計算物理

anko9801

2023 年 11 月 25 日

目次

1　差分法

定義.
連続な時間 t に対し、離散化された時間のパラメータは微小時間 Δt を用いて $t_n = n\Delta t$ と書く。同様に空間についても $x_i = i\Delta x$ とする。時間・空間について連続な関数 $f(x,t)$ に対する離散値を $f_i^{(n)} := f(x_i, t_n)$ と書く。空間について n 次精度とは $\mathcal{O}(\Delta x^n)$ となること

定理 1.1 (1 階微分の差分公式).
1 次前進差分、1 次後退差分、2 次中心差分は次のように求まる。

$$f_i' \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \tag{1.1}$$

$$f_i' \approx \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \tag{1.2}$$

$$f_i' \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \tag{1.3}$$

◇

証明
$f(x \pm \Delta x)$ を 2 次まで Taylor 展開すると

$$f(x \pm \Delta x) = f_{i\pm1} = f_i \pm f_i'\Delta x + \frac{1}{2}f_i''\Delta x^2 + \mathcal{O}(\Delta x^3) \tag{1.4}$$

より次の式が成り立つ。

$$f_{i+1} - f_i = f_i'\Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^2) \tag{1.5}$$

$$f_i - f_{i-1} = f_i'\Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^2) \tag{1.6}$$

$$f_{i+1} - f_{i-1} = 2f_i'\Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^3) \tag{1.7}$$

よって微分は

$$f_i' \approx \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \tag{1.8}$$

$$f_i' \approx \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x) \tag{1.9}$$

$$f_i' \approx \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \tag{1.10}$$

□

定理 1.2 (2 次精度 2 階微分の差分公式).
2 次中心差分は次のように書ける。

$$f''(x_n) \approx \frac{f(x_{n+1}) - 2f(x_n) + f(x_{n-1})}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \tag{1.11}$$

◇

証明
$f(x \pm \Delta x)$ を 3 次まで Taylor 展開すると

$$f(x \pm \Delta x) = f_{i\pm1} = f_i \pm f_i' \Delta x + \frac{1}{2} f_i'' \Delta x^2 \pm \frac{1}{3!} f_i''' \Delta x^3 + \mathcal{O}(\Delta x^4) \tag{1.12}$$

となりこの和について計算することで求まる。

$$f_{i+1} + f_{i-1} = 2f_i + f_i'' \Delta x^2 + \mathcal{O}(\Delta x^4) \tag{1.13}$$

$$f_i'' = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \tag{1.14}$$

□

定理 1.3 (2 階微分の差分公式).
$f(x \pm k\Delta x)$ の Taylor 展開で 2 次以外の項を相殺することで次の式が得られる.

$$f''(x_n) \approx \frac{-f(x_{n+2}) + 16f(x_{n+1}) - 30f(x_n) + 16f(x_{n-1}) - f(x_{n-2})}{12\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^4) \tag{1.15}$$

◇

1.1 安全性解析

定義 (フォン・ノイマン (von Neumann) の安定性解析).
時間が経つと共に振幅が増大しないことは安定性の条件となる。

$$f(x,t) = \sum_k A_k(t) e^{ikx} \tag{1.16}$$

$$\left| \frac{A_k^{(n+1)}}{A_k^{(n)}} \right| \leq 1 \tag{1.17}$$

定義 (CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) 条件).

計算上の情報の伝播する速さより物理的な情報の伝播する速さの方が小さい。

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} \geq c \tag{1.18}$$

$$\nu := \frac{c\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \tag{1.19}$$

定義 (拡散方程式).

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 f(x,t)}{\partial x^2} \tag{1.20}$$

定理 1.4.

$$f_i^{(n+1)} = f_i^{(n)} + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2}\left(f_{i+1}^{(n)} - 2f_i^{(n)} + f_{i-1}^{(n)}\right) \tag{1.21}$$

◇

証明

拡散方程式は時間について (1 次) 前進差分、空間について (2 次) 中心差分を取る。これを FTCS (Forward Time Centered Space) スキームという。

$$\frac{f_i^{(n+1)} - f_i^{(n)}}{\Delta t} = \kappa \frac{f_{i+1}^{(n)} - 2f_i^{(n)} + f_{i-1}^{(n)}}{\Delta x^2} \tag{1.22}$$

$$f_i^{(n+1)} = f_i^{(n)} + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2}\left(f_{i+1}^{(n)} - 2f_i^{(n)} + f_{i-1}^{(n)}\right) \tag{1.23}$$

このように時間発展を求められる。これは安全性を満たす。

$$\frac{A^{(n+1)}e^{ikx_i} - A^{(n)}e^{ikx_i}}{\Delta t} = \kappa \frac{A^{(n)}e^{ikx_{i+1}} - 2A^{(n)}e^{ikx_i} + A^{(n)}e^{ikx_{i-1}}}{\Delta x^2} \tag{1.24}$$

$$\left|\frac{A_k^{(n+1)}}{A_k^{(n)}}\right| = \left|1 + \frac{\kappa \Delta t}{\Delta x^2}(e^{ik\Delta x} - 2 + e^{-ik\Delta x})\right| \tag{1.25}$$

$$= \left|1 - \frac{2\kappa \Delta t}{\Delta x^2}(1 - \cos(k\Delta x))\right| \leq 1 \tag{1.26}$$

□

定義 (移流方程式).

$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = -c\frac{\partial f(x,t)}{\partial x} \tag{1.27}$$

定理 1.5.
移流方程式は時間について (1 次) 前進差分、空間について (2 次) 中心差分を取ると安全性を満たさない。
時間について (1 次) 前進差分、空間について (1 次) 後退差分を取ると安全性を満たす。

$$\frac{f_i^{(n+1)} - f_i^{(n)}}{\Delta t} = -c\frac{f_i^{(n)} - f_{i-1}^{(n)}}{\Delta x} \tag{1.28}$$

◇

証明
時間について (1 次) 前進差分、空間について (2 次) 中心差分を取る。

$$\frac{f_i^{(n+1)} - f_i^{(n)}}{\Delta t} = -c\frac{f_{i+1}^{(n)} - f_{i-1}^{(n)}}{2\Delta x} \tag{1.29}$$

安全性解析すると

$$(A(t_{n+1}) - A(t_n))\frac{e^{ikx_i}}{\Delta t} = -c\left(e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}\right)\frac{A(t_n)e^{ikx_i}}{2\Delta x} \tag{1.30}$$

$$\left|\frac{A(t_{n+1})}{A(t_n)}\right| = \sqrt{|1 - i\nu\sin(k\Delta x)|^2} = \sqrt{1 + \nu^2\sin^2(k\Delta x)} > 1 \tag{1.31}$$

CFL 条件

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} = -c\frac{f_{i+1}^{(n)} - f_{i-1}^{(n)}}{2(f_i^{(n+1)} - f_i^{(n)})} \geq c \tag{1.32}$$

1 次後退差分で離散化したものについて

$$\frac{f_i^{(n+1)} - f_i^{(n)}}{\Delta t} = -c\frac{f_i^{(n)} - f_{i-1}^{(n)}}{\Delta x} \tag{1.33}$$

安定性解析すると

$$(A(t_{n+1}) - A(t_n))\frac{e^{ikx_i}}{\Delta t} = -c\Big(1 - e^{-ik\Delta x}\Big)\frac{A(t_n)e^{ikx_i}}{\Delta x} \tag{1.34}$$

$$\left|\frac{A(t_{n+1})}{A(t_n)}\right| = \sqrt{|1 - \nu(1 - e^{-ik\Delta x})|^2} \tag{1.35}$$

$$= \sqrt{1 - 2\nu(1-\nu)(1 - \cos(k\Delta x))} \leq 1 \tag{1.36}$$

$$\iff \nu \leq 1 \tag{1.37}$$

□

これは差分により拡散項が増えてしまったからである。

定義 (Navier-Stokes 方程式)**.**

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} = -(\boldsymbol{v}\cdot\nabla)\boldsymbol{v} - \frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\boldsymbol{v} + \boldsymbol{F} \tag{1.38}$$

まず無次元量とする。

$$\boldsymbol{v} = V\tilde{\boldsymbol{v}} \quad \boldsymbol{r} = L\tilde{\boldsymbol{r}} \quad t = \frac{L}{V}\tilde{t} \quad p = \rho V^2\tilde{p} \quad \nabla = \frac{1}{L}\tilde{\nabla} \quad \frac{\partial}{\partial t} = \frac{V}{L}\frac{\partial}{\partial\tilde{t}} \quad \mathrm{Re} = \frac{UV}{\nu} \tag{1.39}$$

レイノルズ数 Re は慣性力と粘性力の比に対応する。

$$\frac{\partial\tilde{\boldsymbol{v}}}{\partial\tilde{t}} = -(\tilde{\boldsymbol{v}}\cdot\tilde{\nabla})\tilde{\boldsymbol{v}} - \tilde{\nabla}\tilde{p} + \frac{1}{\mathrm{Re}}\tilde{\nabla}^2\tilde{\boldsymbol{v}} \tag{1.40}$$

これ以降、無次元量を表すチルダは略す。

定理 1.6.

Navier-Stokes 方程式 ◇

証明

$\omega = \nabla \times \boldsymbol{v}$ とすると

$$\frac{\partial \omega_i}{\partial t} = \frac{\partial t}{\partial (}\nabla \times \boldsymbol{v})_i \tag{1.41}$$

$$= -\nabla \times ((\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\boldsymbol{v}) - \nabla \times \nabla p + \frac{1}{\mathrm{Re}}\nabla \times \nabla^2 \boldsymbol{v} \tag{1.42}$$

$$= -\varepsilon_{ijk}\partial_j((v_l\partial_l)v_k) + \frac{1}{\mathrm{Re}}\varepsilon_{ijk}\partial_j\partial_l\partial_l v_k \tag{1.43}$$

$$= -\varepsilon_{ijk}(\partial_j v_l \partial_l v_k + v_l \partial_j \partial_l v_k) + \frac{1}{\mathrm{Re}}\partial_l\partial_l\varepsilon_{ijk}\partial_j v_k \tag{1.44}$$

$$= -\varepsilon_{ijk}\partial_j v_l \partial_l v_k - (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)(\nabla \times \boldsymbol{v}) + \frac{1}{\mathrm{Re}}\nabla^2(\nabla \times \boldsymbol{v}) \tag{1.45}$$

$$= -\varepsilon_{ijk}\partial_j v_l \partial_l v_k - (\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\omega + \frac{1}{\mathrm{Re}}\nabla^2 \omega \tag{1.46}$$

$\boldsymbol{v}(x,y,t) = (u(x,y,t), v(x,y,t), 0)$ とするとき、次の渦度方程式となる。

$$\frac{\partial \omega_3}{\partial t} = -(\boldsymbol{v} \cdot \nabla)\omega_3 + \frac{1}{\mathrm{Re}}\nabla^2 \omega_3 \tag{1.47}$$

ここでは非圧縮性液体 $\nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0$ のとき $\boldsymbol{v} = \nabla \times \Phi$ と書ける。ここで流れ関数 Φ を導入する。

$$u = -\frac{\partial \Phi}{\partial y} \quad v = \frac{\partial \Phi}{\partial x} \tag{1.48}$$

$$\omega = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Phi}{\partial y^2} = \nabla^2 \Phi \tag{1.49}$$

$$\omega = \nabla \times (\nabla \times \Phi) \tag{1.50}$$

$$= \nabla \cdot (\nabla \Phi) - \nabla^2 \Phi \tag{1.51}$$

流れ関数を用いると解くべき方程式は渦度方程式とポアソン方程式に分けることができる。

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = \frac{\partial \Phi}{\partial x}\frac{\partial \omega}{\partial y} - \frac{\partial \Phi}{\partial y}\frac{\partial \omega}{\partial x} + \frac{1}{\mathrm{Re}}\nabla^2 \omega \tag{1.52}$$

$$\nabla^2 \Phi = -\omega \tag{1.53}$$

□

定理 1.7.

ポアソン方程式については差分法で解ける。

$$\nabla^2 \Phi = -\omega \tag{1.54}$$

$$\frac{\Phi_{i+1,j} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{\Phi_{i,j+1} - 2\Phi_{i,j} + \Phi_{i,j-1}}{\Delta y^2} = \omega_{i,j} \tag{1.55}$$

$$\Phi_{i,j} = \frac{1}{4}\Big(\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1} - \Delta x^2 \omega_{i,j}\Big) \tag{1.56}$$

初期値を適当にセットして、この漸化式を収束するまで繰り返し更新する。この漸化式を改良させて収束を早めることができる。次の漸化式を順にヤコビ法, ガウス・ザイデル法, SOR 法という。

$$\Phi_{i,j}^{\text{new}} = \frac{1}{4}\Big(\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1} - \Delta x^2 \omega_{i,j}\Big) \tag{1.57}$$

$$\Phi_{i,j}^{\text{new}} = \frac{1}{4}\Big(\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j}^{\text{new}} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1}^{\text{new}} - \Delta x^2 \omega_{i,j}\Big) \tag{1.58}$$

$$\Phi_{i,j}^{\text{new}} = C_{SOR}\frac{1}{4}\Big(\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j}^{\text{new}} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1}^{\text{new}} - \Delta x^2 \omega_{i,j}\Big) + (1 - C_{SOR})\Phi_{i,j} \quad (0 < C_{SOR} < 2) \tag{1.59}$$

◇

2 ヌメロフ法

3 LAPACK

4 Taylor 展開法

定義.
現在の情報のみを使って時間発展を記述する方法を陽解法という。未来の情報も使って時間発展を記述する方法を陰解法という。

定義.
Taylor 展開法 Crank-Nicolson 法は時間と空間について 2 次精度の陰解法

定義 (TDSE)**.**

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{4.1}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Big(\big(\Big) - 21 \tag{4.2}$$

$$1 - 2 \qquad\qquad 1 \tag{4.3}$$

$$1 \qquad\qquad -21 \tag{4.4}$$

$$\ddots \tag{4.5}$$

$$1 \qquad\qquad\qquad\qquad -21)\Big(\big(\Big)\,\psi_\alpha(x_1) \tag{4.6}$$

$$\psi_\alpha(x_2) \tag{4.7}$$

$$\psi_\alpha(x_3) \tag{4.8}$$

$$\cdots \tag{4.9}$$

$$\psi_\alpha(x_N)) + \Big(\big(\Big)\,V(x_1) \tag{4.10}$$

$$V(x_2) \tag{4.11}$$

$$\ddots \tag{4.12}$$

$$V(x_N))\Big(\big(\Big)\,\psi_\alpha(x_1) \tag{4.13}$$

$$\psi_\alpha(x_2) \tag{4.14}$$

$$\cdots \tag{4.15}$$

$$\psi_\alpha(x_N)) = E\Big(\big(\Big)\,\psi_\alpha(x_1) \tag{4.16}$$

$$\psi_\alpha(x_2) \tag{4.17}$$

$$\cdots \tag{4.18}$$

$$\psi_\alpha(x_N)) \tag{4.19}$$

定義 (時間依存 Gross-Pitaevskii 方程式: TDGPE (時間依存非線形 Schrödinger 方程式: TDNSE))**.**
非線形項

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{ext}(\boldsymbol{r},t) + g|\Psi(\boldsymbol{r},t)|^2\right)\Psi(\boldsymbol{r},t) \qquad \left(g = \frac{4\pi\hbar^2 a_s}{m}\right) \tag{4.20}$$

5 動的システム

定義 (システム).
システムとは入力に対して出力を返す”機能”を持つ対象の総称である。これは次のようにモデル化できる。
静的システム (static system) とは入力 $\boldsymbol{u}$ に対して一意の出力 $\boldsymbol{y}$ を返すシステムである。

$$\boldsymbol{y}(t) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}(t)) \tag{5.1}$$

動的システム (dynamic system) とは内部状態 $\boldsymbol{x}$ を持ち、入力に対して状態が変化し、状態から出力が返されるシステムである。

$$\frac{d\boldsymbol{x}}{dt} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}, t) \tag{5.2}$$

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}, t) \tag{5.3}$$

第 1 式を状態方程式、第 2 式を出力方程式と呼ぶ。

まず平衡点 $\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{u}_0, \boldsymbol{y}_0$ において展開する。

$$\dot{\boldsymbol{x}} \approx \left.\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{x}}\right|_{(\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{u}_0)} \boldsymbol{x} + \left.\frac{\partial \boldsymbol{f}}{\partial \boldsymbol{u}}\right|_{(\boldsymbol{x}_0, \boldsymbol{u}_0)} \boldsymbol{u} \tag{5.4}$$

$$\boldsymbol{y} \approx \left.\frac{\partial \boldsymbol{g}}{\partial \boldsymbol{x}}\right|_{\boldsymbol{x}_0} \boldsymbol{x} \tag{5.5}$$

これより

$$\dot{\boldsymbol{x}} = A\boldsymbol{x} + B\boldsymbol{u} \tag{5.6}$$

$$\boldsymbol{y} = C\boldsymbol{x} \tag{5.7}$$

と定式化できる。$\boldsymbol{x} = T\boldsymbol{z}$ とおくと

$$\dot{\boldsymbol{z}} = T^{-1}AT\boldsymbol{z} + T^{-1}B\boldsymbol{u} \tag{5.8}$$

$$\boldsymbol{y} = CT\boldsymbol{z} \tag{5.9}$$

により A を対角化できる。
定理 5.1.

$$\boldsymbol{y} = C\exp(A(t-t_0))\boldsymbol{x}_0 + C\int_{t_0}^{t} \exp(A(t-\tau))B\boldsymbol{u}(\tau)\,d\tau \tag{5.10}$$

$\diamond$

証明

まず $\boldsymbol{u} = 0$ のときの状態方程式は次のように解ける。

$$\dot{\boldsymbol{x}} = A\boldsymbol{x} \tag{5.11}$$

$$\boldsymbol{x} = \exp(A(t - t_0))\boldsymbol{x}_0 \tag{5.12}$$

これより一般において $\boldsymbol{x} = \exp(At)\boldsymbol{k}$ とおくと

$$\dot{\boldsymbol{x}} = A\boldsymbol{x} + \exp(At)\dot{\boldsymbol{k}} = A\boldsymbol{x} + B\boldsymbol{u} \tag{5.13}$$

$$\dot{\boldsymbol{k}} = \exp(-At)B\boldsymbol{u} \tag{5.14}$$

この微分方程式を解くと

$$\boldsymbol{k}(t) - \boldsymbol{k}_0 = \int_{t_0}^{t} \exp(-A\tau)B\boldsymbol{u}(\tau)\, d\tau \tag{5.15}$$

$$\boldsymbol{k} = \exp(-At_0)\boldsymbol{x}_0 + \int_{t_0}^{t} \exp(-A\tau)B\boldsymbol{u}\, d\tau \tag{5.16}$$

となる。よって

$$\boldsymbol{x} = \exp(A(t - t_0))\boldsymbol{x}_0 + \int_{t_0}^{t} \exp(A(t - \tau))B\boldsymbol{u}\, d\tau \tag{5.17}$$

$$\boldsymbol{y} = C\exp(A(t - t_0))\boldsymbol{x}_0 + C\int_{t_0}^{t} \exp(A(t - \tau))B\boldsymbol{u}(\tau)\, d\tau \tag{5.18}$$

$\square$

例 5.2.

$\diamond$

例 5.3 (バネ・マス・ダンパ系)**.**

$$m\ddot{y} + b\dot{y} + ky = f \tag{5.19}$$

$x_1 = y := y$, $x_2 := \dot{y}$, $u = f$

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\frac{k}{m} & -\frac{b}{m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{m} \end{pmatrix} u \qquad y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \tag{5.20}$$

$\diamond$

例 5.4 (RLC)**.**

$$L\ddot{q} + R\dot{q} + \frac{1}{C}q = e_i \tag{5.21}$$

$\diamond$