000000	1.00000000	1.00000000
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
99.775	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00003740
99.825	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00003569
99.875	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00003406
99.925	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00003251
99.975	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00003102
100.025	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00002960
100.075	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00002825
100.125	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00002695
100.175	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00002572
100.225	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00002454
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
199.525	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.575	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.625	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.675	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.725	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.775	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.825	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.875	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.925	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.975	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000



b=1.0

x	$u(x, 10)$	$u(x, 20)$	$u(x, 30)$	$u(x, 40)$
0.025	0.99999612	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.075	0.99999225	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.125	0.99998837	1.00000000	1.00000000	1.00000000
0.175	0.99998448	0.99999999	1.00000000	1.00000000
0.225	0.99998058	0.99999999	1.00000000	1.00000000
0.275	0.99997666	0.99999999	1.00000000	1.00000000
0.325	0.99997274	0.99999999	1.00000000	1.00000000
0.375	0.99996880	0.99999999	1.00000000	1.00000000
0.425	0.99996483	0.99999999	1.00000000	1.00000000
0.475	0.99996085	0.99999998	1.00000000	1.00000000
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
99.775	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
99.825	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
99.875	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
99.925	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
99.975	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
100.025	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
100.075	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
100.125	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
100.175	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
100.225	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
199.525	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.575	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.625	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.675	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.725	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.775	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.825	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.875	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.925	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
199.975	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000



2.4 考察

b, t の値によらず、 $u(x, t)$ は $u(0, t) = 1$ から $u(L, t) = 0$ へと単調に減少している。
 b の値が大きく、 t の値が小さくなるほど、減少のスピードが速くなっている。

3 問題3 (1次元調和振動子の Schrödinger 方程式)

3.1 はじめに

量子力学において、1次元調和振動子のダイナミクスは、次の Schrödinger 方程式

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{k}{2} x^2 \right) \psi(x, t) \quad (3.1)$$

に従う。 $\psi(x, t) = \psi_R(x, t) + i\psi_I(x, t)$ ($\psi_R, \psi_I \in \mathbb{R}$) のように波動関数を実部と虚部に分けると、それぞれの従う方程式は

$$\hbar \frac{\partial \psi_R}{\partial t}(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{k}{2} x^2 \right) \psi_I(x, t) \quad (3.2)$$

$$-\hbar \frac{\partial \psi_I}{\partial t}(x, t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{k}{2} x^2 \right) \psi_R(x, t) \quad (3.3)$$

となり、2つの拡散型方程式の組で表される。この際、粒子の位置の確率密度は $P(x, t) \equiv |\psi(x, t)|^2 = \psi_R(x, t)^2 + \psi_I(x, t)^2$ で与えられる。

今、パラメータを $\hbar = 1$, $m = 1$, $k = 1$ とし、初期条件

$$\psi(x, 0) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{\frac{1}{4}}} e^{-2(x-5)^2} \quad (3.4)$$

の下で Schrödinger 方程式を数値的に解くことを考える。ただし、空間領域は $[-L/2, l/2]$ とし、境界条件は周期境界条件

$$\psi\left(\frac{L}{2}, t\right) = \psi\left(-\frac{L}{2}, t\right) \quad (3.5)$$

とする。

数値的に解く際には Visscher のスキーム [3] と呼ばれる、実部と虚部の時間発展を半ステップだけずらして解く陽解法を用いる。即ち、離散化された波動関数の実部、虚部をそれぞれ $\{R_j^n\}, \{I_j^n\}$ と書くと、 $1 \leq j \leq N$ ($L = N\Delta x$) に対して時間発展は

$$R_j^{n+1} = R_j^n + \Delta t \left(-\frac{1}{2} \frac{I_{j-1}^n - 2I_j^n + I_{j+1}^n}{\Delta x^2} + \frac{1}{2} x_j^2 I_j^n \right) \quad (3.6)$$

$$I_j^{n+1} = I_j^n - \Delta t \left(-\frac{1}{2} \frac{R_{j-1}^{n+1} - 2R_j^{n+1} + R_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2} + \frac{1}{2} x_j^2 R_j^{n+1} \right) \quad (3.7)$$

と記述される。ただし、

$$x_j \equiv \left(j - \frac{1}{2} \right) \Delta x - \frac{L}{2} \quad (3.8)$$

であり、境界条件は全ての n で

$$R_0^n = R_N^n \quad (3.9)$$

$$R_{N+1}^n = R_1^n \quad (3.10)$$

$$I_0^n = I_N^n \quad (3.11)$$

$$I_{N+1}^n = I_1^n \quad (3.12)$$

と表される。また、初期条件は $1 \leq j \leq N$ で

$$R_j^0 = \frac{1}{2} \left[\psi \left((j-1)\Delta x - \frac{L}{2}, 0 \right) + \psi \left(j\Delta x - \frac{L}{2}, 0 \right) \right] \quad (3.13)$$

$$I_j^0 = -\Delta t \left(-\frac{1}{2} \frac{R_{j-1}^0 - 2R_j^0 + R_{j+1}^0}{\Delta x^2} + \frac{1}{2} x_j^2 R_j^0 \right) \quad (3.14)$$

と表される。 $N = 400$, $\Delta x = 0.05$ ($L = 20$), $\Delta t = 0.001$ の下でこの系を数値的に解き、 $t = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$ ($n = 1000, 2000, 3000, 4000, 5000, 6000, 7000, 8000$) における確率密度 $(R_j^n)^2 + I_j^n I_j^{n-1}$ ($1 \leq j \leq N$) の値を出力せよ。また、得られた確率密度 $(R_j^n)^2 + I_j^n I_j^{n-1}$ の値を一つの図 (横軸は x_j) に図示せよ。

3.2 実験方法

```

1  #include <stdio.h>
2  #include <math.h>
3  #define N 400
4  #define M 8000
5  #define L 1000
6
7  double u0(double x){
8      return sqrt(2)*exp(-2*(x-5)*(x-5))/pow(M_PI,0.25);
9  }
10
11  double FE(double dx, double dt){
12
13      double R[N+2];
14      double I[N+2];
15      double Ix[N+2];
16
17      for(int j=1; j<=N; j++){
18          R[j]=(u0((j-1)*dx-10)+u0(j*dx-10))/2;
19      }
20
21      R[0]=R[N];
22      R[N+1]=R[1];
23
24      for(int j=1; j<=N; j++){
25          Ix[j]=-dt*(-(R[j-1]-2*R[j]+R[j+1])/(2*dx*dx)+((j-1/2)*dx-10)*((j-1/2)*dx-10)
                *R[j]/2);
26      }
27
28      Ix[0]=Ix[N];
29      Ix[N+1]=Ix[1];
30
31      double u[8][N];
32
33      for(int i=1; i<=M; i++){
34          for(int j=1; j<=N; j++){
35              R[j] = R[j]+dt*(-(Ix[j-1]-2*Ix[j]+Ix[j+1])/(2*dx*dx)+((j-1/2)*dx-10)*((j-1/2)*dx-10)*Ix[j]/2);
36          }
37
38          R[0]=R[N];
39          R[N+1]=R[1];
40
41          for(int j=1; j<=N; j++){
42              I[j]=Ix[j]-dt*(-(R[j-1]-2*R[j]+R[j+1])/(2*dx*dx)+((j-1/2)*dx-10)*((j-1/2)*dx-10)*R[j]/2);
43          }
44
45      for(int k=1; k<=8; k++){

```

```

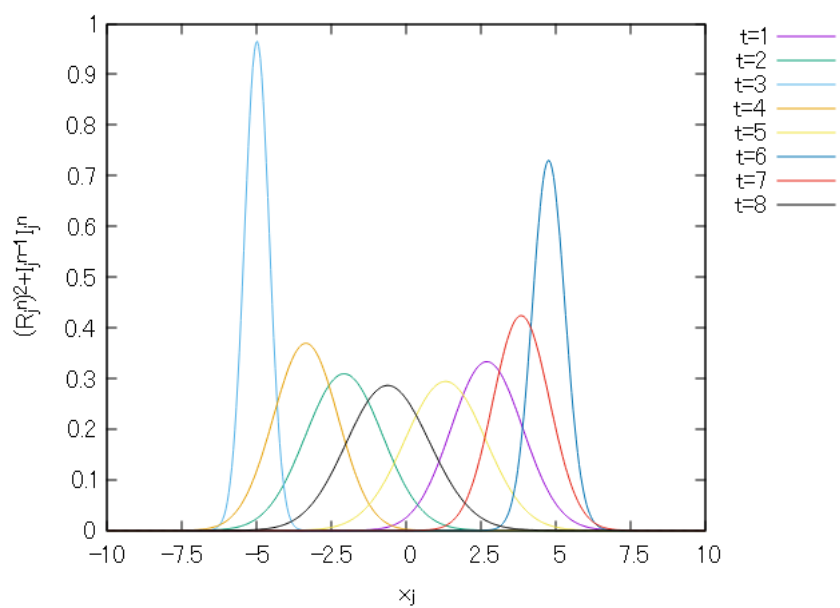
46         if(i==k*L){
47             for(int j=1; j<=N; j++){
48                 u[k-1][j-1]=R[j]*R[j]+I[j]*Ix[j];
49             }
50         }
51     }
52
53     for(int j=1; j<=N; j++){
54         Ix[j]=I[j];
55     }
56
57     Ix[0]=Ix[N];
58     Ix[N+1]=Ix[1];
59 }
60
61 FILE *fp;
62 fp = fopen("3-1","w");
63
64 for(int j=1; j<=N; j++){
65     printf("%.3f", j*dx-10-0.025);
66     fprintf(fp, "%.3f", j*dx-10-0.025);
67
68     for(int k=1; k<=8; k++){
69         printf("&%.8f", u[k-1][j-1]);
70         fprintf(fp, "%%.8f", u[k-1][j-1]);
71     }
72
73     printf("\\\\\\n");
74     fprintf(fp, "\\n");
75 }
76 }
77
78 int main(void){
79     double dt = 0.001;
80     double dx = 0.05;
81
82     FE(dx, dt);
83 }

```

3.3 結果

x	$t = 1$	$t = 2$	$t = 3$	$t = 4$
-9.975	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
-9.925	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
-9.875	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
-9.825	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
-9.775	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
-9.725	0.00000000	0.00000001	0.00000000	0.00000000
-9.675	0.00000000	0.00000001	0.00000000	0.00000001
-9.625	0.00000000	0.00000001	0.00000000	0.00000001
-9.575	0.00000000	0.00000001	0.00000000	0.00000001
-9.525	0.00000000	0.00000001	0.00000000	0.00000002
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
-0.225	0.01633562	0.11035893	0.00000000	0.00464261
-0.175	0.01811764	0.10431692	0.00000000	0.00401205
-0.125	0.02005686	0.09845669	0.00000000	0.00345861
-0.075	0.02216260	0.09278542	0.00000000	0.00297398
-0.025	0.02444420	0.08730984	0.00000000	0.00255042
0.025	0.02691097	0.08203553	0.00000000	0.00218105
0.075	0.02957211	0.07696619	0.00000000	0.00185985
0.125	0.03243664	0.07210351	0.00000000	0.00158156
0.175	0.03551332	0.06744752	0.00000000	0.00134141
0.225	0.03881055	0.06299738	0.00000000	0.00113491
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
9.525	0.00000003	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.575	0.00000002	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.625	0.00000002	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.675	0.00000001	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.725	0.00000001	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.775	0.00000001	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.825	0.00000001	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.875	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.925	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.975	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000

x	$t = 5$	$t = 6$	$t = 7$	$t = 8$
-9.975	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
-9.925	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
-9.875	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
-9.825	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
-9.775	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
-9.725	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
-9.675	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
-9.625	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
-9.575	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
-9.525	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
-0.225	0.15539137	0.00000000	0.00001176	0.27506562
-0.175	0.16183354	0.00000000	0.00001550	0.27213079
-0.125	0.16832138	0.00000000	0.00002044	0.26888925
-0.075	0.17483898	0.00000000	0.00002694	0.26535228
-0.025	0.18136903	0.00000000	0.00003535	0.26153081
0.025	0.18789313	0.00000000	0.00004604	0.25743667
0.075	0.19439242	0.00000000	0.00005951	0.25308386
0.125	0.20084809	0.00000000	0.00007645	0.24848899
0.175	0.20724157	0.00000000	0.00009783	0.24367063
0.225	0.21355435	0.00000000	0.00012488	0.23864801
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
9.525	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.575	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.625	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.675	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.725	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.775	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.825	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.875	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.925	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000
9.975	0.00000000	0.00000000	0.00000000	0.00000000



3.4 考察

図より、 t の値に拠らずグラフの概形は同じである。いずれも場合も $(R_{-10}^n)^2 + I_{-10}^{n-1} I_{-10}^n = (R_{10}^n)^2 + I_{10}^{n-1} I_{10}^n = 0$ であり、その間で 1 つ極大値を持っている。 t の値により、極大値も極大値をとる x_j も異なる。