円柱領域における熱方程式に対する差分法

桂田 祐史

2005 年 3 月 15 日

ただ今ひたすら工事中。

1 円柱における Dirichlet 境界条件下の熱方程式

1.1 はじめに

この話を始めたときは ADI 法が良いと信じていたが、後述するようにそれは間違いである可能性も出て来た。現在は θ に関する導関数の項を陰的に扱うのが良い、という感触を持っているが、その方法はこの節で説明する ADI 法の第 2 段階 (第 $n+1/3$ 段→ $n+2/3$ 段) と本質的に同じであるので、この説明はこのまま残しておく。

1.2 円柱座標への変換

半径 R, 高さ H の円柱 $\Omega := \{(x,y,z); x^2+y^2<R^2,\ 0<z<H\}$ で熱方程式の Dirichlet 境界値問題

$$u_t = \triangle u \quad (\text{in } \Omega \times (0,\infty)), \tag{1}$$

$$u(x,t) = b(x) \quad ((x,t) \in \Gamma \times (0,\infty)), \tag{2}$$

$$u(x,0) = u_0(x) \quad (x \in \overline{\Omega}) \tag{3}$$

を解く。ここで Γ は Ω の境界である。

円柱座標

$$x = r\cos\theta, \quad y = r\sin\theta, \quad z = z$$

を導入すると、Ω に対応するのは

$$\widetilde{\Omega} := \{(r,\theta,z); 0 \le r < R,\ 0 \le \theta < 2\pi,\ 0 < z < H\}$$

であり、Γ に対応するのは

$$\widetilde{\Gamma} := \Gamma_{\mathrm{b}} \cup \Gamma_{\mathrm{t}} \cup \Gamma_{\mathrm{s}},$$

ただし

$$\Gamma_{\mathrm{s}} := \{(R,\theta,z); \theta \in [0,2\pi),\ z \in (0,H)\},$$

$$\Gamma_{\mathrm{b}} := \{(r,\theta,0); r \in [0,R],\ \theta \in [0,2\pi)\},$$

$$\Gamma_{\mathrm{t}} := \{(r,\theta,H); r \in [0,R],\ \theta \in [0,2\pi)\}$$

である。
　熱方程式は

$$\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial r^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial \theta^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\quad ((r,\theta,z)\in\widetilde{\Omega},\ t>0), \tag{4}$$

$$u(r,\theta,z,t)=b(r,\theta,z,t)\quad ((r,\theta,z)\in\widetilde{\Gamma},\ t>0), \tag{5}$$

$$u(r,\theta,z,0)=u_0(r,\theta,z)\quad ((r,\theta,z)\in\overline{\widetilde{\Omega}}) \tag{6}$$

に変換される。

1.3　格子点

　$N_r,\ N_\theta,\ N_z\in\mathbf{N}$ と $\tau>0$ を選ぶ。

$$h_r:=\frac{R}{N_r},\quad h_\theta:=\frac{2\pi}{N_\theta},\quad h_z:=\frac{H}{N_z},$$
$$\lambda_r:=\frac{\tau/3}{h_r^2},\quad \lambda_\theta:=\frac{\tau/3}{h_\theta^2},\quad \lambda_z:=\frac{\tau/3}{h_z^2}$$

とおく。
　$r\theta z$ 空間の格子点の座標 (r_i,θ_j,z_k) は

$$r_i:=ih_r\quad (0\le i\le N_r),\quad \theta_j:=jh_\theta\quad (0\le j\le N_\theta-1),\quad z_k:=kh_z\quad (0\le k\le N_z)$$

で定める。
　時刻については

$$t_\ell:=\ell\tau$$

であるが、ADI 法を採用するため、ℓ は非負整数 n だけでなく、$n+1/3,\ n+2/3$ という (分母が 3 の分数である) 半端な数も許す。
　U_{ijk}^ℓ は $u_{ijk}^\ell:=u(r_i,\theta_j,z_k,t_\ell)$ の近似値に採用するつもりの量である:

$$U_{ijk}^\ell\simeq u(r_i,\theta_j,z_k,t_\ell).$$

　(後述する) 差分方程式に $U_{i,-1,k}^\ell,\ U_{i,N_\theta,k}^\ell$ が現れるが、もちろん $\theta\in\mathbf{R}/2\pi\mathbf{Z}$ と考えているので、それぞれ $U_{i,N_\theta-1,k}^\ell,\ U_{i,0,k}^\ell$ で置き換えて処理する。
　また任意の $k\in\{0,1,\cdots,N_z\}$ に対して、U_{0jk}^ℓ は j が何であっても $(x,y,z)=(0,0,z_k)$ という一つの点での値を表しているものであるから、値は同じである:

$$U_{0jk}^\ell=U_{00k}^\ell\quad (1\le j\le N_\theta-1).$$

1.4　境界条件

　まず境界条件 $u(r,\theta,z)=b(r,\theta,z)$ ($r=R$ または $z=0$ または $z=H$) より

$$\begin{aligned}
U_{N_r jk}^{n+1/3}&=b(R,\theta_j,z_k)\quad (0\le j\le N_\theta-1,\ 1\le k\le N_z-1),\\
U_{ij0}^{n+1/3}&=b(r_i,\theta_j,0)\quad (0\le i\le N_r,\ 0\le j\le N_\theta-1),\\
U_{ijN_z}^{n+1/3}&=b(r_i,\theta_j,H)\quad (0\le i\le N_r,\ 0\le j\le N_\theta-1).
\end{aligned} \tag{7}$$

1.5 円柱の中心軸 $(r=0)$ におけるラプラシアンの近似

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

$$\begin{aligned}
\triangle u(0,0,z_k,t_\ell) &\fallingdotseq \frac{u^\ell_{10k} - 2u^\ell_{00k} + u^\ell_{-1,0,k}}{h_r^2} + \frac{u^\ell_{01k} - 2u^\ell_{00k} + u^\ell_{0,-1,k}}{h_r^2} + \frac{u^\ell_{00,k+1} - 2u^\ell_{00k} + u^\ell_{00,k-1}}{h_z^2} \\
&= \frac{4}{h_r^2}\left(\frac{u^\ell_{10k} + u^\ell_{-1,0,k} + u^\ell_{01k} + u^\ell_{0,-1,k}}{4} - u^\ell_{00k}\right) + \frac{u^\ell_{00,k+1} - 2u^\ell_{00k} + u^\ell_{00,k-1}}{h_z^2}
\end{aligned}$$

のような差分近似が考えられる。

ラプラシアンの回転対称性を考慮すれば

$$\triangle u(0,0,z_k,t_\ell) \fallingdotseq \frac{4}{h_r^2}\left(\frac{1}{N_\theta}\sum_{j=0}^{N_\theta-1} u^\ell_{0jk} - u^\ell_{00k}\right) + \frac{u^\ell_{00,k+1} - 2u^\ell_{00k} + u^\ell_{00,k-1}}{h_z^2}.$$

次の差分方程式を採用する。

$$\frac{U^{\ell+1/3}_{00k} - U^\ell_{00k}}{\tau/3} = \frac{4}{h_r^2}\left(\frac{1}{N_\theta}\sum_{j=0}^{N_\theta-1} U^\ell_{0jk} - U^\ell_{00k}\right) + \frac{U^\ell_{00,k+1} - 2U^\ell_{00k} + U^\ell_{00,k-1}}{h_z^2}.$$

これを整理すると

$$\begin{aligned}
U^{\ell+1/3}_{00k} &= U^\ell_{00k} + \frac{\tau}{3}\left[\frac{4}{h_r^2}\left(\frac{1}{N_\theta}\sum_{j=0}^{N_\theta-1} U^\ell_{0jk} - U^\ell_{00k}\right) + \frac{U^\ell_{00,k+1} - 2U^\ell_{00k} + U^\ell_{00,k-1}}{h_z^2}\right] \\
&= U^\ell_{00k} + 4\lambda_r\left(\frac{1}{N_\theta}\sum_{j=0}^{N_\theta-1} U^\ell_{0jk} - U^\ell_{00k}\right) + \lambda_z(U^\ell_{00,k+1} - 2U^\ell_{00k} + U^\ell_{00,k-1}) \\
&\qquad (k = 1, 2, \ldots, N_z - 1).
\end{aligned}$$

(これは陽公式である。原点だけでも陽的に求めるのは安定性に影響するだろうか？陰的に扱うとどうなるのか。)

1.6 第 n 段から第 $n+1/3$ 段へ: r 方向に陰的に進める

やはり空間微分に関しては中心差分近似を用い、特に r 方向に陰的になるようにすると次の差分方程式を得る。

$$\begin{aligned}
\text{(8)}\qquad \frac{U^{n+1/3}_{ijk} - U^n_{ijk}}{\tau/3} &= \frac{U^{n+1/3}_{i+1,j,k} - 2U^{n+1/3}_{ijk} + U^{n+1/3}_{i-1,j,k}}{h_r^2} + \frac{1}{r_i}\frac{U^{n+1/3}_{i+1,j,k} - U^{n+1/3}_{i-1,jk}}{2h_r} \\
&\quad + \frac{1}{r_i^2}\frac{U^n_{i,j+1,k} - 2U^n_{i,j,k} + U^n_{i,j-1,k}}{h_\theta^2} + \frac{U^n_{i,j,k+1} - 2U^n_{i,j,k} + U^n_{i,j,k-1}}{h_z^2}. \\
&\qquad (1 \le i \le N_r - 1,\ 0 \le j \le N_\theta - 1,\ 1 \le k \le N_z - 1).
\end{aligned}$$

ただし $j=0$ のときの $U^n_{i,j-1,k}$ と $j=N_\theta-1$ のときの $U^n_{i,j+1,k}$ については

$$(9)\qquad U^n_{i,-1,k}=U^n_{i,N_\theta-1,k},\quad U^n_{i,N_\theta,k}=U^n_{i,0,k}\qquad (1\le i\le N_r-1,\ 1\le k\le N_z-1)$$

と考える。

等式 (8) の両辺に $\tau/3$ をかける。その際

$$\frac{\tau}{3}\cdot\frac{1}{r_i\cdot 2h_r}=\frac{\tau/3}{2ih_r^2}=\frac{\lambda_r}{2i}$$

に注意すれば

$$\begin{aligned}U^{n+1/3}_{ijk}-U^n_{ijk} &= \lambda_r\left(U^{n+1/3}_{i+1,j,k}-2U^{n+1/3}_{ijk}+U^{n+1/3}_{i-1,j,k}\right)+\frac{\lambda_r}{2i}\left(U^{n+1/3}_{i+1,j,k}-U^{n+1/3}_{i-1,jk}\right)\\ &\quad +\frac{\lambda_\theta}{r_i^2}\left(U^n_{i,j+1,k}-2U^n_{i,j,k}+U^n_{i,j-1,k}\right)+\lambda_z\left(U^n_{i,j,k+1}-2U^n_{i,j,k}+U^n_{i,j,k-1}\right).\end{aligned}$$

移項して

$$(10)\qquad \begin{aligned}&(1+2\lambda_r)U^{n+1/3}_{ijk}-\lambda_r\left[\left(1-\frac{1}{2i}\right)U^{n+1/3}_{i-1,jk}+\left(1+\frac{1}{2i}\right)U^{n+1/3}_{i+1,jk}\right]\\ &= \left(1-\frac{2\lambda_\theta}{r_i^2}-2\lambda_z\right)U^n_{ijk}+\frac{\lambda_\theta}{r_i^2}(U^n_{i,j+1,k}+U^n_{i,j-1,k})+\lambda_z(U^n_{ij,k+1}+U^n_{ij,k-1}).\end{aligned}$$

この連立1次方程式を行列とベクトルで表現しよう。まず N_r-1 次正方行列 A を

$$\begin{aligned}&A_r:=(1+2\lambda_r)I_{N_r-1}-\lambda_r K_{N_r-1},\\ &I_{N_r-1}:=(N_r-1)\text{ 次単位行列},\\ &K_{N_r-1}:=\begin{pmatrix} 0 & 1+\frac{1}{2\cdot 1} & & & \\ 1-\frac{1}{2\cdot 2} & 0 & 1+\frac{1}{2\cdot 2} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1-\frac{1}{2(N_r-2)} & 0 & 1+\frac{1}{2(N_r-2)} \\ & & & 1-\frac{1}{2(N_r-1)} & 0\end{pmatrix}\end{aligned}$$

で定め、さらに $0\le j\le N_\theta-1$, $1\le k\le N_z-1$ に対して N_r-1 次元ベクトル $\boldsymbol{U}^{n+1/3}_{jk}$, $\boldsymbol{b}^n_{jk}$ を

$$\boldsymbol{U}^{n+1/3}_{jk}:=\left(U^{n+1/3}_{1jk},U^{n+1/3}_{2jk},\cdots,U^{n+1/3}_{N_r-1,jk}\right)^T,$$

$$\boldsymbol{b}^n_{jk}:=\begin{bmatrix}\beta_1U^n_{1jk}+\dfrac{\lambda_\theta}{r_1^2}(U^n_{1,j+1,k}+U^n_{1,j-1,k})+\lambda_z(U^n_{1j,k+1}+U^n_{1j,k-1})\\ \vdots\\ \beta_iU^n_{ijk}+\dfrac{\lambda_\theta}{r_i^2}(U^n_{i,j+1,k}+U^n_{i,j-1,k})+\lambda_z(U^n_{ij,k+1}+U^n_{ij,k-1})\\ \vdots\\ \beta_mU^n_{m,jk}+\dfrac{\lambda_\theta}{r_m}(U^n_{m,j+1,k}+U^n_{m,j-1,k})+\lambda_z(U^n_{m,j,k+1}+U^n_{m,j,k-1})\end{bmatrix}+\lambda_r\begin{pmatrix}\left(1-\frac{1}{2}\right)U^{n+1/3}_{0jk}\\ 0\\ \vdots\\ 0\\ \left(1+\frac{1}{2m}\right)U^{n+1/3}_{N_rjk}\end{pmatrix},$$

$$m:=N_r-1,\quad \beta_i:=1-\frac{2\lambda_\theta}{r_i^2}-2\lambda_z\quad(1\le i\le N_r-1)$$

で定めると、(10) は

$$A_r \boldsymbol{U}_{jk}^{n+1/3} = \boldsymbol{b}_{jk}^n \tag{11}$$

と表せる。

なお、$\boldsymbol{b}_{jk}^n$ の計算で、第 $n+1/3$ 段での値 $U_{0jk}^{n+1/3}$, $U_{N_r jk}^{n+1/3}$ が必要になるが、それぞれ

$$U_{0jk}^{n+1/3} = U_{00k}^{n+1/3} = U_{00k}^n + 4\lambda_r \left[\frac{1}{N_\theta} \sum_{j=0}^{N_\theta - 1} U_{0jk}^n - U_{00k}^n \right] + \lambda_z \left(U_{00,k+1}^n - 2U_{00k}^n + U_{00,k-1}^n \right), \tag{12}$$

$$U_{N_r jk}^{n+1/3} = b(R, \theta_j, z_k, t_{n+1/3}) \tag{13}$$

で計算すればよい。

まとめると次のようになる。

第 n 段から第 $n+1/3$ 段

(i) (7) を用いて境界上での値

$$U_{N_r jk}^{n+1/3} \quad (0 \le j \le N_\theta - 1,\ 1 \le k \le N_z),$$

$$U_{ij0}^{n+1/3} \quad (0 \le i \le N_r,\ 0 \le j \le N_\theta - 1),$$

$$U_{ijN_z}^{n+1/3} \quad (0 \le i \le N_r,\ 0 \le j \le N_\theta - 1)$$

を求める。

(ii) (12) を用いて中心軸 (ただし境界は除く) 上での値

$$U_{0jk}^{n+1/3} \quad (0 \le j \le N_\theta - 1,\ 1 \le k \le N_z - 1)$$

を求める。

(iii) (11) を用いて、領域内部 (から中心軸を除いた部分) での値

$$U_{ijk}^{n+1/3} \quad (1 \le i \le N_r - 1,\ 0 \le j \le N_\theta - 1,\ 1 \le k \le N_z - 1)$$

を求める。

1.7 第 $n+1/3$ 段から第 $n+2/3$ 段へ: θ 方向に陰的に進める

やはり空間微分に関しては中心差分近似を用い、特に θ 方向に陰的になるようにすると次の差分方程式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{U_{ijk}^{n+2/3} - U_{ijk}^{n+1/3}}{\tau/3} &= \frac{U_{i+1,j,k}^{n+1/3} - 2U_{ijk}^{n+1/3} + U_{i-1,j,k}^{n+1/3}}{h_r^2} + \frac{1}{r_i} \frac{U_{i+1,j,k}^{n+1/3} - U_{i-1,jk}^{n+1/3}}{2h_r} \\ &\quad + \frac{1}{r_i^2} \frac{U_{i,j+1,k}^{n+2/3} - 2U_{i,j,k}^{n+2/3} + U_{i,j-1,k}^{n+2/3}}{h_\theta^2} + \frac{U_{i,j,k+1}^{n+1/3} - 2U_{i,j,k}^{n+1/3} + U_{i,j,k-1}^{n+1/3}}{h_z^2} \\ &\qquad (1 \le i \le N_r - 1,\ 0 \le j \le N_\theta - 1,\ 1 \le k \le N_z - 1). \end{aligned} \tag{14}$$

上と同様に $\tau/3$ をかけて分母を払って

$$
\begin{aligned}
U_{ijk}^{n+2/3} - U_{ijk}^{n+1/3} &= \lambda_r \left(U_{i+1,j,k}^{n+1/3} - 2U_{ijk}^{n+1/3} + U_{i-1,j,k}^{n+1/3} \right) + \frac{\lambda_r}{2i} \left(U_{i+1,j,k}^{n+1/3} - U_{i-1,jk}^{n+1/3} \right) \\
&\quad + \frac{\lambda_\theta}{r_i^2} \left(U_{i,j+1,k}^{n+2/3} - 2U_{i,j,k}^{n+2/3} + U_{i,j-1,k}^{n+2/3} \right) + \lambda_z \left(U_{i,j,k+1}^{n+1/3} - 2U_{i,j,k}^{n+1/3} + U_{i,j,k-1}^{n+1/2} \right).
\end{aligned}
$$

移項して

$$
\begin{aligned}
(15) \qquad & \left(1 + \frac{2\lambda_\theta}{r_i^2}\right) U_{ijk}^{n+2/3} - \frac{\lambda_\theta}{r_i^2} \left(U_{i,j+1,k}^{n+2/3} + U_{i,j-1,k}^{n+2/3} \right) \\
&= (1 - 2\lambda_r - 2\lambda_z) U_{ijk}^{n+1/3} + \lambda_r \left[\left(1 + \frac{1}{2i}\right) U_{i+1,j,k}^{n+1/3} + \left(1 - \frac{1}{2i}\right) U_{i-1,j,k}^{n+1/3} \right] \\
&\quad + \lambda_z \left(U_{ij,k+1}^{n} + U_{ij,k-1}^{n} \right).
\end{aligned}
$$

各 $i \in \{1, 2, \cdots, N_r - 1\}$, $k \in \{1, 2, \cdots, N_z - 1\}$ に対して、まず N_θ 次正方行列 A_i を

$$
A_i := \left(1 + \frac{2\lambda_\theta}{r_i^2}\right) I_{N_\theta} - \frac{\lambda_\theta}{r_i^2} L_{N_\theta}, \quad L_{N_\theta} := \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & 1 \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ 1 & & & 1 & 0 \end{pmatrix}
$$

で定め、N_θ 次元ベクトル $\boldsymbol{U}_{ik}^{\ell}$ $(\ell = n + 1/3,\, n + 2/3)$, $\boldsymbol{b}_{ik}^{n+2/3}$ を

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{U}_{ik}^{\ell} &:= \left(U_{i0k}^{\ell}, U_{i1k}^{\ell}, \cdots, U_{i,N_\theta-1,k}^{\ell} \right)^T, \\
\boldsymbol{b}_{ik}^{n+2/3} &:= \left[1 - 2(\lambda_r + \lambda_z)\right] \boldsymbol{U}_{ik}^{n+1/3} + \lambda_r \left[\left(1 + \frac{1}{2i}\right) \boldsymbol{U}_{i+1,k}^{n+1/3} + \left(1 - \frac{1}{2i}\right) \boldsymbol{U}_{i-1,k}^{n+1/3} \right] \\
&\quad + \lambda_z \left(\boldsymbol{U}_{i,k+1}^{n} + \boldsymbol{U}_{i,k-1}^{n} \right)
\end{aligned}
$$

で定める。

このとき (15) は次のように表せる。

$$
(16) \qquad A_i \boldsymbol{U}_{ik}^{n+2/3} = \boldsymbol{b}_{ik}^{n+1/3}.
$$

まとめると次のようになる。

第 $n+1/3$ 段から第 $n+2/3$ 段

(i) (7) を用いて境界上での値

$$U_{N_r jk}^{n+2/3} \quad (0 \le j \le N_\theta - 1,\, 1 \le k \le N_z),$$

$$U_{ij0}^{n+2/3} \quad (0 \le i \le N_r,\, 0 \le j \le N_\theta - 1),$$

$$U_{ijN_z}^{n+2/3} \quad (0 \le i \le N_r,\, 0 \le j \le N_\theta - 1)$$

を求める。

(ii) (12) を用いて中心軸 (ただし境界は除く) 上での値

$$U_{0jk}^{n+2/3} \quad (0 \le j \le N_\theta - 1,\, 1 \le k \le N_z - 1)$$

を求める。

(iii) (16) を用いて、領域内部 (から中心軸を除いた部分) での値

$$U_{ijk}^{n+2/3} \quad (1 \le i \le N_r - 1,\, 0 \le j \le N_\theta - 1,\, 1 \le k \le N_z - 1)$$

を求める。

1.8 第 $n+2/3$ 段から第 $n+1$ 段へ: z 方向に陰的に進める

やはり空間微分に関しては中心差分近似を用い、特に z 方向に陰的になるようにすると次の差分方程式を得る。

$$(17)\quad \begin{aligned} \frac{U_{ijk}^{n+1} - U_{ijk}^{n+2/3}}{\tau/3} &= \frac{U_{i+1,j,k}^{n+2/3} - 2U_{ijk}^{n+2/3} + U_{i-1,j,k}^{n+2/3}}{h_r^2} + \frac{1}{r_i}\frac{U_{i+1,j,k}^{n+2/3} - U_{i-1,jk}^{n+2/3}}{2h_r} \\ &\quad + \frac{1}{r_i^2}\frac{U_{i,j+1,k}^{n+2/3} - 2U_{i,j,k}^{n+2/3} + U_{i,j-1,k}^{n+2/3}}{h_\theta^2} + \frac{U_{i,j,k+1}^{n+1} - 2U_{i,j,k}^{n+1} + U_{i,j,k-1}^{n+1}}{h_z^2} \\ &\qquad (1 \le i \le N_r - 1,\, 0 \le j \le N_\theta - 1,\, 1 \le k \le N_z - 1). \end{aligned}$$

上と同様に $\tau/3$ をかけて分母を払って

$$\begin{aligned} U_{ijk}^{n+1} - U_{ijk}^{n+2/3} &= \lambda_r \left(U_{i+1,j,k}^{n+2/3} - 2U_{ijk}^{n+2/3} + U_{i-1,j,k}^{n+2/3}\right) + \frac{\lambda_r}{2i}\left(U_{i+1,j,k}^{n+2/3} - U_{i-1,jk}^{n+2/3}\right) \\ &\quad + \frac{\lambda_\theta}{r_i^2}\left(U_{i,j+1,k}^{n+2/3} - 2U_{i,j,k}^{n+2/3} + U_{i,j-1,k}^{n+2/3}\right) + \lambda_z \left(U_{i,j,k+1}^{n+1} - 2U_{i,j,k}^{n+1} + U_{i,j,k-1}^{n+1}\right). \end{aligned}$$

移項して

$$\begin{aligned} &(1+2\lambda_z)U_{ijk}^{n+1} - \lambda_z \left(U_{i,j,k+1}^{n+1} + U_{i,j,k-1}^{n+1}\right) \\ &\quad = \left(1 - 2\lambda_r - \frac{2\lambda_\theta}{r_i^2}\right) U_{ijk}^{n+2/3} + \lambda_r \left[\left(1 + \frac{1}{2i}\right) U_{i+1,j,k}^{n+2/3} + \left(1 - \frac{1}{2i}\right) U_{i-1,j,k}^{n+2/3}\right] + \frac{\lambda_\theta}{r_i^2}\left(U_{i,j+1,k}^{n+2/3} + U_{i,j-1,k}^{n+2/3}\right). \end{aligned}$$

N_z-1 次正方行列 A_z を

$$A_z := (1+2\lambda_z)I_{N_z-1} - \lambda_z J_{N_z-1}, \quad J_{N_z-1} := \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

で定める。

N_z-1 次元ベクトル $\boldsymbol{U}_{ij}^{\ell}$ $(\ell = n+2/3,\, n+1)$, $\boldsymbol{b}_{ij}^{n+2/3}$ を

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{U}_{ij}^{n+1} &:= \left(U_{ij1}^{n+1}, U_{ij2}^{n+1}, \cdots, U_{ij,N_z-1}^{n+1}\right)^T, \\
\boldsymbol{b}_{ij}^{n+2/3} &:= \left(1-2\lambda_r-\frac{2\lambda_\theta}{r_i^2}\right)\boldsymbol{U}_{ij}^{n+2/3} + \lambda_r\left[\left(1+\frac{1}{2i}\right)\boldsymbol{U}_{i+1,j}^{n+2/3} + \left(1-\frac{1}{2i}\right)\boldsymbol{U}_{i-1,j}^{n+2/3}\right] \\
&\quad + \frac{\lambda_\theta}{r_i^2}\left(\boldsymbol{U}_{i,j+1}^{n+2/3} + \boldsymbol{U}_{i,j-1}^{n+2/3}\right) + \lambda_z \begin{bmatrix} U_{ij0}^{n+1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ U_{ijN_z}^{n+1} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

で定めると

$$A_z\boldsymbol{U}_{ij}^{n+1} = \boldsymbol{b}_{ij}^{n+2/3} \quad (1 \le i \le N_r-1,\, 0 \le j \le N_\theta-1). \tag{18}$$

まとめると次のようになる。

第 $n+2/3$ 段から第 $n+1$ 段

(i) (7) を用いて境界上での値

$$U_{N_rjk}^{n+1} \quad (0 \le j \le N_\theta-1,\, 1 \le k \le N_z),$$
$$U_{ij0}^{n+1} \quad (0 \le i \le N_r,\, 0 \le j \le N_\theta-1),$$
$$U_{ijN_z}^{n+1} \quad (0 \le i \le N_r,\, 0 \le j \le N_\theta-1)$$

を求める。

(ii) (12) を用いて中心軸 (ただし境界は除く) 上での値

$$U_{0jk}^{n+1} \quad (0 \le j \le N_\theta-1,\, 1 \le k \le N_z-1)$$

を求める。

(iii) (18) を用いて、領域内部 (から中心軸を除いた部分) での値

$$U_{ijk}^{n+1} \quad (1 \le i \le N_r-1,\, 0 \le j \le N_\theta-1,\, 1 \le k \le N_z-1)$$

を求める。

1.9 数値実験

数値実験してみると…

2 Neumann, Robin さらに Dirichlet も扱えるプログラムを作る

2.1 Neumann 境界条件, Robin 境界条件

いわゆる Neumann 境界条件は、

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \beta$$

の形の方程式である。物理的には左辺は境界上での熱流の法線方向の成分という意味を持つ。

一方 Robin の境界条件は

$$\frac{\partial u}{\partial n} + \sigma u = T$$

の形の方程式である。これは Newton の冷却の法則

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \sigma(U - u)$$

から導かれるものである。ここで U は物理的には外界の温度を表わす。

2.2

とりあえず θ 方向だけの陰解法を採用する。

$$\begin{aligned}(19)\qquad &\left(1+\frac{2\lambda_\theta}{r_i^2}\right)U_{ijk}^{n+1} - \frac{\lambda_\theta}{r_i^2}\left(U_{i,j+1,k}^{n+1} + U_{i,j-1,k}^{n+1}\right)\\ &= (1-2\lambda_r-2\lambda_z)\,U_{ijk}^n + \lambda_r\left[\left(1+\frac{1}{2i}\right)U_{i+1,j,k}^n + \left(1-\frac{1}{2i}\right)U_{i-1,j,k}^n\right]\\ &\quad +\lambda_z\left(U_{ij,k+1}^n + U_{ij,k-1}^n\right).\end{aligned}$$

i, k を止めるごとに $\boldsymbol{U}_{ik} := (U_{i0k}^{n+1}, U_{i1k}^{n+1}, \cdots, U_{i,N_\theta-1,k}^{n+1})^T$ についての連立 1 次方程式ができる。

$0 \le i \le N_r - 1$, $1 \le k \le N_z - 1$ については (つまり内部格子点に対応)、このままでよい。

そうでないとき、つまり境界上にある格子点に対応するところの処理が問題である。

とりあえずは、Neumann (第二種), Robin (第三種) 境界条件、方程式でいうと

$$\frac{\partial u}{\partial n} + \gamma u = T$$

の場合に、どういう差分方程式を作るかを考える。T は一般には関数であるが、以下では側面、上面、下面ごとに定数であるとし、その値をそれぞれ T_s, T_t, T_b と書く (これは特に深い意味はなく、容易に関数の場合を扱える)。

(1) $i=N_r$ のとき。

$$\frac{\partial u}{\partial r}(1,\theta_j,z_k,t_n)+\gamma u(1,\theta_j,z_k,t_n)=T_s$$

を近似する差分方程式として

$$\frac{U^n_{N_r+1,j,k}-U^n_{N_r-1,j,k}}{2h_r}+\gamma U^n_{N_r,j,k}=T_s$$

を採用しよう。これから

$$U^n_{N_r+1,j,k}=U^n_{N_r-1,j,k}+2h_r(T_s-\gamma U^n_{N_r,j,k}).$$

ゆえに (19) で、仮想格子点に対応する部分は以下のように書きかえられる。

$$\begin{aligned}\left(1+\frac{1}{2i}\right)U^n_{i+1,j,k}+\left(1-\frac{1}{2i}\right)U^n_{i-1,j,k} &= \left(1+\frac{1}{2i}\right)(U^n_{N_r-1,j,k}+2h_r(T_s-\gamma U^n_{N_r,j,k}))+\left(1-\frac{1}{2i}\right)U^n_{N_r-1,j,k}\\ &= 2\left[U^n_{N_r-1,j,k}+\left(1+\frac{1}{2i}\right)h_r(T_s-\gamma U^n_{N_r,j,k})\right]\end{aligned}$$

(2) $k=0$ のとき。

$$-\frac{\partial u}{\partial z}(r_i,\theta_j,0,t_n)+\gamma u(r_i,\theta_j,0,t_n)=T_b$$

を近似する差分方程式として

$$-\frac{U^n_{ij1}-U^n_{ij,-1}}{2h_z}+\gamma U^n_{ij0}=T_b$$

を採用しよう。これから

$$U^n_{ij,-1}=U^n_{ij1}+2h_z(T_b-\gamma U^n_{ij0}).$$

ゆえに (19) で、仮想格子点に対応する部分は以下のように書きかえられる。

$$U^n_{ij,k+1}+U^n_{ij,k-1}=2\left[U^n_{ij1}+h_z(T_b-\gamma U^n_{ij0})\right].$$

(3) $k=N_z$ のとき。

$$\frac{\partial u}{\partial z}(r_i,\theta_j,1,t_n)+\gamma u(r_i,\theta_j,1,t_n)=T_t$$

を近似する差分方程式として

$$\frac{U^n_{ij,N_z+1}-U^n_{ij,N_z-1}}{2h_z}+\gamma U^n_{ij0}=T_t$$

を採用しよう。これから

$$U^n_{ij,N_z+1}=U^n_{ij,N_z-1}+2h_z(T_t-\gamma U^n_{ijN_z}).$$

ゆえに (19) で、仮想格子点に対応する部分は以下のように書きかえられる。

$$U^n_{ij,k+1}+U^n_{ij,k-1}=2\left[U^n_{ij,N_z-1}+h_z(T_t-\gamma U^n_{ijN_z})\right].$$

疑似コードを示すと以下のようになる (厳密には $j=0,\ N_\theta-1$ のとき添字が範囲オーバーする。周期 N_θ で考える。)。

第 2 種, 第 3 種境界条件のため

```
for (i = 1; i <= N_r; i++)
  for (k = 0; k <= N_z; k++) {
    for (j = 0; j < N_theta; j++) {
      R1 = (1-2*(lambda_r+lambda_z)) * U[i][j][k];
      if (i < N_r)
        R2 = (1.0+1.0/(2*i))*U[i+1][j][k]+(1.0-1.0/(2*i))*U[i-1][j][k];
      else
        R2 = 2*(U[N_r-1][j][k]+(1.0+1.0/(2*i))*h_r*(T_s-gamma*U[N_r][j][k]));
      if (k == 0)
        R3 = 2 * (U[i][j][1] + h_z * (T_b-gamma*U[i][j][0]));
      else if (k == N_z)
        R3 = 2 * (U[i][j][N_z-1] + h_z * (T_t-gamma*U[i][j][N_z]));
      else
        R3 = U[i][j][k+1] + U[i][j][k-1];
      b[j] = R1 + lambda_r * R2 + lambda_z * R3;
    }
    ptrisol(なんとか, b);
    for (j = 0; j < N_theta; j++)
      UU[i][j][k] = b[j];
  }
```

さて、Dirichlet (第一種) 境界条件の場合はどうなるか？(19) の代りに

$$U_{N_r jk}^{n+1} = f(1, \theta_j, z_k, t_{n+1}),$$

$$U_{ij0}^{n+1} = f(r_i, \theta_j, 0, t_{n+1}),$$

$$U_{ijN_z}^{n+1} = f(r_i, \theta_j, 1, t_{n+1})$$

という方程式を課すわけである。

つまり $i = N_r$ または $k = 0, N_z$ の場合は、連立 1 次方程式の係数行列は単位行列で、右辺は境界値をそのままおく、ということである。

第 1 種境界条件のため

```
for (i = 1; i <= N_r; i++)
  for (k = 0; k <= N_z; k++) {
    for (j = 0; j < N_theta; j++) {
      if (i == N_r || k == 0 || k == N_z)
        b[j] = (1-2*(lambda_r+lambda_z)) * U[i][j][k]
           + lambda_r *
              ((1.0+1.0/(2*i))*U[i+1][j][k]+(1.0-1.0/(2*i))*U[i-1][j][k])
           + lambda_z * (U[i][j][k+1] + U[i][j][k-1]);
      else
        b[j] = boundary(i * dr, j * dth, k * dz, n * dt);
    }
    ptrisol(なんとか, b);
    for (j = 0; j < N_theta; j++)
      UU[i][j][k] = b[j];
  }
```

あるいは (連立 1 次方程式を解くのも馬鹿馬鹿しいので)

第 1 種境界条件のため

```
for (i = 1; i <= N_r; i++)
  for (k = 0; k <= N_z; k++)
    if (i == N_r || k == 0 || k == N_z) {
      for (j = 0; j < N_theta; j++)
        UU[i][j][k] = boundary(i * dr, j * dth, k * dz, n * dt);
    }
    else {
      for (j = 0; j < N_theta; j++)
        b[j] = (1-2*(lambda_r+lambda_z)) * U[i][j][k]
           + lambda_r *
              ((1.0+1.0/(2*i))*U[i+1][j][k]+(1.0-1.0/(2*i))*U[i-1][j][k])
           + lambda_z * (U[i][j][k+1] + U[i][j][k-1]);
        ptrisol(なんとか, b);
        for (j = 0; j < N_theta; j++) UU[i][j][k] = b[j];
    }
```

としてもよい。

さて、それでは第 1 種, 第 2 種, 第 3 種のすべての境界条件を扱うコードを考えよう。

第 1 種, 第 2 種, 第 3 種境界条件のため

```
for (i = 1; i <= N_r; i++)
  for (k = 0; k <= N_z; k++) {
    for (j = 0; j < N_theta; j++) {
      if (i < N_r)
        R2 = (1.0+1.0/(2*i))*U[i+1][j][k]+(1.0-1.0/(2*i))*U[i-1][j][k];
      else if (!side_is_dirichlet)
        R2 =
          2*(U[N_r-1][j][k]+(1.0+1.0/(2*i))*h_r*(T_s-gamma*U[N_r][j][k]));
        else {
          b[j] = boundary(i * dr, j * dth, k * dz, n * dt);
          continue;
        }
      if (k == 0) {
        if (!botto_is_dirichlet)
          R3 = 2 * (U[i][j][1] + h_z * (T_b-gamma*U[i][j][0]));
        else {
          b[j] = boundary(i * dr, j * dth, k * dz, n * dt);
          continue;
        }
      }
      else if (k == N_z) {
        if (!top_is_dirichlet)
          R3 = 2 * (U[i][j][N_z-1] + h_z * (T_t-gamma*U[i][j][N_z]));
        else {
          b[j] = boundary(i * dr, j * dth, k * dz, n * dt);
          continue;
        }
      }
      else
        R3 = U[i][j][k+1] + U[i][j][k-1];
      R1 = (1-2*(lambda_r+lambda_z)) * U[i][j][k];
      b[j] = R1 + lambda_r * R2 + lambda_z * R3;
    }
    ptrisol(なんとか, b);
    for (j = 0; j < N_theta; j++)
      UU[i][j][k] = b[j];
  }
```

これで一応正しく計算できるはずだけれど、あまりしっくりこない (非常にたくさん分岐チェックをしている)。修正案としては、

(A) 境界条件が Dirichlet かそうでないかという場合分けが三つの部分 (側面、上面、下面) で必要なので、$2^3 = 8$ 通りの場合がある。それぞれの処理を別々にする (余計な分岐チェックはなくなるが、コードが増えて、バグが入り込みやすくなり、また修正も面倒になり、保守のコストがあがる)。

(B) 制御構造を次のようにする。

```
for (i = 1; i < N_r; i++) {
  /* k==0 のときの処理 */
   ...
  /* k==N_z のときの処理 */
   ...
  /* それ以外 */
  for (k = 1; k < N_z; k++) {
  }
}
/* i==N_r のときの処理 */
/* i==N_r,k==0 のときの処理 */
/* i==N_r,k==N_z のときの処理 */
/* i==N_r,0<k<N_z のときの処理 */
for (k = 1; k < N_z; k++) {
}
```

詳細に書くと (A) とあまり変らないか？

マクロを使えば保守の問題が楽になるか？

```
#define R1(i,j,k) ((1-2*(lambda_r+lambda_z))*U[i][j][k])
#define R2(i,j,k) ((1.0+1.0/(2*(i)))*U[(i)+1][j][k]+(1.0-1.0/(2*(i)))*U[(i)-1][j][k])
#define R2S(i,j,k) (2*(U[N_r-1][j][k]+(1.0+1.0/(2*(N_r-1)))*h_r*(T_s-gamma*U[N_r][j][k])))
#define R3(i,j,k) (U[i][j][(k)+1]+U[i][j][(k)-1])
#define R3B(i,j,k) (2*(U[i][j][1]+h_z*(T_b-gamma*U[i][j][0])))
#define R3T(i,j,k) (2*(U[i][j][N_z-1]+h_z*(T_t-gamma*U[i][j][N_z])))
```

のような感じで。

```
for (i = 1; i < N_r; i++) {
  /* k==0 */
  k = 0;
  if (bottom_is_dirichlet)
    for (j = 0; j < N_theta; j++) b[j] = boundary(i*dr,j*dth,k*dz,n*dt);
  else
    for (j = 0; j < N_theta; j++)
      b[j] = R1(i,j,k) * lambda_r * R2(i,j,k) + lambda_z * R3B(i,j,k);
  ptrisol(なんとか, b);
  for (j = 0; j < N_theta; j++) UU[i][j][k] = b[j];
  /* k==N_z */
  k = N_z;
  if (top_is_dirichlet)
    for (j = 0; j < N_theta; j++) b[j] = boundary(i*dr,j*dth,k*dz,n*dt);
  else
    for (j = 0; j < N_theta; j++)
      b[j] = R1(i,j,k) * lambda_r * R2(i,j,k) + lambda_z * R3T(i,j,k);
  ptrisol(なんとか, b);
  for (j = 0; j < N_theta; j++) UU[i][j][k] = b[j];
  /* 1<=k<=N_z-1 */
  for (k = 1; k < N_z; k++) {
    for (j = 0; j < N_theta; j++)
      b[j] = R1(i,j,k) * lambda_r * R2(i,j,k) + lambda_z * R3(i,j,k);
    ptrisol(なんとか, b);
    for (j = 0; j < N_theta; j++) UU[i][j][k] = b[j];
  }
}
/* i==N_r のときの処理 */
i = N_r;
if (side_is_dirichlet)
  for (k = 0; k <= N_z; k++) {
    for (j = 0; j < N_theta; j++) b[j] = boundary(i*dr,j*dth,k*dz,n*dt);
    ptrisol(なんとか, b);
    for (j = 0; j < N_theta; j++) UU[i][j][k] = b[j];
  }
else { // うーん、ほとんど上のコピーだな…
  /* k==0 */
  k = 0;
  if (bottom_is_dirichlet)
    for (j = 0; j < N_theta; j++) b[j] = boundary(i*dr,j*dth,k*dz,n*dt);
  else
    for (j = 0; j < N_theta; j++)
      b[j] = R1(i,j,k) * lambda_r * R2(i,j,k) + lambda_z * R3B(i,j,k);
  ptrisol(なんとか, b);
  for (j = 0; j < N_theta; j++) UU[i][j][k] = b[j];
  /* k==N_z */
  k = N_z;
  if (top_is_dirichlet)
    for (j = 0; j < N_theta; j++) b[j] = boundary(i*dr,j*dth,k*dz,n*dt);
  else
    for (j = 0; j < N_theta; j++)
      b[j] = R1(i,j,k) * lambda_r * R2(i,j,k) + lambda_z * R3T(i,j,k);
  ptrisol(なんとか, b);
  for (j = 0; j < N_theta; j++) UU[i][j][k] = b[j];
  /* 1<=k<=N_z-1 */
  for (k = 1; k < N_z; k++) {
    for (j = 0; j < N_theta; j++)
      b[j] = R1(i,j,k) * lambda_r * R2(i,j,k) + lambda_z * R3(i,j,k);
    ptrisol(なんとか, b);
    for (j = 0; j < N_theta; j++) UU[i][j][k] = b[j];
  }
}
```

3　実験結果

$$u(r,\theta,z,t)\equiv 10.$$

これは初期値を $u_0\equiv 10$ として、境界条件を

$$u=10\quad(\text{on }\Gamma_s\cup\Gamma_t\cup\Gamma_b)$$

として得られるはず。

$$u(r,\theta,z,t)=\sin\left(\frac{\pi z}{Z}\right)\exp\left[-\alpha\left(\frac{\pi}{Z}\right)^2 t\right].$$

これは初期値を $u_0(r,\theta,z)=\sin(\pi z/Z)$ として、境界条件を

$$\frac{\partial u}{\partial n}=0\quad(\text{on }\Gamma_s),\quad u=0\quad(\text{on }\Gamma_t\cup\Gamma_b)$$

として得られるはず。

$$u(r,\theta,z,t)=\sin(\lambda_1 z)\exp(-\lambda_1^2 t)+\sin(\lambda_2 z)\exp(-\lambda_2^2 t)$$

$$u(r,\theta,z,0)=\sin(\lambda_1 z)+\sin(\lambda_2 z).$$

$$\frac{\partial u}{\partial n}=0\quad(\text{on }\Gamma_s),\quad\frac{\partial u}{\partial n}+\sigma u=0\quad(\text{on }\Gamma_t),\quad u=0\quad(\text{on }\Gamma_b).$$