計算科学特論

熱伝導方程式の解法2
（差分法まとめ）

有限要素法の準備

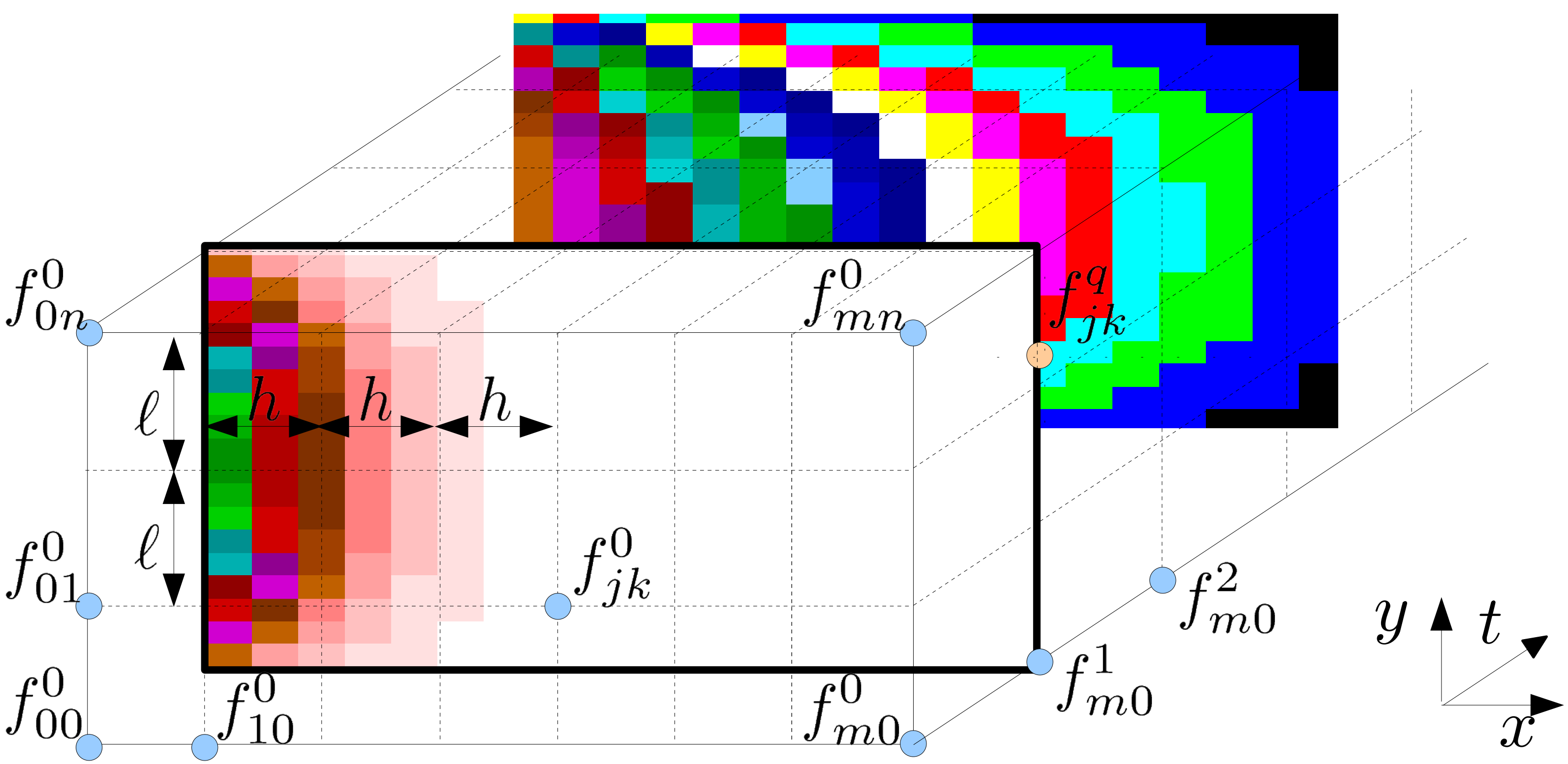
前回までのまとめ、今日の予定

- 熱伝導方程式の導出
  比熱・熱流(フーリエ則)からの導出
- 差分法の基礎（差分格子と差分近似）
  Taylor展開に基づく差分近似の導出
- 差分法の解法1（連立方程式の導出）
  Laplace方程式の差分近似
- 差分法の解法2（反復法、時間発展）
  反復解法(ガウス・ザイデル法、SOR法)
- 熱伝導方程式の時間発展
  陽解法とクランク・ニコルソン法

今日はクランク・ニコルソン法についての補足から

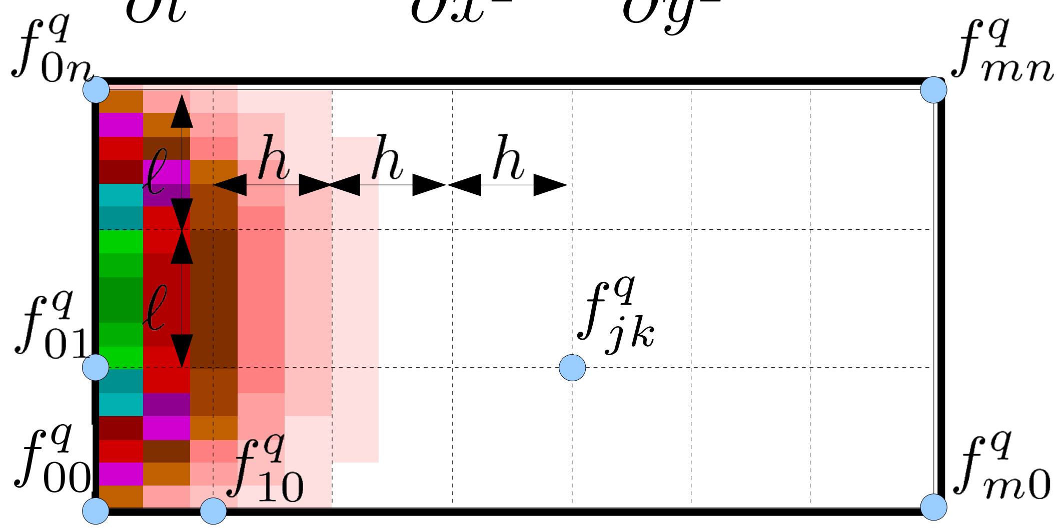
熱伝導方程式の初期値問題

- 問題領域と差分格子
  - 座標: $(t_q, x_j, y_k) = (q\tau, jh, k\ell)$ τ : 時間刻み
  - 関数値: $f(t_q, x_j, y_k) = f^q_{jk}$ について、あらかじめ $x = 0, mh, y = 0, n\ell$ での値(境界条件)と $t = 0$ での値(初期条件)が判っているものとする。



熱伝導方程式の差分近似

- ある時間 $t = t_q = q\tau$ の温度分布 $f(t_q, x_k, y_j) = f^q_{jk}$
- 熱伝導方程式 $\frac{\partial}{\partial t} f = \chi(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}) f$ の差分近似



- 陽解法 $\dfrac{f^{q+1}_{jk} - f^q_{jk}}{\tau} = \dfrac{f^q_{j+1k} - 2f^q_{jk} + f^q_{j-1k}}{h^2} + \dfrac{f^q_{jk+1} - 2f^q_{jk} + f^q_{jk-1}}{\ell^2}$

- CN法

$$\frac{f^{q+1}_{jk} - f^q_{jk}}{\tau} = \frac{1}{2}\left[\frac{f^{q+1}_{j+1k} - 2f^{q+1}_{jk} + f^{q+1}_{j-1k}}{h^2} + \frac{f^q_{j+1k} - 2f^q_{jk} + f^q_{j-1k}}{h^2}\right] + \frac{1}{2}\left[\frac{f^{q+1}_{jk+1} - 2f^{q+1}_{jk} + f^{q+1}_{jk-1}}{\ell^2} + \frac{f^q_{jk+1} - 2f^q_{jk} + f^q_{jk-1}}{\ell^2}\right]$$

熱伝導方程式の差分近似

- 熱伝導方程式: $\dfrac{\partial f}{\partial t}(x,y) = \chi[\dfrac{\partial^2}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2}{\partial y^2}]f(x,y)$

近似: $\dfrac{f_{jk}^{q+1} - f_{jk}^{q}}{\tau} = \dfrac{f_{j+1k}^{q} - 2f_{jk}^{q} + f_{j-1k}^{q}}{h^2} + \dfrac{f_{jk+1}^{q} - 2f_{jk}^{q} + f_{jk-1}^{q}}{\ell^2}$

陽解法: $f_{jk}^{q+1} = \left[1 - \dfrac{2\tau}{h^2} - \dfrac{2\tau}{\ell^2}\right] f_{jk}^{q} + \tau \left[\dfrac{f_{j+1k}^{q} + f_{j-1k}^{q}}{h^2} + \dfrac{f_{jk+1}^{q} + f_{jk-1}^{q}}{\ell^2}\right]$

ただし、$j = 1, \ldots, n-1, k = 1, \ldots, m-1,$
$f_{0k}^{q+1}, f_{mk}^{q+1}, f_{j0}^{q+1}, f_{jn}^{q+1}$ は境界条件から定める
※時間方向の差分は前進差分なので $O(\tau)$

格子点データの更新(陽解法）

$$\frac{f_{jk}^{q+1}-f_{jk}^{q}}{\tau}=\frac{f_{j+1k}^{q}-2f_{jk}^{q}+f_{j-1k}^{q}}{h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q}-2f_{jk}^{q}+f_{jk-1}^{q}}{\ell^2}$$

$$f_{jk}^{q+1}=\left[1-\frac{2\tau}{h^2}-\frac{2\tau}{\ell^2}\right]f_{jk}^{q}+\frac{f_{j+1k}^{q}+f_{j-1k}^{q}}{h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q}+f_{jk-1}^{q}}{\ell^2}$$

$$\boldsymbol{F}^q=\begin{pmatrix}\boldsymbol{F}_0^q\\ \vdots\\ \boldsymbol{F}_n^q\end{pmatrix},\boldsymbol{F}_k^q=\begin{pmatrix}f_{0k}^q\\ \vdots\\ f_{mk}^q\end{pmatrix}$$

とすれば、$\boldsymbol{F}^{q+1}=\boldsymbol{A}^q\boldsymbol{F}^q$

$$\boldsymbol{A}^q\equiv\begin{pmatrix}\boldsymbol{B}_0^q & \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{\Gamma} & \boldsymbol{\mathcal{A}}_1^q & \boldsymbol{\Gamma} & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{0} & & \boldsymbol{\Gamma} & \boldsymbol{\mathcal{A}}_{n-1}^q & \boldsymbol{\Gamma}\\ \boldsymbol{0} & \cdots\cdots & & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{B}_n^q\end{pmatrix},\boldsymbol{\mathcal{A}}_k^q=\begin{pmatrix}b_{0k}^q & 0 & \cdots\cdots & & 0\\ \beta & \alpha & \beta & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & & \beta & \alpha & \beta\\ 0 & \cdots\cdots & & 0 & b_{mk}^q\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{B}_0^q=\mathrm{diag}\,(b_{00}^q,\ldots,b_{m0}^q),$$
$$\boldsymbol{B}_n^q=\mathrm{diag}(b_{0n}^q,\ldots,b_{mn}^q),$$
$$\boldsymbol{\Gamma}=\mathrm{diag}(0,\frac{1}{\ell^2},\ldots,\frac{1}{\ell^2},0),$$

$$b_{jk}^q=f_{jk}^{q+1}/f_{jk}^q\quad(j=0,n\,\mathrm{or}\,k=0,m),\quad\alpha=\left[1-\frac{2\tau}{h^2}-\frac{2\tau}{\ell^2}\right],\beta=\frac{1}{h^2}.$$

↑この範囲なら f_{jk} は境界値で既知

クランク･ニコルソン法

- 時間方向に中心差分を用いる、

$$\frac{f_{jk}^{q+1}-f_{jk}^{q-1}}{2\tau}=\frac{f_{j+1k}^{q}-2f_{jk}^{q}+f_{j-1k}^{q}}{h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q}-2f_{jk}^{q}+f_{jk-1}^{q}}{\ell^2}$$

※全ての差分近似が2次精度、$O(\tau^2,h^2,\ell^2)$

$$f_{jk}^{q+1}=f_{jk}^{q-1}+2\tau\left(\frac{f_{j+1k}^{q}-2f_{jk}^{q}+f_{j-1k}^{q}}{h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q}-2f_{jk}^{q}+f_{jk-1}^{q}}{\ell^2}\right)$$

で更新するには f_{jk}^{q} をどうやって定める？

- $f(t\pm\tau,x,y)=f\pm\tau f'+\frac{\tau^2}{2}f''+\dots$ を用いれば、

$$\frac{f_{jk}^{q+1}+f_{jk}^{q-1}}{2}=f_{jk}^{q}+O(\tau^2)$$

- 2次精度の差分近似、

$$\frac{f_{jk}^{q+1}-f_{jk}^{q-1}}{2\tau}=\frac{f_{j+1k}^{q+1}-2f_{jk}^{q+1}+f_{j-1k}^{q+1}}{2h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q+1}-2f_{jk}^{q+1}+f_{jk-1}^{q+1}}{2\ell^2}$$
$$+\frac{f_{j+1k}^{q-1}-2f_{jk}^{q-1}+f_{j-1k}^{q-1}}{2h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q-1}-2f_{jk}^{q-1}+f_{jk-1}^{q-1}}{2\ell^2}$$

- 更新式、

$$\left(\frac{1}{\tau}+\frac{2}{h^2}+\frac{2}{\ell^2}\right)f_{jk}^{q+1}-\frac{f_{j+1k}^{q+1}+f_{j-1k}^{q+1}}{h^2}-\frac{f_{jk+1}^{q+1}+f_{jk-1}^{q+1}}{\ell^2}$$
$$=\left(\frac{1}{\tau}-\frac{2}{h^2}-\frac{2}{\ell^2}\right)f_{jk}^{q-1}+\frac{f_{j+1k}^{q-1}+f_{j-1k}^{q-1}}{h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q-1}+f_{jk-1}^{q-1}}{\ell^2}$$

- 右辺はあらかじめ計算することができる、
  →更新式を連立方程式と見做して解けば良い

※ 2τ 毎にしか関数値が求まらない

- あらかじめ $\tau/2$ の時間刻みを用いる、

$$\frac{f_{jk}^{q+1}-f_{jk}^{q}}{2(\tau/2)}=\frac{f_{j+1k}^{q+1/2}-2f_{jk}^{q+1/2}+f_{j-1k}^{q+1/2}}{h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q+1/2}-2f_{jk}^{q+1/2}+f_{jk-1}^{q+1/2}}{\ell^2}$$

$$\begin{aligned}\frac{f_{jk}^{q+1}-f_{jk}^{q}}{\tau} &= \frac{f_{j+1k}^{q+1}-2f_{jk}^{q+1}+f_{j-1k}^{q+1}}{2h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q+1}-2f_{jk}^{q+1}+f_{jk-1}^{q+1}}{2\ell^2}\\ &\quad+\frac{f_{j+1k}^{q}-2f_{jk}^{q}+f_{j-1k}^{q}}{2h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q}-2f_{jk}^{q}+f_{jk-1}^{q}}{2\ell^2}\end{aligned}$$

- 更新式、

$$\begin{aligned}&\left(\frac{2}{\tau}+\frac{2}{h^2}+\frac{2}{\ell^2}\right)f_{jk}^{q+1}-\frac{f_{j+1k}^{q+1}+f_{j-1k}^{q+1}}{h^2}-\frac{f_{jk+1}^{q+1}+f_{jk-1}^{q+1}}{\ell^2}\\ &\qquad=\left(\frac{2}{\tau}-\frac{2}{h^2}-\frac{2}{\ell^2}\right)f_{jk}^{q}+\frac{f_{j+1k}^{q}+f_{j-1k}^{q}}{h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q}+f_{jk-1}^{q}}{\ell^2}\end{aligned}$$

格子点データの更新(CN法)

差分近似

$$\frac{f_{jk}^{q+1}-f_{jk}^{q}}{\tau}=\frac{1}{2}\left[\frac{f_{j+1k}^{q+1}-2f_{jk}^{q+1}+f_{j-1k}^{q+1}}{h^2}+\frac{f_{j+1k}^{q}-2f_{jk}^{q}+f_{j-1k}^{q}}{h^2}\right]$$
$$+\frac{1}{2}\left[\frac{f_{jk+1}^{q+1}-2f_{jk}^{q+1}+f_{jk-1}^{q+1}}{\ell^2}+\frac{f_{jk+1}^{q}-2f_{jk}^{q}+f_{jk-1}^{q}}{\ell^2}\right]$$

更新式

$$\left[1+\frac{\tau}{h^2}+\frac{\tau}{\ell^2}\right]f_{jk}^{q+1}-\frac{f_{j+1k}^{q+1}+f_{j-1k}^{q+1}}{2h^2}-\frac{f_{jk+1}^{q+1}+f_{jk-1}^{q+1}}{2\ell^2}$$
$$=\left[1-\frac{\tau}{h^2}-\frac{\tau}{\ell^2}\right]f_{jk}^{q}+\frac{f_{j+1k}^{q}+f_{j-1k}^{q}}{2h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q}+f_{jk-1}^{q}}{2\ell^2}$$

- 行列表現 $\boldsymbol{A}_{\mathrm{L}}^{q+1}\boldsymbol{F}^{q+1}=\boldsymbol{A}_{\mathrm{R}}^{q}\boldsymbol{F}^{q}$
- 右辺は既知なので計算できる
- 左辺は連立方程式を解いて求める
  CN法は陰解法

格子点データの更新(CN法）

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{L}}^{q+1}\boldsymbol{F}^{q+1}=\boldsymbol{A}_{\mathrm{R}}^{q}\boldsymbol{F}^{q}$$

陽解法 $\boldsymbol{F}^{q+1}=\boldsymbol{A}^{q}\boldsymbol{F}^{q}$ と比較して、

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{R}}^{q}\equiv\begin{pmatrix}\boldsymbol{B}_0^q & \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{\Gamma}' & {}^{\mathrm{R}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_1^q & \boldsymbol{\Gamma}' & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{0} & & \boldsymbol{\Gamma}' & {}^{\mathrm{R}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_{n-1}^q & \boldsymbol{\Gamma}'\\ \boldsymbol{0} & \cdots\cdots & & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{B}_n^q\end{pmatrix},\quad {}^{\mathrm{R}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_k^q=\begin{pmatrix}b_{0k}^q & 0 & \cdots\cdots & & 0\\ \beta' & \alpha_- & \beta' & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & & \beta' & \alpha_- & \beta'\\ 0 & \cdots\cdots & & 0 & b_{mk}^q\end{pmatrix},\quad \begin{aligned}\boldsymbol{B}_0^q&=\mathrm{diag}\,(b_{00}^q,\ldots,b_{m0}^q),\\ \boldsymbol{B}_n^q&=\mathrm{diag}(b_{0n}^q,\ldots,b_{mn}^q),\\ \boldsymbol{\Gamma}'&=\mathrm{diag}(0,\frac{1}{2\ell^2},\ldots,0),\end{aligned}$$

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{L}}^{q}\equiv\begin{pmatrix}\boldsymbol{B}_0^q & \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0}\\ -\boldsymbol{\Gamma}' & {}^{\mathrm{L}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_1^q & -\boldsymbol{\Gamma}' & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{0} & & -\boldsymbol{\Gamma}' & {}^{\mathrm{L}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_{n-1}^q & -\boldsymbol{\Gamma}'\\ \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{B}_n^q\end{pmatrix},\quad {}^{\mathrm{L}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_k^q=\begin{pmatrix}b_{0k}^q & 0 & \cdots\cdots & \cdots & 0\\ -\beta' & \alpha_+ & -\beta' & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & & -\beta' & \alpha_+ & -\beta'\\ 0 & \cdots\cdots & \cdots & 0 & b_{mk}^q\end{pmatrix},\quad \begin{aligned}\alpha_\pm&=\left[1\pm\frac{2\tau}{h^2}\pm\frac{2\tau}{\ell^2}\right],\\ \beta'&=\frac{1}{2h^2}.\end{aligned}$$

$$b_{jk}^q=f_{jk}^{q+1}/f_{jk}^q \quad (j=0,n\,\mathrm{or}\,k=0,m),$$

格子点データの更新(CN法）

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{L}}^{q+1}\boldsymbol{F}^{q+1}=\boldsymbol{A}_{\mathrm{R}}^{q}\boldsymbol{F}^{q}$$

陽解法 $\boldsymbol{F}^{q+1}=\boldsymbol{A}^{q}\boldsymbol{F}^{q}$ と比較して、

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{R}}^{q}\equiv\begin{pmatrix}\boldsymbol{B}_0^q & \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{\Gamma}' & {}^{\mathrm{R}}\boldsymbol{\mathcal{A}}_1^q & \boldsymbol{\Gamma}' & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{0} & & \boldsymbol{\Gamma}' & {}^{\mathrm{R}}\boldsymbol{\mathcal{A}}_{n-1}^q & \boldsymbol{\Gamma}'\\ \boldsymbol{0} & \cdots\cdots & & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{B}_n^q\end{pmatrix},\ {}^{\mathrm{R}}\boldsymbol{\mathcal{A}}_k^q=\begin{pmatrix}b_{0k}^q & 0 & \cdots\cdots & & 0\\ \beta' & \alpha_- & \beta' & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & & \beta' & \alpha_- & \beta'\\ 0 & \cdots\cdots & & 0 & b_{mk}^q\end{pmatrix},\ \begin{aligned}&\boldsymbol{B}_0^q=\mathrm{diag}\,(b_{00}^q,\ldots,b_{m0}^q),\\ &\boldsymbol{B}_n^q=\mathrm{diag}(b_{0n}^q,\ldots,b_{mn}^q),\\ &\boldsymbol{\Gamma}'=\mathrm{diag}(0,\frac{1}{2\ell^2},\ldots,0),\end{aligned}$$

$$\boldsymbol{A}^{q}\equiv\begin{pmatrix}\boldsymbol{B}_0^q & \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{\Gamma} & \boldsymbol{\mathcal{A}}_1^q & \boldsymbol{\Gamma} & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{0} & & \boldsymbol{\Gamma} & \boldsymbol{\mathcal{A}}_{n-1}^q & \boldsymbol{\Gamma}\\ \boldsymbol{0} & \cdots\cdots & & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{B}_n^q\end{pmatrix},\ \boldsymbol{\mathcal{A}}_k^q=\begin{pmatrix}b_{0k}^q & 0 & \cdots\cdots & & 0\\ \beta & \alpha & \beta & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & & \beta & \alpha & \beta\\ 0 & \cdots\cdots & & 0 & b_{mk}^q\end{pmatrix},\ \begin{aligned}&\boldsymbol{B}_0^q=\mathrm{diag}\,(b_{00}^q,\ldots,b_{m0}^q),\\ &\boldsymbol{B}_n^q=\mathrm{diag}(b_{0n}^q,\ldots,b_{mn}^q),\\ &\boldsymbol{\Gamma}=\mathrm{diag}(0,\frac{1}{\ell^2},\ldots,\frac{1}{\ell^2},0),\\ &\alpha=\alpha_-,\ \beta=1/h^2.\end{aligned}$$

格子点データの更新(CN法）

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{L}}^{q+1}\boldsymbol{F}^{q+1}=\boldsymbol{A}_{\mathrm{R}}^{q}\boldsymbol{F}^{q}$$

陽解法 $\boldsymbol{F}^{q+1}=\boldsymbol{A}^{q}\boldsymbol{F}^{q}$ と比較して、

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{R}}^{q}\equiv\begin{pmatrix}\boldsymbol{B}_0^q & \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{\Gamma}' & {}^{\mathrm{R}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_1^q & \boldsymbol{\Gamma}' & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{0} & & \boldsymbol{\Gamma}' & {}^{\mathrm{R}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_{n-1}^q & \boldsymbol{\Gamma}'\\ \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{B}_n^q\end{pmatrix},\ {}^{\mathrm{R}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_k^q=\begin{pmatrix}b_{0k}^q & 0 & \cdots & \cdots & 0\\ \beta' & \alpha_- & \beta' & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & & \beta' & \alpha_- & \beta'\\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & b_{mk}^q\end{pmatrix},\quad \begin{aligned}\boldsymbol{B}_0^q&=\mathrm{diag}\,(b_{00}^q,\ldots,b_{m0}^q),\\ \boldsymbol{B}_n^q&=\mathrm{diag}(b_{0n}^q,\ldots,b_{mn}^q),\\ \boldsymbol{\Gamma}'&=\mathrm{diag}(0,\frac{1}{2\ell^2},\ldots,0),\end{aligned}$$

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{L}}^{q}\equiv\begin{pmatrix}\boldsymbol{B}_0^q & \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0}\\ -\boldsymbol{\Gamma}' & {}^{\mathrm{L}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_1^q & -\boldsymbol{\Gamma}' & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{0} & & -\boldsymbol{\Gamma}' & {}^{\mathrm{L}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_{n-1}^q & -\boldsymbol{\Gamma}'\\ \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{B}_n^q\end{pmatrix},\ {}^{\mathrm{L}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_k^q=\begin{pmatrix}b_{0k}^q & 0 & \cdots & \cdots & 0\\ -\beta' & \alpha_+ & -\beta' & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & & -\beta' & \alpha_+ & -\beta'\\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & b_{mk}^q\end{pmatrix},\quad \begin{aligned}\alpha_\pm&=\left[1\pm\frac{2\tau}{h^2}\pm\frac{2\tau}{\ell^2}\right],\\ \beta'&=\frac{1}{2h^2}.\end{aligned}$$

$$b_{jk}^q=f_{jk}^{q+1}/f_{jk}^q\quad (j=0,n\,\mathrm{or}\,k=0,m),$$

授業レポート用紙:氏名(　　　　　　　　　　)学籍番号(　　　　　　　　)

熱伝導方程式の解法にクランク・ニコルソン法を用いた場合の係数行列を示す

差分方程式: $\dfrac{f_{jk}^{q+1}-f_{jk}^{q}}{\tau}=$

$$\frac{1}{2}\left[\frac{f_{j+1k}^{q+1}-2f_{jk}^{q+1}+f_{j-1k}^{q+1}}{h^2}+\frac{f_{j+1k}^{q}-2f_{jk}^{q}+f_{j-1k}^{q}}{h^2}\right]$$

$$+\frac{1}{2}\left[\frac{f_{jk+1}^{q+1}-2f_{jk}^{q+1}+f_{jk-1}^{q+1}}{\ell^2}+\frac{f_{jk+1}^{q}-2f_{jk}^{q}+f_{jk-1}^{q}}{\ell^2}\right]$$

を整理、左辺に時刻q+1、右辺にqの項を置いて更新式:

$$\left[1+\frac{\tau}{h^2}+\frac{\tau}{\ell^2}\right]f_{jk}^{q+1}-\frac{f_{j+1k}^{q+1}+f_{j-1k}^{q+1}}{2h^2}-\frac{f_{jk+1}^{q+1}+f_{jk-1}^{q+1}}{2\ell^2}$$

$$=\left[1-\frac{\tau}{h^2}-\frac{\tau}{\ell^2}\right]f_{jk}^{q}+\frac{f_{j+1k}^{q}+f_{j-1k}^{q}}{2h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q}+f_{jk-1}^{q}}{2\ell^2}$$

これを行列で表現して

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{L}}^{q+1}\boldsymbol{F}^{q+1}=\boldsymbol{A}_{\mathrm{R}}^{q}\boldsymbol{F}^{q}$$

ただし、diag()を引数を成分とする対角行列として、

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{R}}^{q}\equiv\begin{pmatrix}\boldsymbol{B}_0^q & \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{\Gamma}' & {}^{\mathrm{R}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_1^q & \boldsymbol{\Gamma}' & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{0} & & \boldsymbol{\Gamma}' & {}^{\mathrm{R}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_{n-1}^q & \boldsymbol{\Gamma}'\\ \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{B}_n^q\end{pmatrix},\quad {}^{\mathrm{R}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_k^q=\begin{pmatrix}b_{0k}^q & 0 & \cdots & \cdots & 0\\ \beta' & \alpha_- & \beta' & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & & \beta' & \alpha_- & \beta'\\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & b_{mk}^q\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{L}}^{q}\equiv\begin{pmatrix}\boldsymbol{B}_0^q & \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0}\\ -\boldsymbol{\Gamma}' & {}^{\mathrm{L}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_1^q & -\boldsymbol{\Gamma}' & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{0} & & -\boldsymbol{\Gamma}' & {}^{\mathrm{L}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_{n-1}^q & -\boldsymbol{\Gamma}'\\ \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{B}_n^q\end{pmatrix},\quad {}^{\mathrm{L}}\!\boldsymbol{\mathcal{A}}_k^q=\begin{pmatrix}b_{0k}^q & 0 & \cdots & \cdots & 0\\ -\beta' & \alpha_+ & -\beta' & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & & -\beta' & \alpha_+ & -\beta'\\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & b_{mk}^q\end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{B}_0^q=\mathrm{diag}\,(b_{00}^q,\ldots,b_{m0}^q)\boldsymbol{B}_n^q=\mathrm{diag}(b_{0n}^q,\ldots,b_{mn}^q),$$

$$\boldsymbol{\Gamma}'=\mathrm{diag}(0,\frac{1}{2\ell^2},\ldots,0),$$

$$\alpha_\pm=\left[1\pm\frac{2\tau}{h^2}\pm\frac{2\tau}{\ell^2}\right],\ \beta'=\frac{1}{2h^2}.$$

$$b_{jk}^q=f_{jk}^{q+1}/f_{jk}^q\quad(j=0,n\,\mathrm{or}\,k=0,m),$$

初期条件・境界条件次第の$\boldsymbol{B}_0^q,\boldsymbol{B}_n^q$を除けば、ほとんどが対角行列になる。

格子点データの更新(陰解法）

差分近似(後退差分)

$$\frac{f_{jk}^{q+1}-f_{jk}^{q}}{\tau}=\frac{f_{jk+1}^{q+1}-2f_{jk}^{q+1}+f_{jk-1}^{q+1}}{h^2}+\frac{f_{j+1k}^{q+1}-2f_{jk}^{q+1}+f_{j+1k}^{q+1}}{\ell^2}$$

更新式 $$\left[1+\frac{2\tau}{h^2}+\frac{2\tau}{\ell^2}\right]f_{jk}^{q+1}-\frac{f_{jk+1}^{q+1}+f_{jk-1}^{q+1}}{h^2}-\frac{f_{j+1k}^{q+1}+f_{j+1k}^{q+1}}{\ell^2}=f_{jk}^{q}$$

連立方程式 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{F}_{q+1}=\boldsymbol{F}_q$

右辺は既知なので連立方程式を解けば良い

係数行列は陽解法の

$$\boldsymbol{A}^q\equiv\begin{pmatrix}\boldsymbol{B}_0^q & \boldsymbol{0} & \cdots & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{\Gamma} & \boldsymbol{\mathcal{A}}_1^q & \boldsymbol{\Gamma} & \cdots & \boldsymbol{0}\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ \boldsymbol{0} & & \boldsymbol{\Gamma} & \boldsymbol{\mathcal{A}}_{m-1}^q & \boldsymbol{\Gamma}\\ \boldsymbol{0} & \cdots\cdots & & \boldsymbol{0} & \boldsymbol{B}_m^q\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{\mathcal{A}}_k^q=\begin{pmatrix}b_{0k}^q & 0 & \cdots\cdots & & 0\\ \beta & \alpha & \beta & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & & \beta & \alpha & \beta\\ 0 & \cdots\cdots & & 0 & b_{nk}^q\end{pmatrix},$$

を $\alpha=[1-2\tau/h^2-2\tau/\ell^2]\rightarrow[1+2\tau/h^2+2\tau/\ell^2]$ に変えたもの

陽解法,陰解法とCrankNikolson法

- 陽解法 $\boldsymbol{F}^{q+1} = \boldsymbol{A}^q \boldsymbol{F}^q$
  数値解の安定条件 $\alpha = \left[1 - 2\tau/h^2 - 2\tau/\ell^2\right] > 0$
- 陰解法 $\boldsymbol{A}^{q+1} \boldsymbol{F}^{q+1} = \boldsymbol{F}^q$
- CN法(⊂陰解法) $\boldsymbol{A}_{\mathrm{L}}^{q+1} \boldsymbol{F}^{q+1} = \boldsymbol{A}_{\mathrm{R}}^{q} \boldsymbol{F}^q$
- 陰解法の数値解は常に安定している
- $\boldsymbol{A}^q, \boldsymbol{A}^{q+1}, \boldsymbol{A}_{\mathrm{L}}^{q+1}, \boldsymbol{A}_{\mathrm{R}}^{q},$ は $mn \times mn$ と巨大
  陰解法に現れる連立方程式を解くための工夫が重要になる
  ガウス･ザイデル法、SOR法、$\cdots$

Alternating Direction Implicit法

ADI法:陰解法の改良法

差分近似(後退差分)を2種類考える

x方向 $$\frac{f_{jk}^{q+1}-f_{jk}^{q}}{\tau}=\frac{f_{j+1k}^{q+1}-2f_{jk}^{q+1}+f_{j-1k}^{q+1}}{h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q}-2f_{jk}^{q}+f_{jk-1}^{q}}{\ell^2}$$

y方向 $$\frac{f_{jk}^{q+1}-f_{jk}^{q}}{\tau}=\frac{f_{j+1k}^{q}-2f_{jk}^{q}+f_{j-1k}^{q}}{h^2}+\frac{f_{jk+1}^{q+1}-2f_{jk}^{q+1}+f_{jk-1}^{q+1}}{\ell^2}$$

更新式も2種類

x方向 $$\left[1+\frac{2\tau}{h^2}\right]f_{jk}^{q+1}-\frac{f_{j+1k}^{q+1}+f_{j-1k}^{q+1}}{h^2}=\left[1-\frac{2\tau}{\ell^2}\right]f_{jk}^{q}+\frac{f_{jk+1}^{q}+f_{jk-1}^{q}}{\ell^2}$$

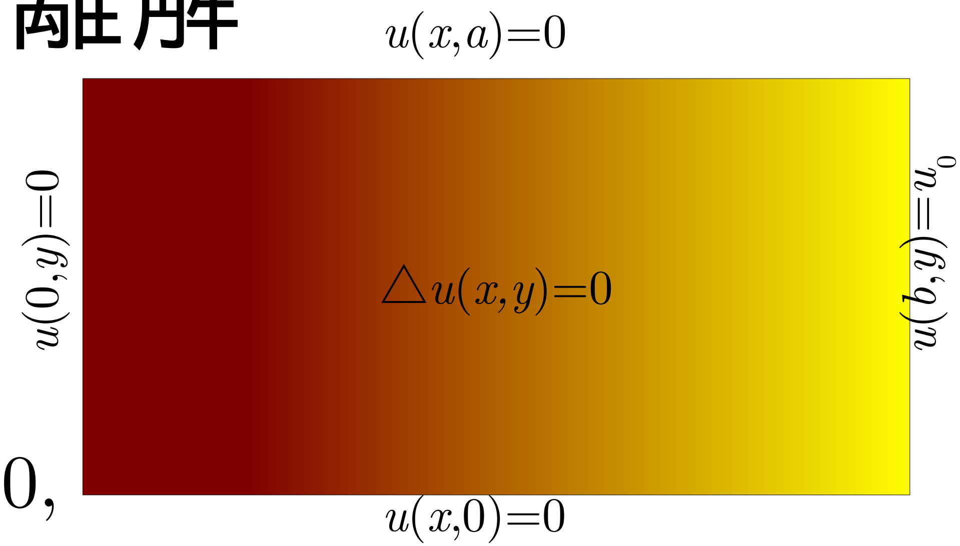
y方向 $$\left[1+\frac{2\tau}{\ell^2}\right]f_{jk}^{q+1}-\frac{f_{jk+1}^{q+1}+f_{jk-1}^{q+1}}{\ell^2}=\left[1-\frac{2\tau}{h^2}\right]f_{jk}^{q}+\frac{f_{j+1k}^{q}+f_{j-1k}^{q}}{h^2}$$

係数行列はx方向では$m\times m$、y方向では$n\times n$、それぞれ m個、n個の連立方程式を解くことになる

計算工学特論 I

有限要素法の準備

変数分離解



- Laplace方程式の境界値問題（定常状態の熱伝導方程式）

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0$$

$$u(x,0)=u(x,a)=u(0,y)=0,$$
$$u(b,y)=u_0,\ 0\le x\le a, 0\le y\le b.$$

- 変数分離の仮定を置き、1変数の微分方程式を得る、

$$u(x,y)=A(x)B(y)$$
$$\Rightarrow \triangle u=\triangle(AB)=A_{xx}(x)B(y)+A(x)B_{yy}(y)=0.$$

両辺をABで割って

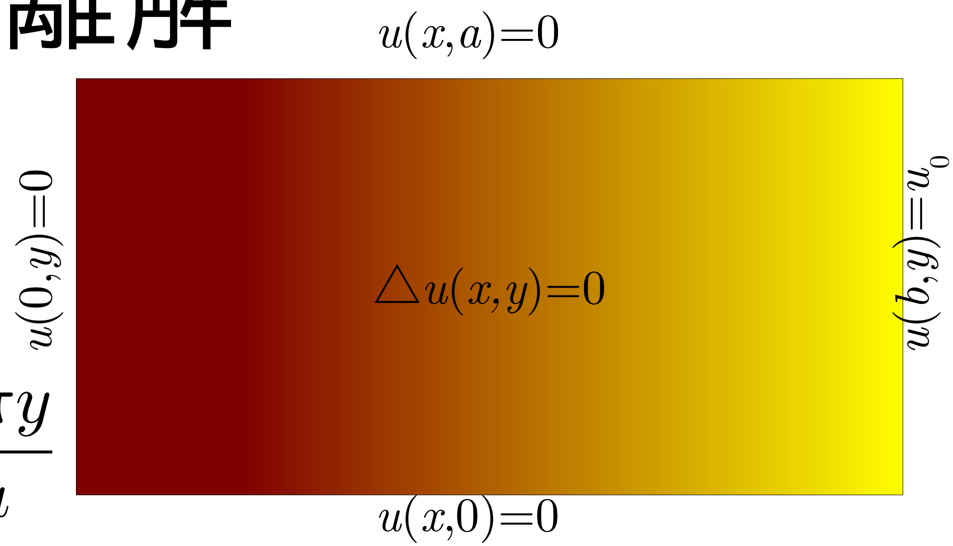
$$A_{xx}/A+B_{yy}/B=0\Rightarrow A_{xx}=\alpha^2 A, B_{yy}=\beta^2 B, \alpha^2+\beta^2=0.$$

- それぞれ解いて一般解を得る

$$u(x,y)=\sum_{\alpha,\beta,\alpha^2+\beta^2=0} u_{\alpha,\beta}(x,y)$$

$$u_{\alpha,\beta}(x,y)=[C_{\alpha+.}e^{\alpha x}+C_{\alpha-.}e^{-\alpha x}][C_{\beta+.}e^{\beta y}+C_{\beta-.}e^{-\beta y}]$$

変数分離解



- y方向の境界条件
  $u(x,0)=u(x,a)=0$
  を満たす β, $C_{\beta+}$, $C_{\beta-}$は?

$$C_{\beta+}\mathrm{e}^{\beta y}+C_{\beta-}\mathrm{e}^{-\beta y}=C_{\beta_n}\sin\frac{n\pi y}{a}$$

  すなわち $\beta=\mathrm{i}n\pi/a$, $C_{\beta+}=-C_{\beta-}=C_{\beta n}$ さらに $\alpha^2+\beta^2=0$ より
  $\alpha=n\pi/a$ これに $u(0,y)=0$を併せて

- 求めた$u_{\alpha\beta}(x,y)$で一般解を表せば

$$C_{\alpha+}\mathrm{e}^{\alpha x}+C_{\alpha-}\mathrm{e}^{-\alpha x}=C_{\alpha_n}[\mathrm{e}^{\alpha x}-\mathrm{e}^{-\alpha x}]=C_{\alpha_n}\sinh\frac{n\pi x}{a}$$

- 残った条件 $u(b,y)=u_0$ で C_n を決めれば良い

$$u(x,y)=\sum_n C_n\sinh\frac{n\pi x}{a}\sin\frac{n\pi y}{a}$$

スペクトル法

- 一番広い定義
  関数の重ね合せによる離散化法
  - 例えばLaplace方程式の境界値問題

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)u(x,y)=0 \qquad 0<x,y<1,$$

$$u(x,0)=x(1-x),\ u(x,1)\equiv u(0,y)\equiv(1,y)=0.$$

  - 近似解 $u(x,y)\sim U(x,y)=\sum_j c_j u_j(x,y)$
  - 重みを決める方法
    - 選点法　　　　　条件を撰点的に満すよう決める
    - 重み付き残差法　重み付き残差を利用して決める
      （重み付き残差をどのように定めるかが重要）

スペクトル法

- 一番広い定義
  関数の重ね合せによる離散化法

$$u(x,y) \sim U(x,y) = \sum_j c_j u_j(x,y)$$

- もう少し狭い定義
  スペクトルを用いたGalerkin法
  スペクトル：三角関数・平面波等

$$u_1(x), u_2(x), \ldots, w_1(x), w_2(x), \cdots = \sin x, \cos x, \sin 2x, \cos 2x, \ldots$$

  1次元なら、
  三角関数で展開、重みを付けた残差で条件を満す
  ⇒Fourier級数展開？

- 初期・境界条件についてはFourier級数展開的
  微分方程式を満す条件も考える必要がある

重み付き残差法(例:Galerkin法)

- 例:Poisson方程式の境界値問題

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)u(x,y)=v(x,y) \qquad 0<x,y<1,$$

$$u(x,0)=x(1-x),\ u(x,1)\equiv u(0,y)\equiv(1,y)=0.$$

- 近似解: $u(x,y)\sim U(x,y)=\sum_j c_j u_j(x,y)$

※境界条件は満たしていることにする

- 残差: $R(x,y,c_1,c_2,\dots)=\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)U(x,y)-v(x,y)$

$$=\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\sum_j c_j u_j(x,y)-v(x,y)$$

残差がゼロに近づくように近似解を定める

内積が射影であること
有限・無限の関数空間
積分・行列積
デルタ関数の定義

- 重み付残差：

$$\iint w_k(x,y)R(x,y,c_1,\dots)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \quad k=1,2,\dots$$

$$\sum_j c_j \iint w_k(x,y)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)u_j(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$
$$=\iint w_k(x,y)v(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \quad k=1,2,\dots$$

- Galerkin法： $w_1(x,y)=u_1(x,y), w_2(x,y)=u_2(x,y),\dots$

$$\sum_j c_j \iint u_k(x,y)\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)u_j(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$
$$=\iint w_k(x,y)v(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \quad k=1,2,\dots$$

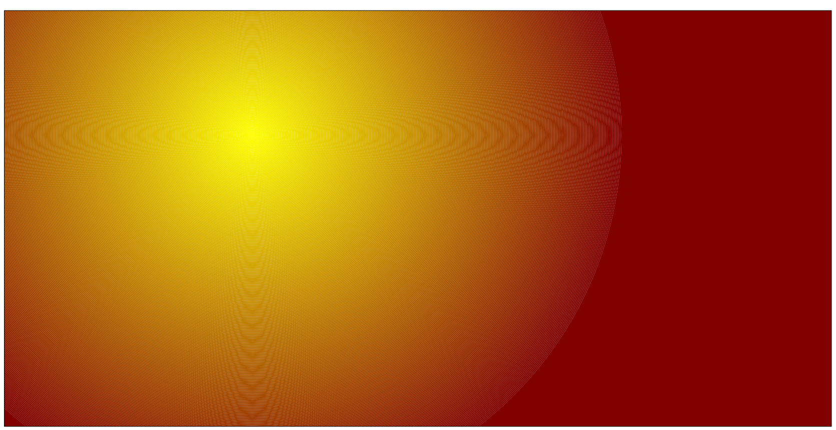
- 連立方程式を満たすように係数を決める

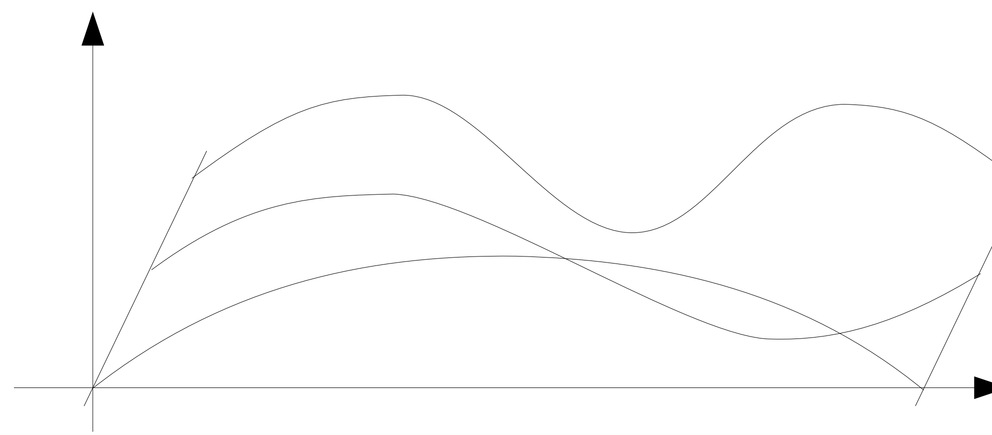
- Galerkin法：

$$\sum_j c_j \iint u_k(x,y) \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) u_j(x,y) \mathrm{d}x \mathrm{d}y = 0$$

$$k = 1, 2, \ldots$$

- 連立方程式を満たすように係数を決める





重み付き残差法(例:代用電荷法)

- 一番広い定義
  関数の重ね合せによる離散化法

$$u(x,y) \sim U(x,y) = \sum_j c_j u_j(x,y)$$

- もう少し狭い定義
  (Laplace方程式に)電荷を用いて近似解を構成
  電荷:logポテンシャル、Coulomb、Newtonポテンシャル
  ⇒Laplace方程式を自動的に満たす
  デルタ関数を用いた重み付き残差法=撰点法
- 微分方程式は自動的に満たされる
  電荷と撰点をどのように定めるか
  =試行関数・試験関数をどのように選ぶかが重要

代用電荷法によるLaplace方程式の解法

- 試行関数には電荷を模した基本解を用いる:
  厳密に調和関数になる

2次元 $$u \sim U(z) = \sum_j c_j \log|z - x_j|$$

3次元 $$u \sim U(z) = \sum_j c_j / |z - x_j|$$

- 試験関数（重み）にはデルタ関数を用いる
  （選点法を用いることと同等）

$$\int \dots \int \delta(z - y_k)(u(z) - \sum_j c_j u_j(z)) = u(y_k) - U(y_k) = 0$$

- 残差の計算に積分等は不要になる

ここまでのまとめ

- 熱伝導方程式、Laplace方程式、波動方程式
- 差分法(FDM: Finite Difference Method)
- 重みつき残差法とGalerkin法
  - 線形結合による近似解：$u \approx U = \Sigma_j c_j u_j$

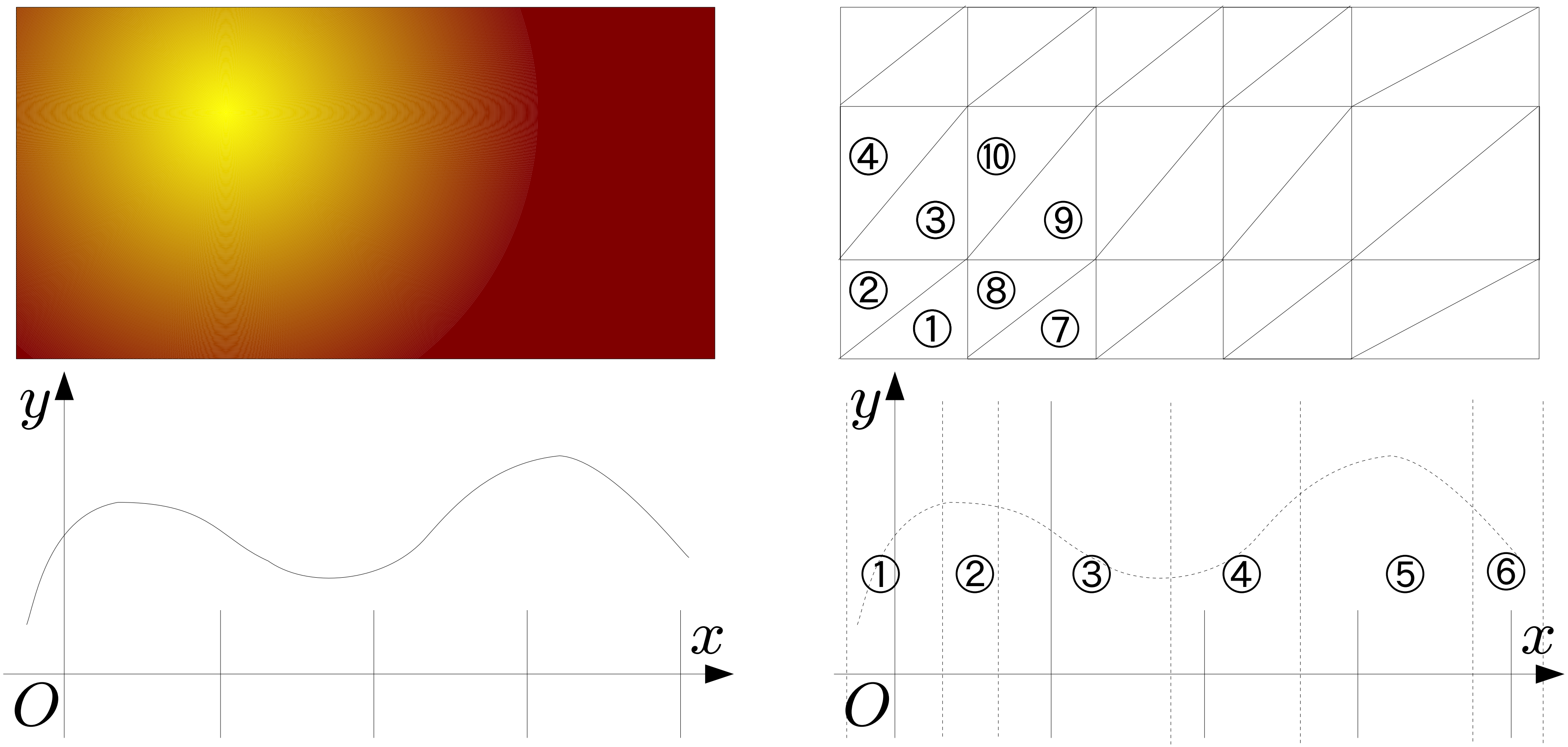
    u:厳密解、U:近似解、c_j:係数、u_j:基底関数
  - 重み付残差にもとづく係数決定

    $\int w_k [\triangle U\text{-}0] d\mathrm{x}=0$/最小化（Laplace方程式$\triangle u$=0の場合）

    w_k:重み関数、残差に含む重み関数成分を0/最小にする
  - Galerkin法：重み関数＝基底関数の重み付き残差法
- 有限要素法(FEM: Finite Element Method)

重み付き残差法としての有限要素法

- 有限要素分割（差分法での格子点配置）



- 有限要素毎に関数を割り付け、
パラメタ決定に重み付き残差法を用いる

有限要素法の位置付け

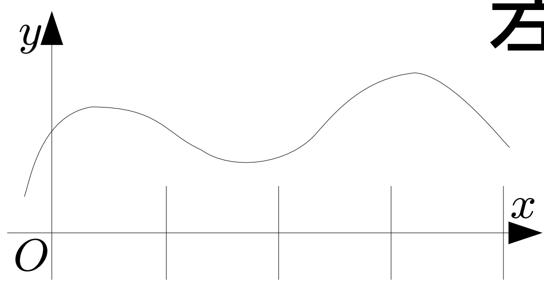
- 熱伝導方程式、Laplace方程式、波動方程式
- 差分法(FDM: Finite Difference Method)
- 重みつき残差法とGalerkin法
  - 線形結合による近似解: $u \approx U = \Sigma_j c_j u_j$

    u:厳密解、U:近似解、c_j:係数、u_j:基底関数
  - 重み付残差にもとづく係数決定

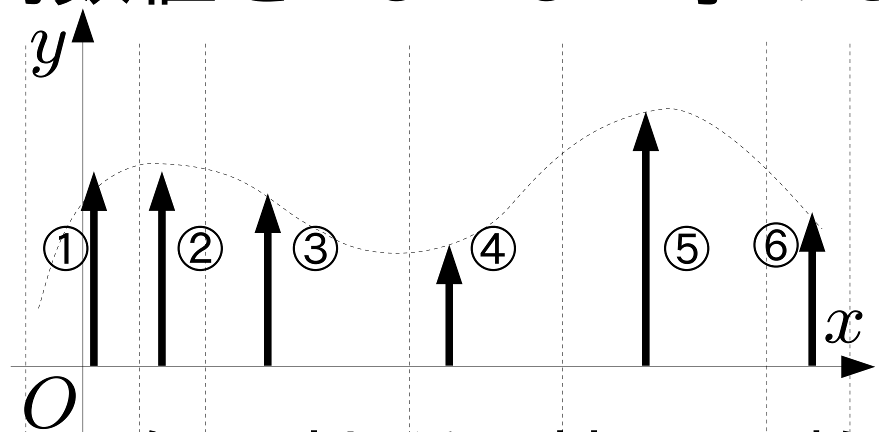
    $\int w_k[\triangle U\text{-}0]dx=0$/最小化（Laplace方程式$\triangle u=0$の場合）

    w_k:重み関数、残差に含む重み関数成分を0/最小にする
  - Galerkin法：重み関数＝基底関数の重み付き残差法
- 有限要素法(FEM: Finite Element Method)

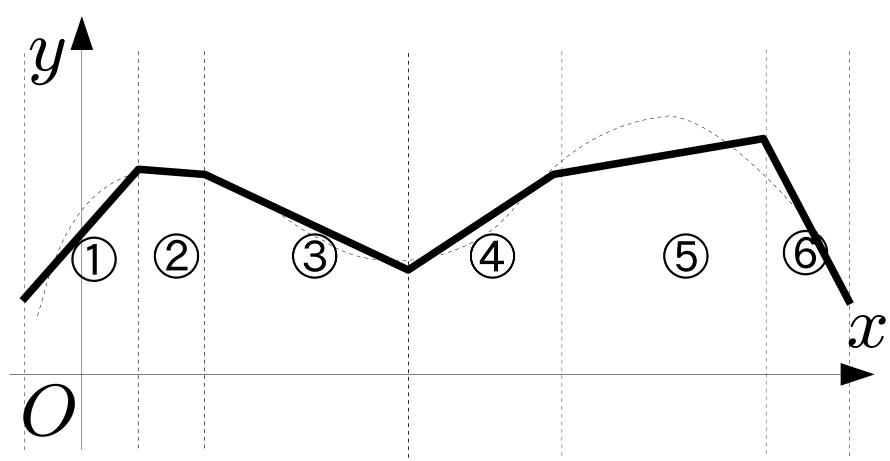
差分法と有限要素法



- 差分法：解の関数値をとびとびに求める



- 有限要素法：解に似た性質を持つ関数を求める

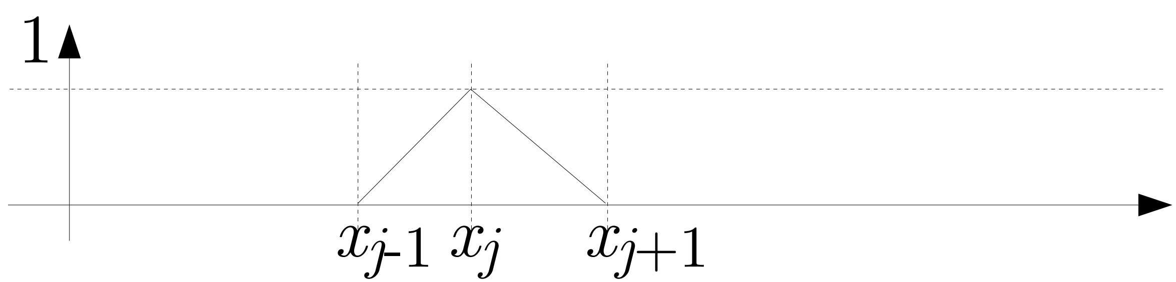


折れ線近似のための基底関数

- 折れ線関数を用いた関数近似のために、どのような基底関数列を用いればよいのか。

- コンパクトな台を持つ1次関数による基底関数
  $u_0(x),\ldots,u_{\mathrm{N}}(x)$

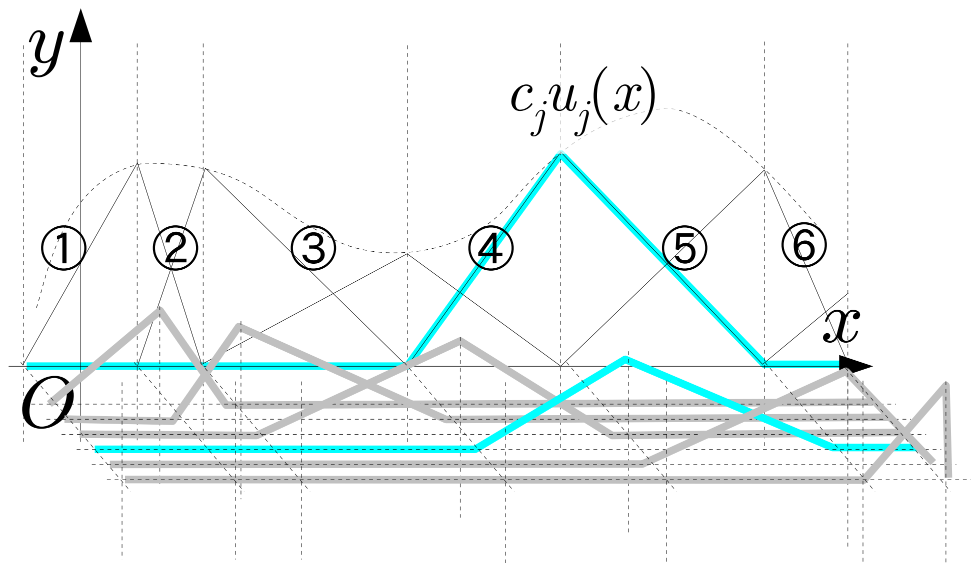
$u_j(x)$



※$x_0,\ldots,x_{\mathrm{N}}$（節点）、$f_0,\ldots,\mathrm{f}_{\mathrm{N}}$（節点での関数値）を使う

折れ線近似のための基底関数

- 有限要素分割



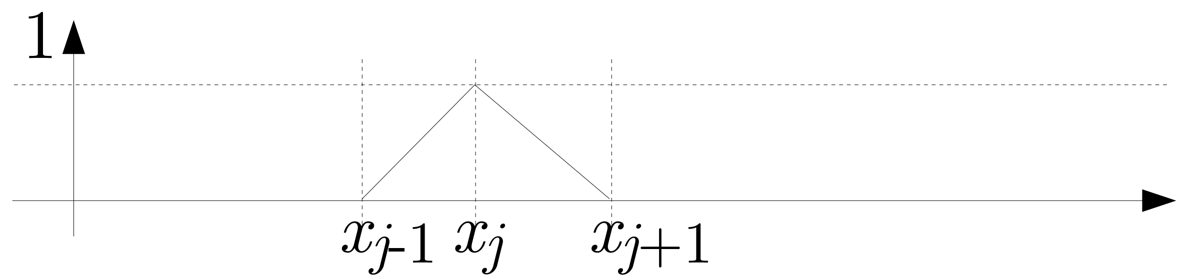
折れ線関数$u_1,\ldots,u_n$に重み$c_1,\ldots,c_n$をかけて近似する

- 有限要素毎に関数を割り付け、
パラメタ決定に重み付き残差法を用いる

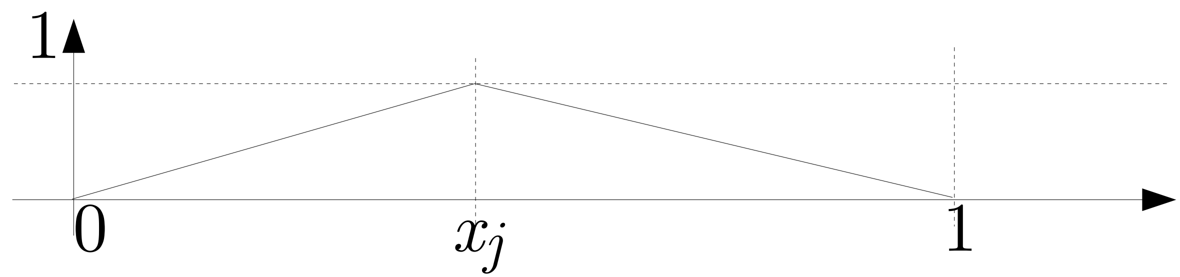
演習問題

- 区間$[0,1]$の任意の折れ線関数を次の関数列の重ね合せで表現できることを示しなさい。

- $u_0(x),\ldots,u_\mathrm{N}(x)$



- $v_0(x),\ldots,v_\mathrm{N}(x)$



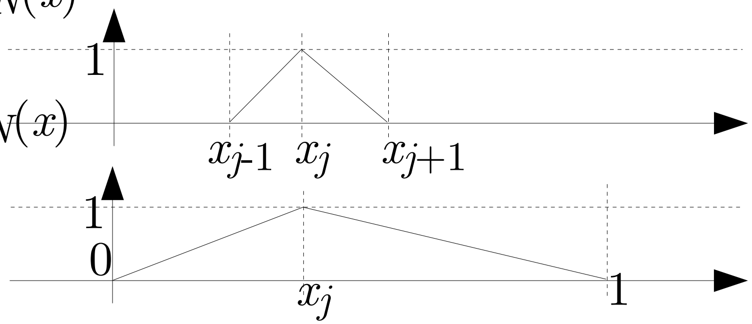
※$x_0,\ldots,x_\mathrm{N}$（節点）、$f_0,\ldots,\mathrm{f}_\mathrm{N}$（節点での関数値）を使う

授業レポート用紙：氏名（　　　　　　　　　　）学籍番号(　　　　　　)

区間[0,1]の任意の折れ線関数を次の関数列の重ね合せで表現できることを示しなさい。

$u_0(x),\ldots,u_N(x)$

$v_0(x),\ldots,v_N(x)$



区間[0,1]で連続で、節点 $x_0=0<x_1<\ldots<x_N=1$ で関数値$f_0,\ldots,f_N$をとり、隣接する節点の間の区間で1次関数となる「折れ線関数」は一意に定まるので、この条件を満す関数を示せばよい。

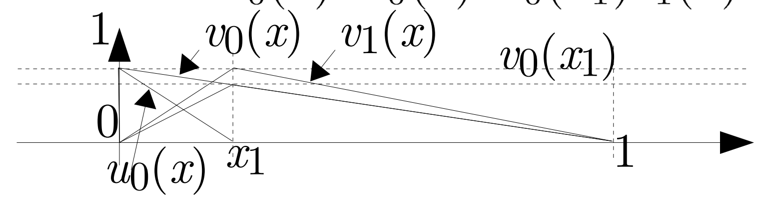
$u_j(x)$ $(j=0,1,2,\ldots)$は小区間$[x_{j\text{-}1}<x_j],[x_j<x_{j+1}]$で$1$次関数となる、区間$[0,1]$の連続関数なので、その重ね合せも、小区間で$1$次関数となる連続関数。

$\Sigma_j\, f_j u_j(x)$とすれば、節点で与えられた関数値を取り、「折れ線関数」の条件を満す。

$u_0(x),\ldots,u_N(x)$を$v_0(x),\ldots,v_N(x)$の重ね合せで表現できれば良い。

$[0,1]$において

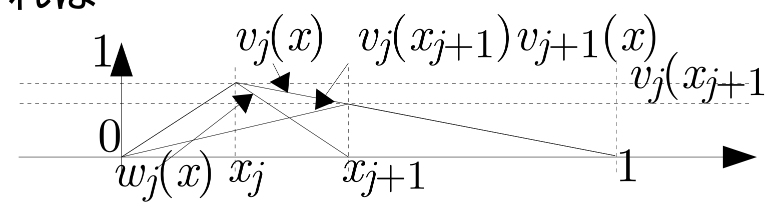
$$u_0(x)=v_0(x)-v_0(x_1)v_1(x)$$



さらに、$j\geq 1$で

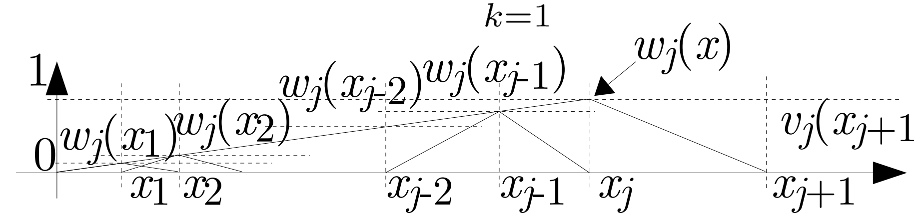
$$w_j(x)=\frac{v_j(x)-v_j(x_{j+1})v_{j+1}(x)}{v_j(x_j)-v_j(x_{j+1})v_{j+1}(x_j)}$$

とすれば



一般にu_jを$w_j,u_1,\ldots,u_{j\text{-}1}$で表現できる

$$u_j(x)=w_j(x)-\sum_{k=1}^{j-1} w_k(x_k)u_k(x)$$



できれば授業の感想も書いてください。

授業レポート用紙：氏名（　　　　　　　　　　）学籍番号(　　　　　　　)

2019年11月12日（火）

できれば授業の感想も書いてください。