数値計算/シミュレーションハンドブック

Ver. 1.0.0

勉強会参加メンバー

2016 年 8 月 23 日

目次

記号のリスト

d	次元
h_t	時間のステップ幅
h_x	空間のステップ幅

第 1 章

本稿に関して

1.1 本稿の目的

しばしば耳にする「数値計算」や「数値シミュレーション」,「仮想実験」などは一度は少し踏み込んだところまで触っておきたいもの．そのような簡単な理由から，分野問わず幅広い知見から上記項目をまとめていくことを目的にしている．特に，専門的になりすぎず初学者がとっつきやすいノート (ハンドブックと名付けた理由) になればと思っている．ネット上にはたくさんの知識が転がっている．特に，同じような目的からか wiki なりまとめなりのサイトも増え始めている．これらネットに転がっている知識もこのノートに集約できるなら最高の幸せでる．いつの日かこのノートのおかげで数値計算に入り込むことができたという人が現れてくれたら嬉しいな．なお，本稿のデザインは及びから拝借している．この場を持って感謝申し上げる．

1.2 ルール

短いコードなら pdf に書き込み可．

1.3 索引の書き方

索引は index で可能．

1.4 C/C++ から gnuplot を呼び出す

C/C++ でプログラムを組んでいる場合に，ソースコード内に gnuplot を呼び出すコマンドを記述しておけば，いちいち実行とは別に gnuplot を開いて実行データのプロット を行う手間が省ける．

1.4.1 Linux での方法

Linux で作成中の場合，`popen` 関数[*1]で gnuplot を呼び出すことができる．

ソースコード 1.1　C++ のコード内から gnuplot を呼び出し $\sin x$ を描く

```
#include <iostream>
#include <cstdio>
using namespace std;

int main()
{
```

[*1] 外部コマンドをプログラム内で使用できる一つの関数．終わりには `pclose` 関数で閉じないといけない．

```
7        FILE *fp = popen("gnuplot", "w");
8        if (fp == NULL){
9                return 1;
10       }
11       fputs("set mouse\n", fp);
12       fputs("plot sin(x)\n", fp);
13       fflush(fp);
14       cin.get();
15       pclose(fp);
16       return 0;
17 }
```

説明

1-3 行目: `iostream` は読み込みや書き出しを行う関数が入っているライブラリ．C 言語での `stdio.h` に対応している．また，`cstdio` は FILE ポインタや `fputs` 関数などが入っているライブラリである．3 行目は名前空間の宣言であるが無視して構わない．

7 行目: FILE 型で fp というファイルを用意する．そこに，`popen` 関数を用いて gnuplot と書き込む (`"w"`)．記号 `*`はポインタを表すが別の記事を参照せよ．

8-17 行目: もし fp が確保できないならそこでお終い．確保できるなら，`fputs` 関数で ( ) 内の文字列を fp に書き出す．一つ目はマウスで操作できるようにする宣言文で，二つ目は $\sin x$ をプロットする宣言文である．`fflush` 関数により FILE ポインタ fp のバッファに格納されているデータを吐き出させる．最後に `pclose` で fp を閉じれば良い．

1.4.2　Windows での場合

Windows (Visual C++) を使う場合は，マウスが自動的に有効になっているので宣言する必要はない．また，`popen` 関数と `pclos` 関数の代わりに `_popen` 関数と `_pclose` 関数を使う．

ソースコード 1.2　Visual C++ のコード内から gnuplot を呼び出し $\sin x$ を描く

```
#include <iostream>
#include <cstdio>
using namespace std;

int main()
{
        FILE *fp = _popen("pgnuplot.exe", "w");
        if (fp == NULL){
                return 1;
        }else{
                fputs("plot sin(x)\n", fp);
                fflush(fp);
                cin.get();
                _pclose(fp);
                return 0;
        }
}
```

第 2 章

線形方程式

2.1 線形方程式の解法の種類

1 直接法
  - i Gauss の消去法
  - ii LU 分解

2 反復法
  - – 定常法
    - i SOR 法 (Successive Over-Relaxation: 逐次加速緩和法)
    - ii Gauss-Seidel 法
    - iii Jacobi 法
  - – 非定常法
    - i Krykov 部分空間法
    - ii CG (Conjugate Gradient: 共役勾配法)
    - iii BiCGSTAB (Bi-Conjugate Gradient Stabilized)
    - iv GMRES (Generalized Minimal Residual)

第 3 章

常微分方程式の数値計算

偏微分方程式の数値計算において

3.1 問題設定

常微分方程式

$$\frac{du(t)}{dt} = f(t, u(t)) \quad (t > 0)$$

について考えよう.

3.1.1 Runge-Kutta 法

第 4 章

偏微分方程式の差分法

もっとも基礎的な数値スキームである有限差分法 (Finite Difference Method; FDM) を用いて，いくつかの有名な線形偏微分方程式を計算する．

4.1 Poisson 方程式

線形の Poisson 方程式は

$$-\Delta u(x) = f(x) \quad (x \in \Omega) \tag{4.1.1}$$

と記述される．

4.2 熱方程式

線形の熱方程式は

$$\partial_t u(t,x) - c\Delta u(t,x) = f(t,x) \quad (t > 0,\ x \in \Omega) \tag{4.2.1}$$

と記述される．ここで，Ω は $\mathbb{R}^d$ の単連結な領域であり，$c > 0$ は拡散係数 (または粘性係数) と呼ばれる (今回は) 定数である．

4.2.1 1 次元の問題

ここでは，$\Omega = (0,1)$ とし

$$u(0,x) = g(x) \quad (0 \leq x \leq 1) \tag{4.2.2}$$

及び Dirichlet 境界条件

$$u(t,0) = a(t), \quad u(t,1) = b(t) \quad (t \geq 0) \tag{4.2.3}$$

を仮定する．ここで，$g : [0,1] \to \mathbb{R}$ 及び $a, b : [0,\infty) \to \mathbb{R}$ は与えられた関数で，両立条件として $g(0) = a(0)$ と $g(1) = b(0)$ を満たすと仮定する．

陽解法

時間分割数を N_t で空間分割数を N_x とする．

内部の方程式を，空間に関して2 階中心差分，時間に関して前進差分による近似を行うと

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{h_t} - c\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{h_x^2} = f_i^n \tag{4.2.4}$$

を得る．ただし，$u_i^n := u(nh_t, ih_x)$ かつ $f_i^n := f(nh_t, ih_x)$ としている．(離散) 方程式 (4.2.4) は

$$u_i^{n+1} = \lambda u_{i+1}^n + (1-2\lambda)u_i^n + \lambda u_{i-1}^n$$

と書き換えられる．ここで，$\lambda := ch_t/h_x^2$ である．

陰解法

4.2.2 2 次元の問題

4.2.3 問題

すぐに思い浮かぶ問題としては例えば次がある．

- Neumann 境界条件を課した場合はどうなるか．
- 拡散係数が定数でない場合，すなわち

  $$u_t(t,x) - \mathrm{div}\,(c(t,x)\nabla u(t,x)) = f(t,x) \quad (t>0,\ x\in\Omega)$$

  の場合はどうなるか．

4.3 波動方程式

線形の波動方程式は

$$u_{tt}u(t,x) - c^2\Delta u(t,x) = f(t,x) \quad (t>0,\ x\in\Omega) \tag{4.3.1}$$

と記述される．

4.3.1　1 次元の問題

初期条件として

$$u(0,x) = g_1(x), \quad u_t(0,x) = g_2(x) \quad (0\le x\le 1) \tag{4.3.2}$$

及び Dirichlet 境界条件

$$u(t,0) = a(t), \quad u(t,1) = b(t) \quad (t\ge 0) \tag{4.3.3}$$

を仮定する．

陽解法

内部の方程式は，

$$\frac{u_i^{n+1} - 2u_i^n + u_i^{n-1}}{(\delta t)^2} - c^2\frac{u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n}{(\delta x)^2} = f$$

すなわち，

$$u_i^{n+1} = \lambda u_{i+1}^n + 2(1-\lambda)u_i^n + \lambda u_{i-1}^n - u_i^{n-1}$$

と分解される．ここで，$\lambda := (c\delta t/\delta x)^2$．

初期条件は，$u_i^0 = \Phi_i$ 及び

$$u(\delta t, x) \simeq u(0,x) + \delta t\partial_t u(0,x) + \frac{(\delta t)^2}{2}\partial_{tt}u(0,x)$$

より

$$u_i^1 = \Phi_i + \Psi_i\delta t + \frac{\lambda}{2}(\Phi_{i+1} - 2\Phi_i + \Phi_{i-1})$$

で決まる．ここで，$\Phi_i := \phi(x_i)$ 及び $\Psi_i := \psi(x_i)$ である．なお，境界条件は $u_0^n = u_N^n = 0$ で決まる．

4.3.2 2 次元の問題

正方領域 $\Omega = (0,1)\times(0,1)$ 上の波動方程式 (4.3.1)-(4.3.2) に対する Dirichlet 境界値問題 (固定境界値問題)

$$u(t,x) = a(t,x) \quad (t \geq 0,\ x \in \partial\Omega) \tag{4.3.4}$$

を考える．

陽解法

内部の方程式は

$$\frac{u_{i,j}^{n+1} - 2u_{i,j}^{n} + u_{i,j}^{n-1}}{(h_t)^2} - c^2\left(\frac{u_{i+1,j}^{n} - 2u_{i,j}^{n} + u_{i-1,j}^{n}}{(h_x)^2} + \frac{u_{i,j+1}^{n} - 2u_{i,j}^{n} + u_{i,j-1}^{n}}{(h_y)^2}\right) = 0$$

すなわち，

$$f$$

4.3.3 問題

すぐに思い浮かぶ問題としては例えば次がある．

- Neumann 境界条件を課した場合はどうなるか．
- 拡散係数が定数でない場合，すなわち

  $$u_{tt}(t,x) - \operatorname{div}\left(c(t,x)\nabla u(t,x)\right) = f(t,x) \quad (t > 0,\ x \in \Omega)$$

  の場合はどうなるか．

4.4 移流方程式

線形の (スカラー) 移流方程式*1は

$$\partial_t u(t,x) + \nu \cdot \nabla u(t,x) = f(t,x) \quad (t > 0,\ x \in \Omega) \tag{4.4.1}$$

によって記述される．ここで，$u : \Omega \to \mathbb{R}$ は未知関数，$\nu \in \mathbb{R}^d$ はゼロでない定数ベクトルであり，$f = f(t,x) : (0,\infty)\times\Omega \to \mathbb{R}$ は既知の関数ある．もし $\Omega = \mathbb{R}^d$ ならば，解は

$$u(t,x) = u(0, x - t\nu) + \int_0^t f(s, x + (s-t)\nu)\,ds \quad (x \in \mathbb{R}^d, t \geq 0)$$

とかける ([1, Section 2.1.2])

4.4.1 離散化

4.4.2 移流拡散方程式

前々節と合わせることで，線形の移流拡散方程式*2

$$u_t(t,x) - c\Delta u(t,x) + \nu \cdot \nabla u(t,x) = f(t,x) \quad (t > 0,\ x \in \Omega) \tag{4.4.2}$$

の計算は可能である．

---

*1 advection equation

*2 advection diffusion equation

4.4.3 問題

すぐに思い浮かぶ問題としては例えば次がある．

- Neumann 境界条件を課した場合はどうなるか．
- (4.4.1) において移流係数が定数でない場合[*3]，すなわち

$$u_t(t,x) + \nabla(\nu(t,x)u(t,x)) = f(t,x) \quad (t>0,\ x\in\Omega)$$

　の場合はどうなるか．ただし，ν は既知のスカラー値関数である．

- (4.4.2) において移流係数または/及び拡散係数が定数でない場合[*4]，すなわち

$$u_t(t,x) - \mathrm{div}\,(c(t,x)\nabla u(t,x)) + \nabla(\nu(t,x)u(t,x)) = f(t,x) \quad (t>0,\ x\in\Omega)$$

　の場合はどうなるか．ただし，ν は既知のスカラー値関数である．

[*3] Liouville 方程式と呼ばれることがあるようだ．
[*4] Fokker-Plank 方程式と呼ばれる．

参考文献

[1] L. C. Evans, Partial Differential Equations, Partial Differential Equations, in the series Graduate studies in mathematics, Second Edition v. 19, American Math. Society, 2010.

第 5 章

偏微分方程式の有限要素法

第 6 章

その他の偏微分方程式

6.1 Hamilton-Jacobi 方程式

6.2 自由境界問題

6.3 Navier-Stokes 方程式

第 7 章

モンテカルロシミュレーション

第 8 章

セルオートマトン