計算物理学B

第12回
偏微分方程式 Part I

藤本 悠輝、野垣 康介
（藤本担当回）

質問等あればメールでも受け付けます:
yuki.fujimoto.phys__at__niigata-u.ac.jp
(__at__ を @ に変えてください)

講義予定

10/07 両名：四則演算
10/14 野垣：制御文(for, if)
10/21 野垣：関数
10/28 藤本：配列(numpy)
11/04 藤本：可視化(matplotlib)
11/11 野垣：数値微分
11/18 藤本：数値積分

～中間レポート～

12/09 野垣：モンテカルロ1
12/16 野垣：モンテカルロ2
12/23 藤本：常微分方程式1
01/13 藤本：常微分方程式2
01/20 藤本：偏微分方程式1
01/27 藤本：偏微分方程式2
02/03 野垣：最適化

～期末レポート～

あくまで予定なので変更の可能性あり

授業で用いるURL

Google Colab：

https://colab.research.google.com/?hl=ja

GitHub上の講義サイト：

https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B

今週の教材：

https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B/blob/main/week12

第12回 偏微分方程式その1

- 偏微分方程式の境界値問題
  - ヤコビ法、ガウス・ザイデル法、SOR法
- 偏微分方程式の初期値問題
  - FTCS法、陰解法、クランク・ニコルソン法
  - 安定性解析

この講義は以下を参考に準備されています:
https://github.com/vlvovch/PHYS6350-ComputationalPhysics
「実践計算物理学」野本拓也 、是常隆、有田亮太郎 著(共立出版)

偏微分方程式 (PDE)

偏微分方程式 (Partial Differential Equation; PDE)

例：

- 静電・重力ポテンシャル等に対してのポアソン方程式

$$\nabla^2 \phi(\boldsymbol{x}) = -\frac{\rho(\boldsymbol{x})}{\epsilon_0}$$

- 密度や温度分布についての**拡散/熱伝導方程式**

$$\frac{\partial u(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t} = D\nabla^2 u(\boldsymbol{x}, t)$$

- 変位や振幅に対しての**波動方程式**

$$\frac{\partial^2 u(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 u(\boldsymbol{x}, t)$$

- 速度場に対する**流体方程式**, e.g. **Navier-Stokes eqn.**

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{u} = -\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla} p + \nu \nabla^2 \boldsymbol{u} + \boldsymbol{g}$$

偏微分方程式 (PDE)

偏微分方程式 (Partial Differential Equation; PDE)

例:

- 静電・重力ポテンシャル等に対してのポアソン方程式

$$\nabla^2 \phi(\boldsymbol{x}) = -\frac{\rho(\boldsymbol{x})}{\epsilon_0}$$

境界値問題

- 密度や温度分布についての**拡散/熱伝導方程式**

$$\frac{\partial u(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t} = D\nabla^2 u(\boldsymbol{x}, t)$$

初期値問題

- 変位や振幅に対しての**波動方程式**

$$\frac{\partial^2 u(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t^2} = c^2 \nabla^2 u(\boldsymbol{x}, t)$$

初期値問題

- 速度場に対する**流体方程式**, e.g. **Navier-Stokes eqn.**

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{u} = -\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla} p + \nu \nabla^2 \boldsymbol{u} + \boldsymbol{g}$$

初期値問題

偏微分方程式の解法

- 有限差分法 (Finite difference method; FDM)
  - 微分を有限差分で近似
  - 他の方法よりシンプル
  - 座標が長方形の格子でうまくゆく

この授業では
これだけ

- 有限要素法 (Finite element method; FEM)
  - 系を有限要素に区切る
  - 長方形以外の不規則な形でもOK

- 有限体積法 (Finite volume method; FVM)
  - 系を有限体積に区切る
  - 各セル中では質量が保存

偏微分方程式の解法

- Pythonではライブラリがないので、自分でコードを書かなければならない!

- ポアソン方程式 $\nabla^2 \phi(\boldsymbol{x}) = -\dfrac{\rho(\boldsymbol{x})}{\epsilon_0}$ の境界値問題
$\rightarrow$ 有限差分では線型連立方程式 $A\phi = \boldsymbol{b}$
に帰着させる ←計算量との戦い

- 拡散/熱伝導方程式 $\dfrac{\partial u(t,x)}{\partial t} = D\dfrac{\partial^2 u(t,x)}{\partial x^2}$ の初期値問題
$\rightarrow$ 有限差分では常微分方程式

$$\frac{du_i(t,x_i)}{dt} = \frac{D}{2(\Delta x)^2}\left[u_{i+1}(t) - 2u_i(t) + u_{i-1}(t)\right], \qquad u_i(t) \equiv u(t,x_i)$$

に帰着させる ←不安定性との戦い

偏微分方程式

- ポアソン方程式 $\nabla^2\phi(\boldsymbol{x}) = -\dfrac{\rho(\boldsymbol{x})}{\epsilon_0}$ の境界値問題

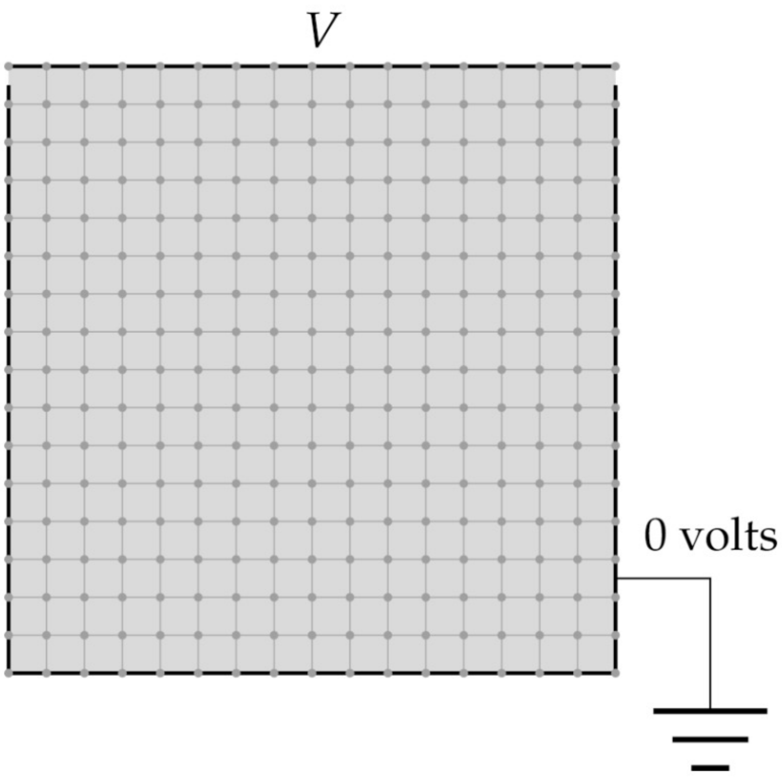
- 熱伝導方程式 $\dfrac{\partial u(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} = D\nabla^2 u(\boldsymbol{x},t)$ の初期値問題

境界値問題

- ポアソン方程式 $\nabla^2\phi(\boldsymbol{x}) = -\dfrac{\rho(\boldsymbol{x})}{\epsilon_0}$ は、湧き出しのある場所以外ではラプラス方程式と見做せる:

$$\frac{\partial^2\phi(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi(x,y)}{\partial y^2} = 0.$$

- 境界条件: $\phi(x,L) = V,$
$\phi(x,0) = 0,$
$\phi(0,y) = 0,$
$\phi(L,y) = 0.$



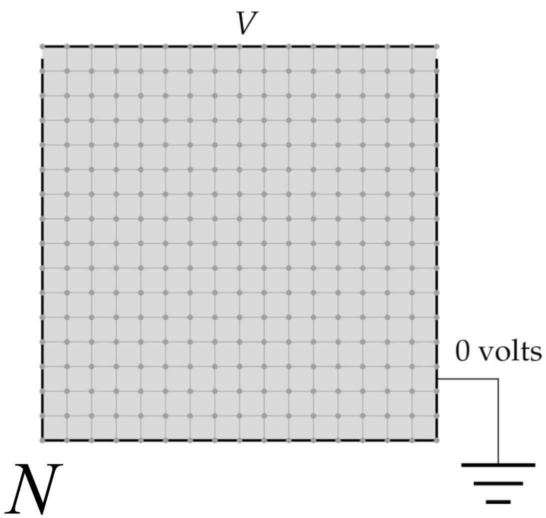
Source: M. Newman, Computational Physics

- どうやってポテンシャルの分布 $\phi(x,y)$ を得るか？

境界値問題

$$\frac{\partial^2\phi(x,y)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\phi(x,y)}{\partial y^2}=0.$$

$$\phi(x,L)=V,$$
$$\phi(x,0)=0,$$
$$\phi(0,y)=0,$$
$$\phi(L,y)=0.$$



Source: M. Newman, Computational Physics

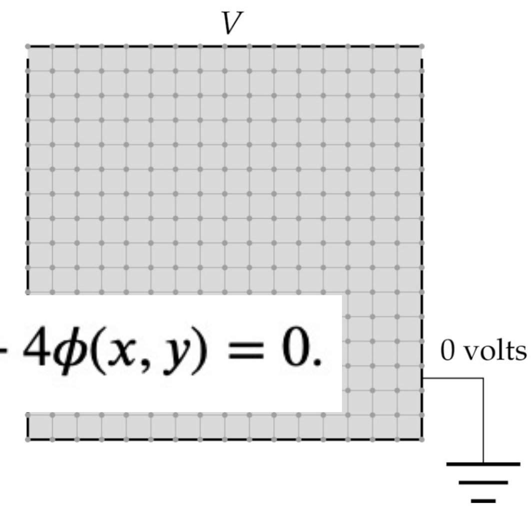
- 空間を $N \times N$ に離散化。各辺 $a = L/N$
- 中心差分を適用：

$$\frac{\partial^2\phi(x,y)}{\partial x^2}=\frac{\phi(x+a,y)-2\phi(x,y)+\phi(x-a,y)}{a^2},$$
$$\frac{\partial^2\phi(x,y)}{\partial y^2}=\frac{\phi(x,y+a)-2\phi(x,y)+\phi(x,y-a)}{a^2}.$$

- ラプラス方程式は次のようになる：

$$\phi(x+a,y)+\phi(x-a,y)+\phi(x,y+a)+\phi(x,y-a)-4\phi(x,y)=0.$$

境界値問題



Source: M. Newman, Computational Physics

- ラプラス方程式：

$$\phi(x+a,y)+\phi(x-a,y)+\phi(x,y+a)+\phi(x,y-a)-4\phi(x,y)=0.$$

- これは、N^2本の線形連立方程式。
つまり、各点での $\phi(x,y)$ をベクトルとみなすと、
$A\phi = \boldsymbol{b}$ という形になっている。

- これをどう解くか？
  - 線形代数：LU分解など。計算量は $O(N^6)$
  - 反復法：ヤコビ法など。計算量が少ない。

※ Pythonだとfor文が遅いので、反復法よりnumpyやscipyの線形代数のライブラリlinalgを使った方が早い場合がある。

境界値問題:ヤコビ法

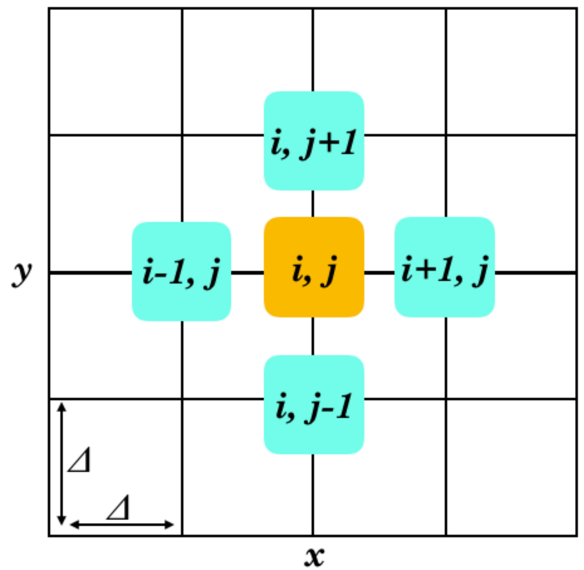
- ラプラス方程式を解く:

$$\phi(x+a,y)+\phi(x-a,y)+\phi(x,y+a)+\phi(x,y-a)-4\phi(x,y)=0.$$

- ヤコビ (Jacobi) 法
  以下の解法を、所望の精度が出るまで繰り返し適用:

$$\phi_{n+1}(x,y)=\frac{\phi_n(x+a,y)+\phi_n(x-a,y)+\phi_n(x,y+a)+\phi_n(x,y-a)}{4}$$

- 反復法を利用して収束解を得る方法を緩和法という



境界値問題：ガウス・ザイデル法

- ラプラス方程式を解く：

$$\phi(x+a,y)+\phi(x-a,y)+\phi(x,y+a)+\phi(x,y-a)-4\phi(x,y)=0.$$

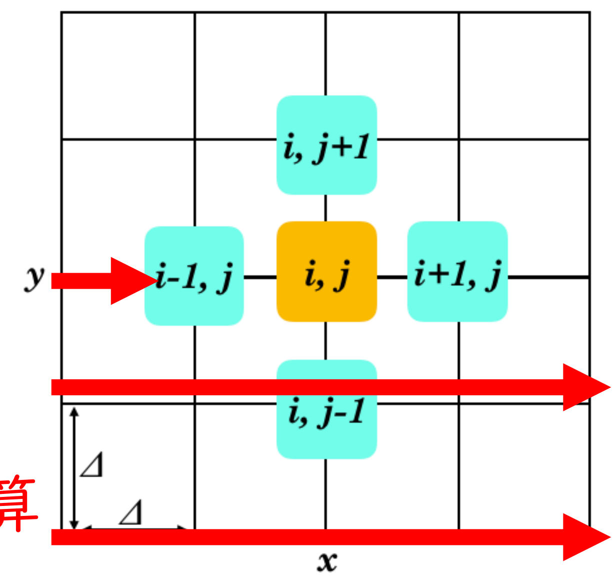
- ガウス・ザイデル (Gauss-Seidel) 法
  下三角部分から順に計算：

$$\phi_{n+1}(x,y)=\frac{\phi_n(x+a,y)+\phi_{n+1}(x-a,y)+\phi_n(x,y+a)+\phi_{n+1}(x,y-a)}{4}$$

- ヤコビ法より収束が早い。

※ しかし、右辺にn+1回目の計算結果が現れるので、全てのx,yについて同時に解くことができない。したがって、並列化できずfor文が避けられず、一長一短な側面がある。

矢印の順に下から計算



境界値問題：SOR法

- ガウス・ザイデル (Gauss-Seidel) 法：

$$\phi_{n+1}(x,y)=\frac{\phi_n(x+a,y)+\phi_{n+1}(x-a,y)+\phi_n(x,y+a)+\phi_{n+1}(x,y-a)}{4}$$

- 逐次加速緩和(Successive Over-Relaxation; SOR)法：

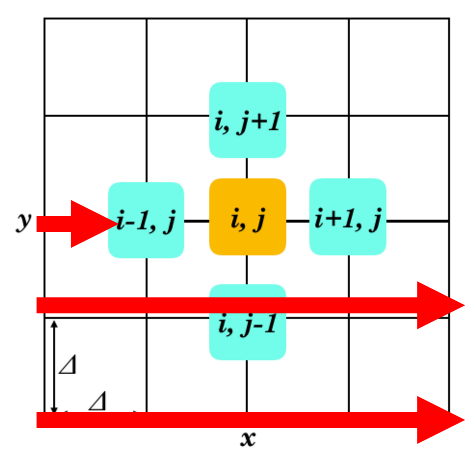
$$\phi_{n+1}(x,y)=\phi_n(x,y)+(1+\omega)[\phi_{n+1}(x,y)-\phi_n(x,y)]$$

このように、ωで更新の度合いを加速。つまり、

$$\phi_{n+1}(x,y)=(1+\omega)\frac{\phi_n(x+a,y)+\phi_{n+1}(x-a,y)+\phi_n(x,y+a)+\phi_{n+1}(x,y-a)}{4}$$
$$-\omega\phi_n(x,y)$$

- ω: 加速パラメタ。$-1<\omega<1$で収束。

※ 経験的に決める。
※ 文献によっては上で $1+\omega\to\omega$ としたものを使う。



偏微分方程式

- ポアソン方程式 $\nabla^2\phi(\boldsymbol{x}) = -\frac{\rho(\boldsymbol{x})}{\epsilon_0}$ の境界値問題

- 熱伝導方程式 $\frac{\partial u(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} = D\nabla^2 u(\boldsymbol{x},t)$ の初期値問題

初期値問題

- 多くの偏微分方程式は場 $u(t, x)$ の時間発展を記述
- 例：熱伝導方程式、この場合は $u(t, x)$ は温度分布

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

- $u(t, x)$ の時間発展を記述。初期分布：$u(t = 0, x) = u_0(x)$,
境界条件：
$$u(t, x = 0) = u_{\mathrm{left}}(t),$$
$$u(t, x = L) = u_{\mathrm{right}}(t).$$

- もし境界条件が静的なら(=右辺が時間依存しない)、長時間経過後、解は定常分布に近づく

熱伝導方程式での有限差分

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

- まず空間座標 x を $N+1$ 点に離散化：

$$x_k = ak, \qquad k = 0\ldots N, \qquad a = L/N,$$

- 位置の2階微分を中心差分で近似：

$$\frac{\partial^2 u(t,x)}{\partial x^2} \approx \frac{u(t,x+a) - 2u(t,x) + u(t,x-a)}{a^2}.$$

- 時間 t の離散化はどうする？よく取られる手法：
  - FTCS 法
  - 陰解法
  - Crank-Nicolson 法

熱伝導方程式: FTCS法

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

- FTCS (Forward Time Centered Space) 法、すなわち、その名の通り時間微分を前方差分で近似

$$\frac{\partial u(t,x)}{\partial t} \approx \frac{u(t+h,x) - u(t,x)}{h}$$

- 熱伝導方程式の差分方程式は:

$$\frac{u(t+h,x) - u(t,x)}{h} = D\frac{u(t,x+a) - 2u(t,x) + u(t,x-a)}{a^2}$$

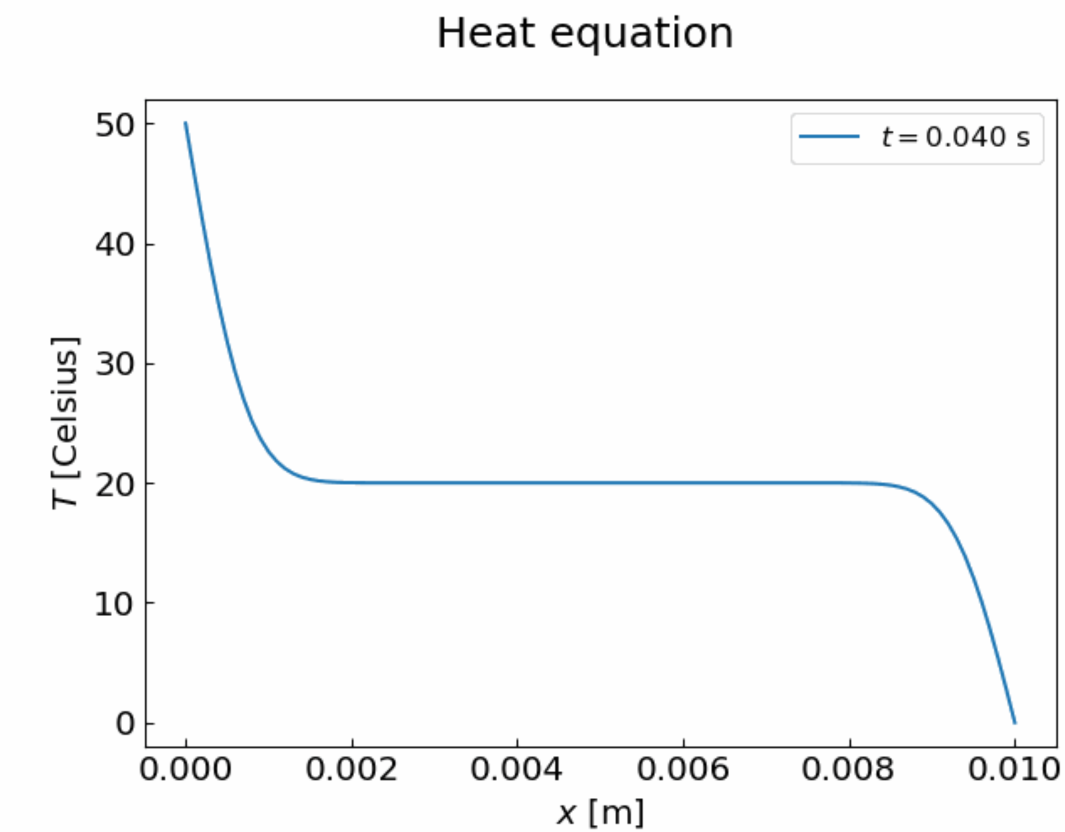
- 解 $u(t+h, x)$ には現在時刻の情報 $u(t, x)$ のみ必要:

$$u_k^{n+1} = u_k^n + r\,(u_{k+1}^n - 2u_k^n + u_{k-1}^n), \qquad k = 1 \ldots N-1.$$

$$r \equiv \frac{Dh}{a^2}$$

熱伝導方程式の数値解

長さ1cm、初期温度20°Cのステンレスの棒を考える。
この容器の左端は50°Cの温水浴槽に接し、
右端は0°Cの冷水浴槽に接する。ただし、
ステンレスの熱拡散率は $D = 4.25 \cdot 10^{-6}\ \mathrm{m^2\ s^{-1}}$ とする。

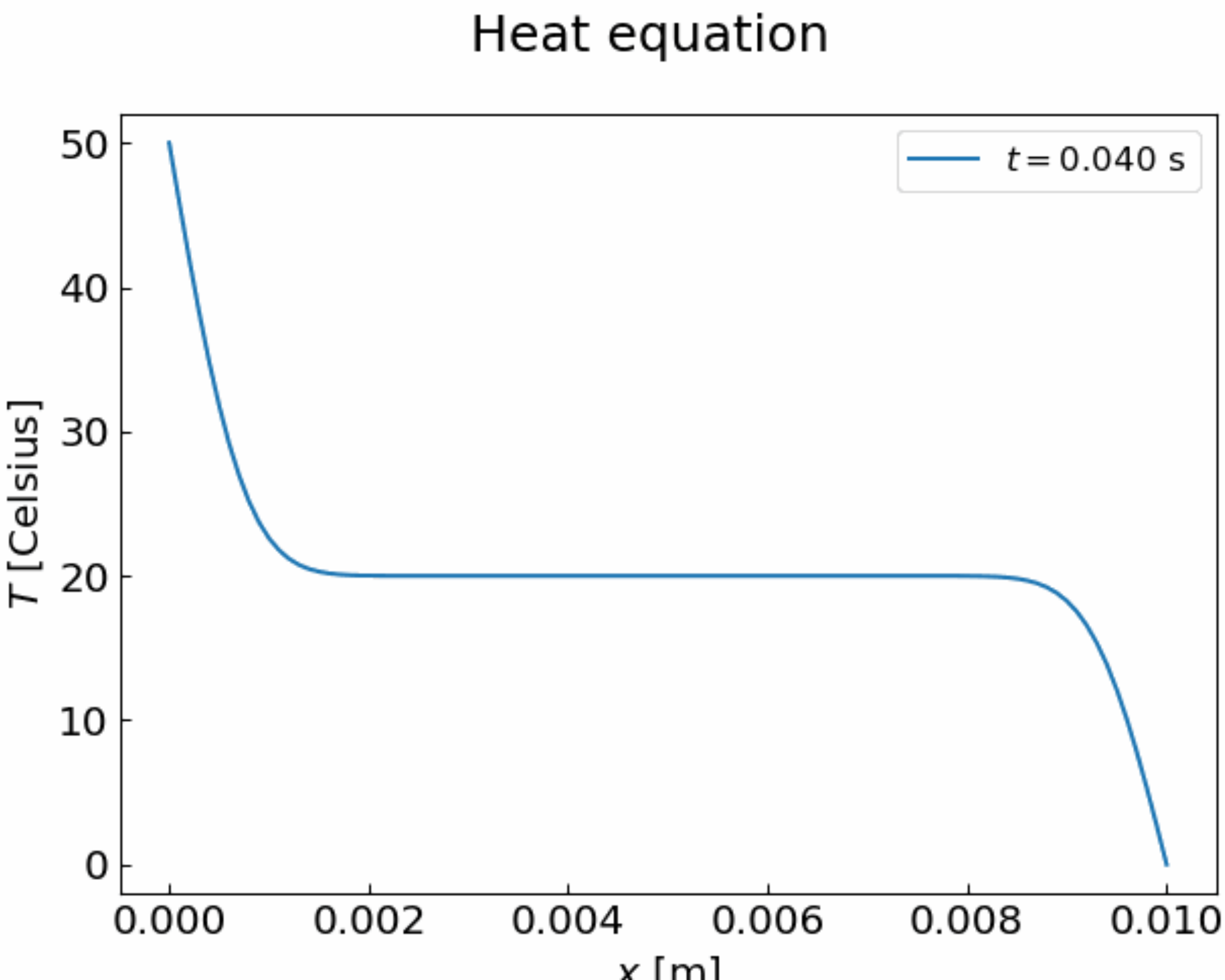


$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

FTCS法の問題点

時間の刻み幅が大きくなると不安定になる。

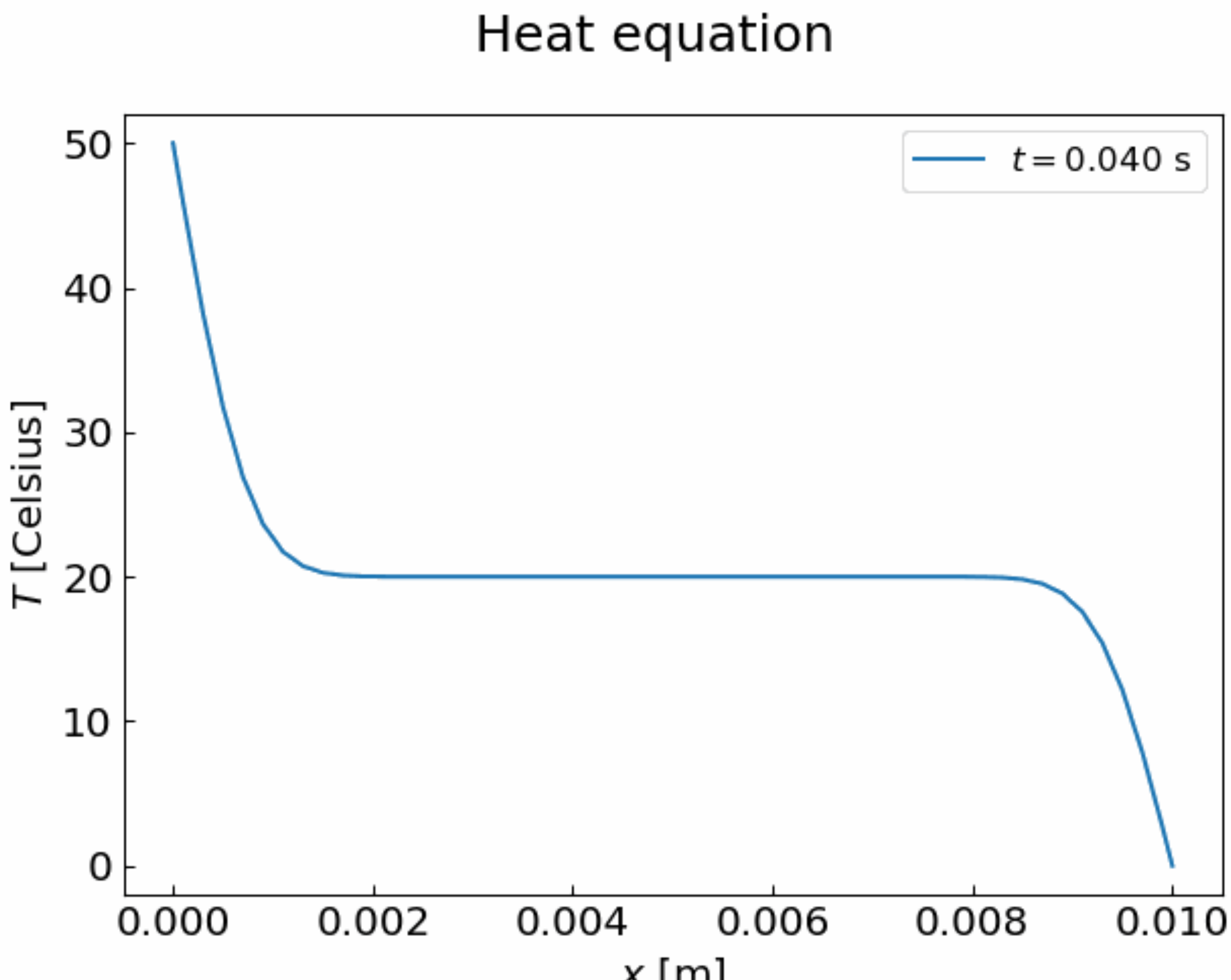
$\Delta t = 0.001000$ s:



FTCS法の問題点

時間の刻み幅が大きくなると不安定になる。

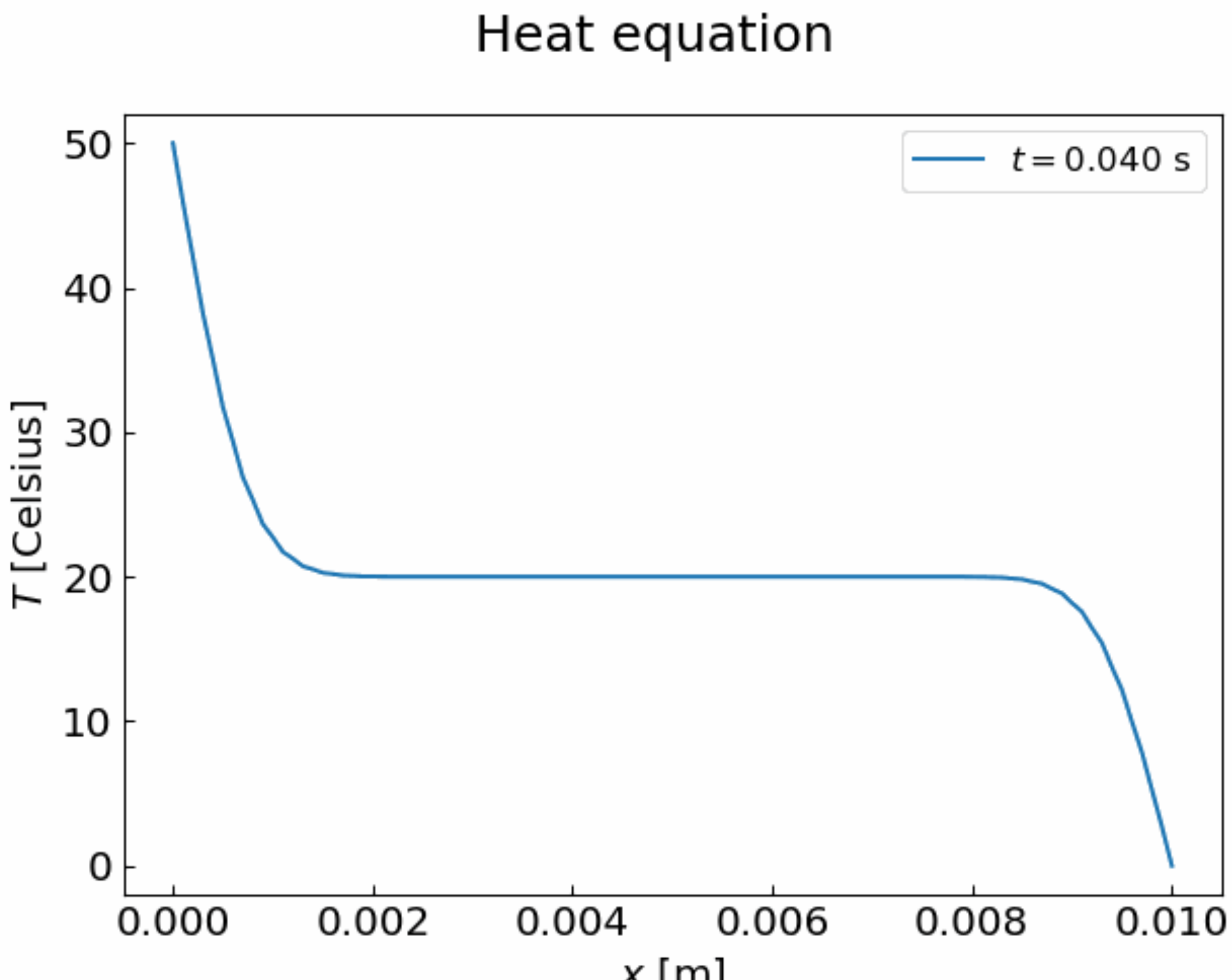
Δt = 0.001179 s:



FTCS法の問題点

時間の刻み幅が大きくなると不安定になる。

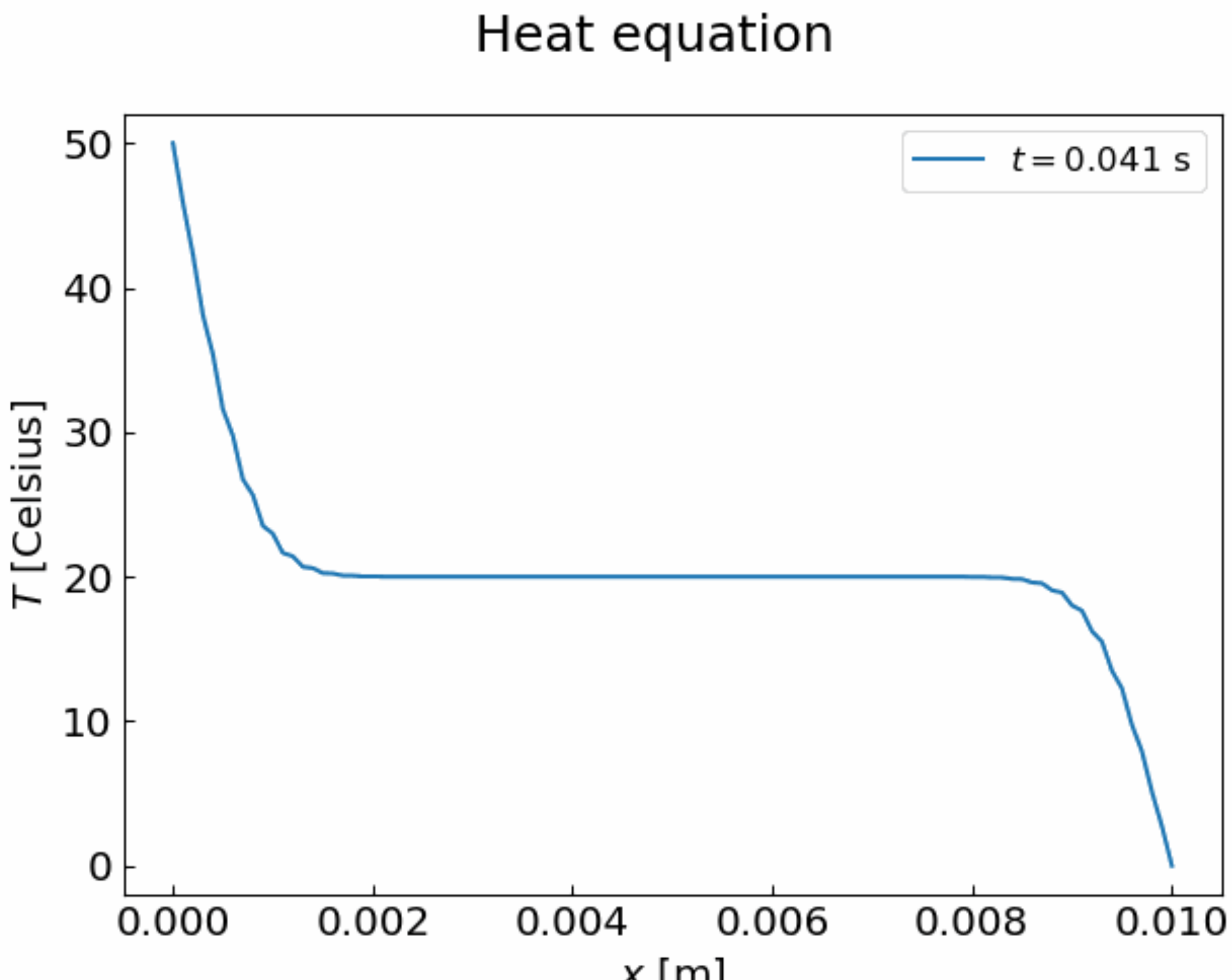
$\Delta t = 0.001181$ s:



FTCS法の問題点

時間の刻み幅が大きくなると不安定になる。

$\Delta t = 0.001200$ s:



von Neumannの安定性解析

- フーリエ変換: $u(t,x)=\sum_k c_k(t)e^{ikx}$
- 各k成分について考える。すなわち、$u(t,x)=c_k(t)e^{ikx}$
  これを差分方程式
  $$\frac{u(t+h,x)-u(t,x)}{h}=D\frac{u(t,x+a)-2u(t,x)+u(t,x-a)}{a^2}$$
  に代入すると
  $$u(t+h,x)=[1-4r\sin^2(ka/2)]c_k(t)e^{ikx}$$ となる。
  $$r\equiv\frac{Dh}{a^2}$$
- つまり、

$$c_k(t+h)=[1-4r\sin^2(ka/2)]c_k(t),\qquad c_k^{n+1}=[1-4r\sin^2(ka/2)]^n c_k^0$$

- $r<1/2$ では収束するが、$r>1/2$ では発散!

FTCS法の不安定性

- 一般に、空間の n 階微分を含む偏微分方程式のFTCS法による解が安定になるための条件は:

$$\Delta t \lesssim \frac{(\Delta x)^n}{D}$$

- 長時間のシミュレーションだと計算量増大……
- 避けるための方法:
  - 陰解法
  - Crank-Nicolson法

$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ の陰解法

- 時間微分を前方ではなく後方差分で近似

$$\frac{\partial u(t+h,x)}{\partial t} \approx \frac{u(t+h,x)-u(t,x)}{h}$$

- 熱伝導方程式の差分方程式は:

$$\frac{u(t+h,x)-u(t,x)}{h} = D\frac{u(t+h,x+a)-2u(t+h,x)+u(t+h,x-a)}{a^2}$$

$$u_k^{n+1} = u_k^n + r\,(u_{k+1}^{n+1} - 2u_k^{n+1} + u_{k-1}^{n+1}), \qquad k = 1 \ldots N-1$$

- 解 $u(t+h,x)$ を得るには三重対角行列方程式を解く

$$-ru_{k-1}^{n+1} + (1+2r)u_k^{n+1} - ru_{k+1}^{n+1} = u_k^n, \qquad k = 1 \ldots N-1$$

※ ここでは scipy.linalg.solve_banded で呼び出して解く。線形代数には FortranのLAPACKという優れたライブラリがあるので、それを使う。

- von Neumann安定性解析: 全ての r で安定

$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ Crank-Nicolson法

- 時間微分を前方と後方差分の”平均”で近似

$$\frac{\partial u(t,x)}{\partial t} \approx \frac{1}{2}\left[D\frac{\partial^2 u(t+h,x)}{\partial x^2} + D\frac{\partial^2 u(t,x)}{\partial x^2}\right]$$

… 時間積分の台形則に対応。

- 熱伝導方程式の差分方程式は:

$$\frac{u(t+h,x)-u(t,x)}{h} = \frac{D}{2}\frac{u(t+h,x+a)-2u(t+h,x)+u(t+h,x-a)}{a^2} + \frac{D}{2}\frac{u(t,x+a)-2u(t,x)+u(t,x-a)}{a^2}.$$

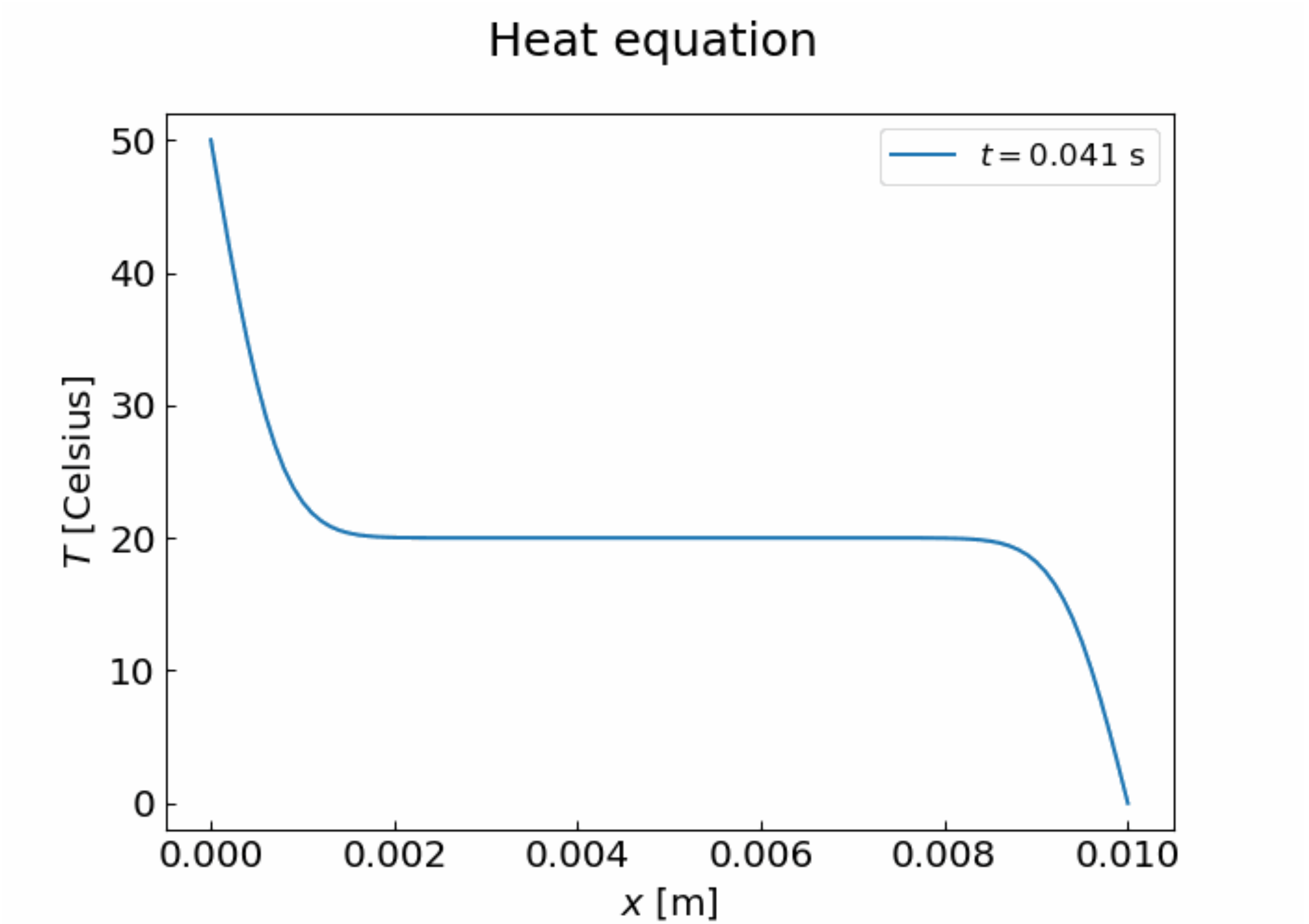
- 陰解法同様、解 $u(t+h,x)$ を得るには三重対角行列方程式を解く必要がある:

$$-ru_{k-1}^{n+1} + 2(1+r)u_k^{n+1} - ru_{k+1}^{n+1} = ru_{k-1}^{n} + 2(1-r)u_k^{n} + ru_{k+1}^{n}, \qquad k = 1 \ldots N-1.$$

- von Neumann安定性解析: 全ての r で安定

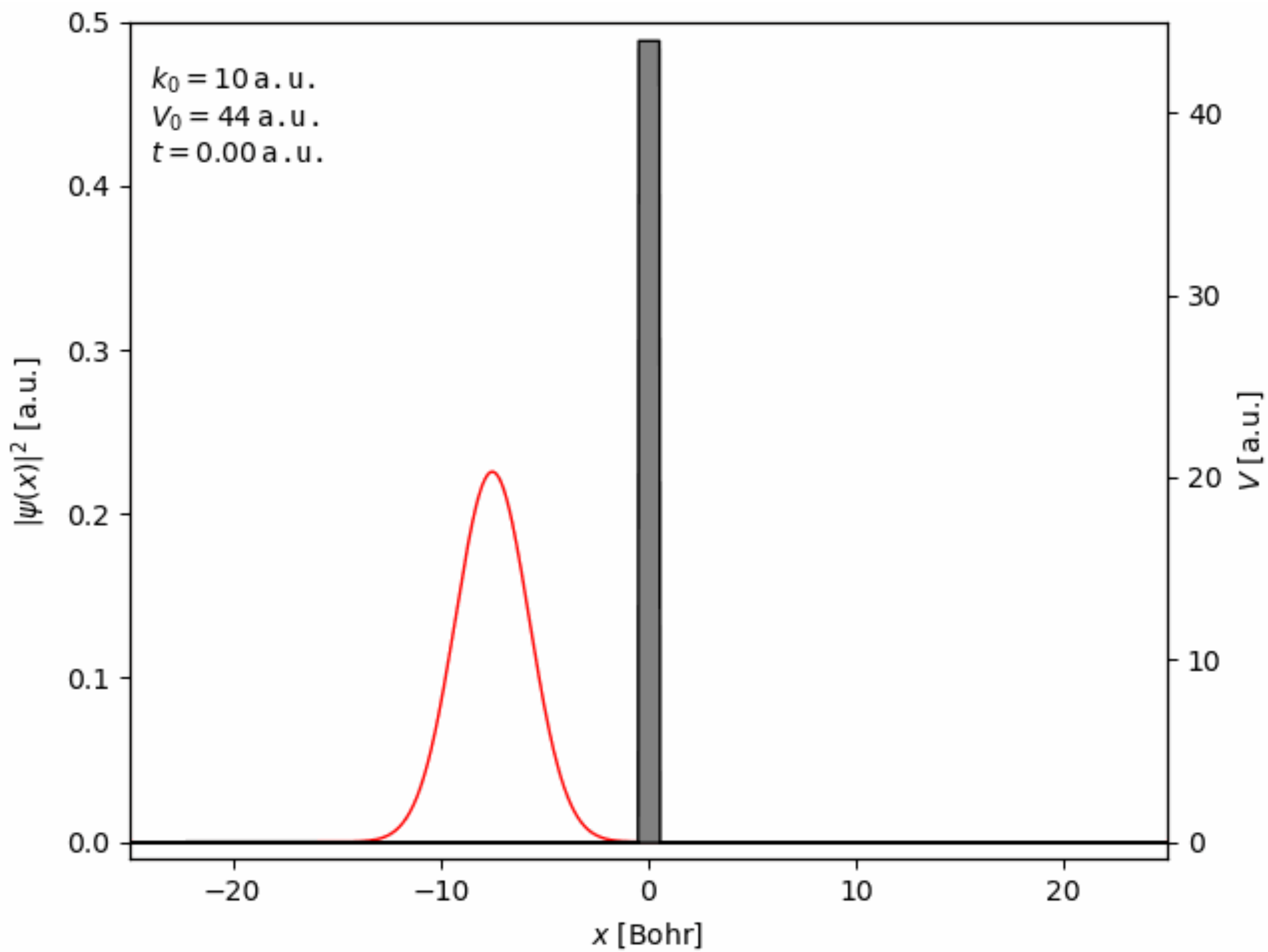
陰解法による数値解

FTCSが破綻する大きい時間の刻み幅でも動作



次回予告

量子力学をやります。



実習タイム

Crank-Nicolson法で空間1次元の波動方程式

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

を解いてみよう。
必要な情報は今週のノートブックにあるので、それを参照のこと。

答えは次回の講義で解説する。