差分法の勉強の手引き

桂田 祐史

2016 年 6 月 10 日, 7 月 15 日微修正

http://nalab.mind.meiji.ac.jp/2016/q2/
配属年度 (2016) とゼミの教室番号が必要

1 なぜ勧めるか

コンピューターで数値計算出来るようになってほしい。それが出来るようになると、チャレンジ出来ることが多くなる。それが出来ないとかなり窮屈だと思う (シミュレーションも実験もやらないと、理論だけで勝負となってしまう)。

数値計算入門には、何をしてもらっても良いと思うが、自分で思いつかないのであれば、テキスト (ファーロウ「偏微分方程式」 [1]) で勉強する熱方程式のような問題をコンピューターで数値計算する方法の 1 つ、**差分法**を勉強してみませんか、ということ。

何か具体的な目標をあげると、テキスト 7 課の問題を解くプログラムを作成すること。

これが終わった後、その先に進むも、**有限要素法**に取り組むも、波動方程式のような問題をやってみるも、全然別のことをするのも、よりどりみどり。

Quiz: なぜ数値計算をするのか？

2 参考資料

勉強する場合、以下の資料をすべて印刷することを勧める (研究室に来ればあげます。事前にメールを下さい。)。
(2) のプログラムに関しては、自分の Mac にダウンロードすること (ブラウザで Ctrl-クリックして、名前をつけて保存する)。

(1) 桂田「発展系の数値解析」[1]
差分法入門。熱方程式の初期値境界値問題 (今のテキストの第 5 課の問題) を題材にして説明してある。

(2) 現象数理学科 Mac の `cglsc` コマンドでコンパイル出来るプログラム

(a) `heat1d-e-glsc.c`[2]
同次 Dirichlet 条件 $u(0,t) = u(1,t) = 0$ の場合、陽解法のプログラム (もっとも基本的、短いので読んで理解しやすい)。「発展系の数値解析」3 節

[1] http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/labo/text/heat-fdm-0.pdf
[2] http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/program/fdm/heat1d-e-glsc.c

(b) `heat1d-i-glsc.c`[3]
同次 Dirichlet 条件 $u(0,t)=u(1,t)=0$ の場合、陰解法 (θ 法) のプログラム。「発展系の数値解析」5 節 (3)

(c) `heat1n-i-glsc.c`[4]
同次 Neumann 条件 $u_x(0,t)=u_x(1,t)=0$ の場合、陰解法 (θ 法) のプログラム。「熱方程式に対する差分法 I」1 章

(3) 桂田「熱方程式に対する差分法 I」第 1 章[5]
同次 Dirichlet 境界条件 $u(0,t)=u(1,t)=0$ 以外の境界条件の問題を解くためにどうすれば良いか、解説してある。

(4) 桂田 「発展系の数値解析の続き」[6]
連立 1 次方程式を解くための LU 分解の説明を詳しく書いてある。

3 勉強の進め方

- §2 の (1) 「発展系の数値解析」 の 1, 2, 3 節を読む。
- §2 の (2) (a) `heat1d-e-glsc.c` は 3 節の差分方程式を計算して、熱方程式の初期値境界値問題 (テキストの 5 課のものに相当) を解くプログラムである。コンパイル&実行してみること (もしこれが出来なかった場合は、Mac を持って桂田のところに来ること、出来るようにしてあげます)。これを解読する (確かに 3 節で説明してある計算をしていることを読み取る) こと。
- 「発展系の数値解析」の 4 節を、コンピューターで再現しながら読む。そのためには、§2 の (2) の (b) `heat1d-i-glsc.c`, (c) `heat1n-i-glsc.c` を用いる。
  - Dirichlet 条件の問題を解くには `heat1d-i-glsc.c`
  - Neumann 条件の問題を解くには `heat1n-i-glsc.c`
  - 入力パラメーターは、「発展系の数値解析」図の中に書いてあるので難しくないはず。
- 「発展系の数値解析」の 5 節を読む。θ 法というのを説明してあるが、それを実装したプログラムが `heat1d-i-glsc.c` である。プログラムを読んで、そのことを理解すること。
- `heat1d-i-glsc.c` の中で、連立 1 次方程式 (「発展系の数値解析」の p. 16 式 (46)) を解くのに、`trilu()`, `trisol()` という関数を使っているが、これは係数行列を LU 分解して解いている。LU 分解とは何かについては[7]、§2 の (4) 「発展系の数値解析の続き」に書いてあるが、(短時間に自力で理解するのは大変と思われるので) とりあえず「これで連立 1 次方程式を解いているらしい」でパスしても構わない。
- Neumann 境界条件 $u_x(0,t)=u_x(1,t)=0$ の問題をどう解くかは、「発展系の数値解析」には書いてない。§2 の (3)「熱方程式に対する差分法 I」第 1 章に詳しく書いてある。`heat1n-i-glsc.c` はそれを実装したものである。テキスト第 7 課の問題の境界条件は、$u(0,t)=0$, $u(1,t)+\gamma u_x(1,t)=0$ で、この第 2 の方程式をどう扱うかも「熱方程式に対

[3] http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/program/fdm/heat1d-i-glsc.c
[4] http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/program/fdm/heat1n-i-glsc.c
[5] http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/labo/text/heat-fdm-1.pdf
[6] http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/labo/text/heat-fdm-0-add.pdf
[7] 線形代数のシラバスに書いてあるようだけど、「知らない」という人が多いようなので…

する差分法 I」第 1 章には書いてある。これを解くためのプログラムは自分で作る必要があるが、heat1d-i-glsc.c をたたき台にすれば、比較的容易である (分かってしまえば数行書き換えるだけ)。

コンパイルと実行の例

```
[takebe:~/work] mk% cglsc heat1d-i-glsc.c
[takebe:~/work] mk% ./heat1d-i-glsc
入力して下さい : nfunc(1..5)=1
入力して下さい : θ=0.5
入力して下さい : N=100
入力して下さい : λ=0.5
 時間の刻み幅τ= 5e-05 になりました。
入力して下さい : 最終時刻 Tmax=1
入力して下さい : グラフ書き換え時間間隔 (Δ t)=0.01
T=   0.0000e+00
  I     u(i)       I     u(i)       I     u(i)       I     u(i)       I     u(i)
  0  0.0000e+00    1  1.0000e-02    2  2.0000e-02    3  3.0000e-02    4  4.0000e-02
  5  5.0000e-02    6  6.0000e-02    7  7.0000e-02    8  8.0000e-02    9  9.0000e-02
 10  1.0000e-01   11  1.1000e-01   12  1.2000e-01   13  1.3000e-01   14  1.4000e-01
 15  1.5000e-01   16  1.6000e-01   17  1.7000e-01   18  1.8000e-01   19  1.9000e-01
 20  2.0000e-01   21  2.1000e-01   22  2.2000e-01   23  2.3000e-01   24  2.4000e-01
 25  2.5000e-01   26  2.6000e-01   27  2.7000e-01   28  2.8000e-01   29  2.9000e-01
 30  3.0000e-01   31  3.1000e-01   32  3.2000e-01   33  3.3000e-01   34  3.4000e-01
 35  3.5000e-01   36  3.6000e-01   37  3.7000e-01   38  3.8000e-01   39  3.9000e-01
 40  4.0000e-01   41  4.1000e-01   42  4.2000e-01   43  4.3000e-01   44  4.4000e-01
 45  4.5000e-01   46  4.6000e-01   47  4.7000e-01   48  4.8000e-01   49  4.9000e-01
 50  5.0000e-01   51  4.9000e-01   52  4.8000e-01   53  4.7000e-01   54  4.6000e-01
 55  4.5000e-01   56  4.4000e-01   57  4.3000e-01   58  4.2000e-01   59  4.1000e-01
 60  4.0000e-01   61  3.9000e-01   62  3.8000e-01   63  3.7000e-01   64  3.6000e-01
 65  3.5000e-01   66  3.4000e-01   67  3.3000e-01   68  3.2000e-01   69  3.1000e-01
 70  3.0000e-01   71  2.9000e-01   72  2.8000e-01   73  2.7000e-01   74  2.6000e-01
 75  2.5000e-01   76  2.4000e-01   77  2.3000e-01   78  2.2000e-01   79  2.1000e-01
 80  2.0000e-01   81  1.9000e-01   82  1.8000e-01   83  1.7000e-01   84  1.6000e-01
 85  1.5000e-01   86  1.4000e-01   87  1.3000e-01   88  1.2000e-01   89  1.1000e-01
 90  1.0000e-01   91  9.0000e-02   92  8.0000e-02   93  7.0000e-02   94  6.0000e-02
 95  5.0000e-02   96  4.0000e-02   97  3.0000e-02   98  2.0000e-02   99  1.0000e-02
100  0.0000e+00
マウスでウィンドウをクリックして下さい。
[takebe:~/work] mk%
```

以下、入力するパラメーターの説明

- nfunc は 5 つ用意してある初期値のうち、どれを選ぶか、番号で指定する。
- θ, N, λ については、「発展系の数値解析」の中で説明してある。
- Tmax は時間をどこまで計算するか、t の最大値というつもり。
- 計算自体は、時間の刻み幅 τ ごとに行っている。τ はとても小さくなりがちなので、毎回グラフを描いていると、画面が "真っ黒" になる。そこでグラフ自体は別に時間間隔を指定するようにした。その時間間隔が Δt である。
- 今回のプログラムでは、特に理由がなければ、Tmax は 1, Δ t は 0.01 で良いだろう。

このプログラムでは、グラフを重ね描きしているが、プログラム中の int erase_always = 0; を int erase_always = 1; に書き換えると、毎回画面をクリアしてからグラフを描くようになる。

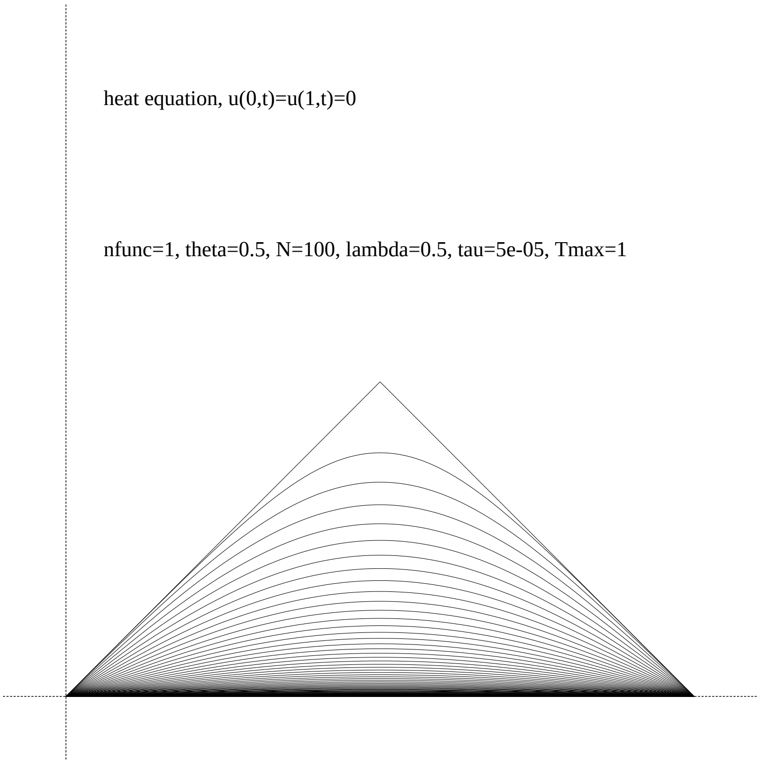

図 1: 同次 Dirichlet 境界条件の場合

参考文献

[1] Farlow, S. J.: *Partial Differential Equations for Scientists and Engineers*, John Wiley & Sons, Inc (1982), 邦訳: スタンリー・ファーロウ 著, 入理 正夫・入理 由美 訳, 偏微分方程式, 朝倉書店 (1996).