5　ラプラス方程式を数値的に解く

静電場の問題（ラプラス方程式）を数値的に C 言語を使って計算する。そのときに前回学んだ連立一次方程式の反復法による解法を用いる。

5.1　ラプラス方程式の差分化

以下の 2 次元ラプラス方程式を与えられた境界条件でとくことを考えよう。

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = 0 \tag{1}$$

次のような境界条件の問題を考える。$x = 0$,$y = 0, L$ を接地し、$x = L$ のみに ψ_0 の電圧をかけた時の電位を計算する。

数値的にこの方程式を解くとは、ψ を xy 平面上の格子点での値として求めることである (格子間隔を x 方向は Δx,y 方向は Δy)。

さて今ある格子点 (x_{i+1}, y_i) でのポテンシャルの値 $\psi(x_i + \Delta x, y_j)$ を x 方向にテーラー展開すると、

$$\psi(x_i + \Delta x, y_j) = \psi(x_i, y_j) + \frac{\partial \psi}{\partial x}\Delta x + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\Delta x^2 + \frac{1}{3!}\frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3}\Delta x^3 \cdots \tag{2}$$

同様に格子点 (x_{i-1}, y_i) では

$$\psi(x_i - \Delta x, y_j) = \psi(x_i, y_j) - \frac{\partial \psi}{\partial x}\Delta x + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\Delta x^2 - \frac{1}{3!}\frac{\partial^3 \psi}{\partial x^3}\Delta x^3 \cdots \tag{3}$$

このふたつの式を足すと Δx の奇数次の項が消えて

$$\psi(x_i - \Delta x, y_j) + \psi(x_i + \Delta x, y_j) = 2\psi(x_i, y_j) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}\Delta x^2 + \cdots \tag{4}$$

Δx の 4 次以上を無視すると、2 階微分が格子点の ψ の値から評価でき、

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{\Delta x^2}\left\{\psi(x_i - \Delta x, y_j) + \psi(x_i + \Delta x, y_j) - 2\psi(x_i, y_j)\right\} \tag{5}$$

y 方向についてもまったく同様の議論をすると、

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \frac{1}{\Delta y^2}\left\{\psi(x_i, y_j - \Delta y_j) + \psi(x_i, y_j + \Delta y) - 2\psi(x_i, y_j)\right\} \tag{6}$$

上の 2 つの式を加えるとラプラス方程式の左辺が格子点のポテンシャルの値で表現できる。ラプラス方程式を $\psi_{ij} \equiv \psi(x_i, y_j)$ という記法を使って書き直すと

$$\frac{1}{\Delta x^2}\left\{\psi_{i-1\ j} + \psi_{i+1\ j} - 2\psi_{i\ j}\right\} + \frac{1}{\Delta y^2}\left\{\psi_{i\ j-1} + \psi_{i\ j+1} - 2\psi_{i\ j}\right\} = 0 \tag{7}$$

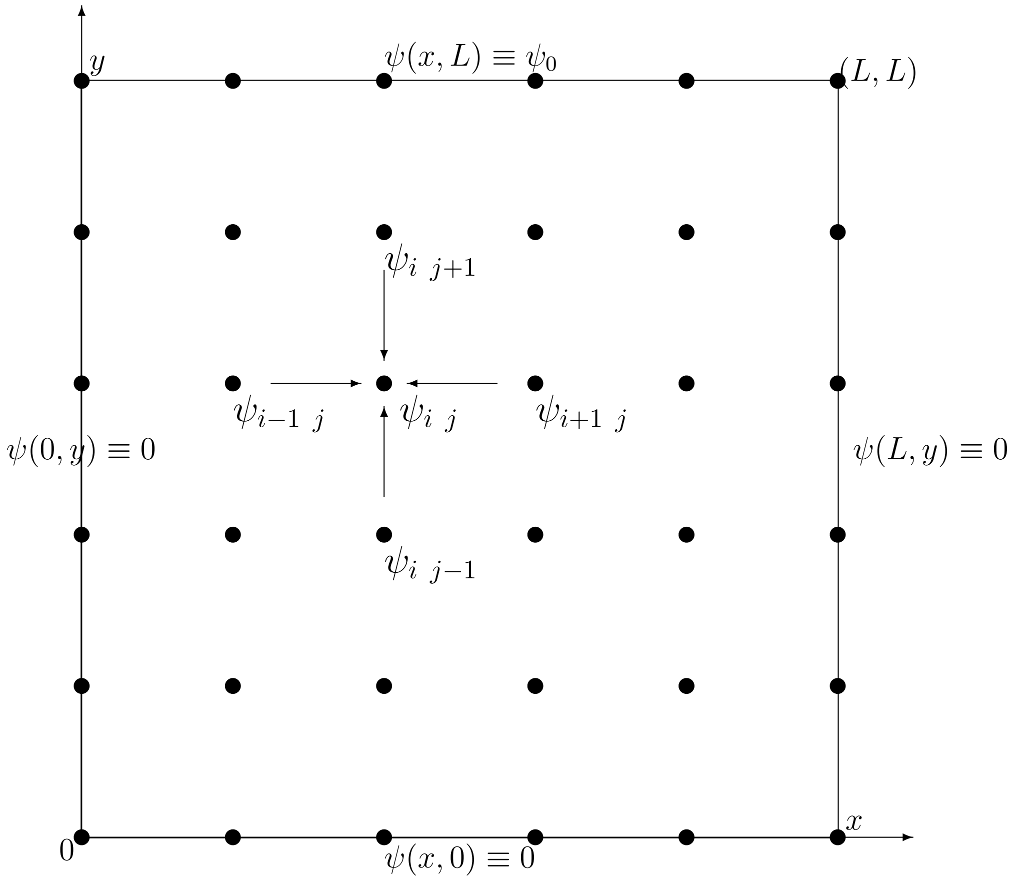

図 1: 格子点

$\Delta x=\Delta y$ とすることにし、$\psi_{i\ j}$ に関して解くと、

$$\psi_{i\ j}=\frac{1}{4}\left(\psi_{i-1\ j}+\psi_{i+1\ j}+\psi_{i\ j-1}+\psi_{i\ j+1}\right)\qquad (i,j=1,2,\cdots,n) \tag{8}$$

となり、ある格子点 i,j でのポテンシャルの値は単にその周りの 4 格子点でのポテンシャルの値の平均である、という単純な一次式である差分方程式が得られる。

5.2 差分方程式＝連立一次方程式

さて格子点が端を入れて全部で $(n+2)^2$ 個あるとし (図 1 では $n=4$)、端の値は境界条件で fix されているとすると、未知の $\psi_{i\ j}$ の値は全部で n^2 個あることになる。一方、方程式は式 8 でやはり未知の $\psi_{i\ j}$ の分で n^2 個あるので、結局式 8 は n^2 元連立の一次方程式を与えている。式 8 の右辺の中には境界の値 $\psi_{0\ i}$, $\psi_{n+1\ i}$, $\psi_{i\ 0}$, $\psi_{i\ n+1}$ などが含まれており、これらの方程式を解くには境界条件が必ず必要であることに留意しよう。

さてこの方程式はすでに未知数 $\psi_{i\ j}$ に関して解かれた形になっているので、前回の連立一次方程式を解くときに、反復法で用いた式

$$
\begin{aligned}
x_1^{(1)} =&\ \ a_{11}{}^{-1}\left\{b_1 - \left(\qquad\qquad + a_{12}x_2^{(0)} \cdots + a_{1k}x_k^{(0)} \cdots + a_{1n-1}x_{n-1}^{(0)} + a_{1n}x_n^{(0)}\right)\right\} \\
\vdots & \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\
x_k^{(1)} =&\ \ a_{kk}{}^{-1}\left\{b_k - \left(a_{11}x_1^{(0)} + a_{12}x_2^{(0)} \cdots \qquad\qquad \cdots + a_{1n-1}x_{n-1}^{(0)} + a_{1n}x_n^{(0)}\right)\right\} \\
\vdots & \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\
x_n^{(1)} =&\ \ a_{nn}{}^{-1}\left\{b_n - \left(a_{11}x_1^{(0)} + a_{12}x_2^{(0)} \cdots + a_{1k}x_k^{(0)} \cdots + a_{1n-1}x_{n-1}^{(0)} \qquad\qquad \right)\right\}
\end{aligned}
\tag{9}
$$

をすでに与えていることになる。よって行列 $\boldsymbol{A}$ やベクトル $\boldsymbol{b}$ の形を特に気にする必要は無く、式 8 を、反復法の中身の式として使ってしまえばよい。次に実際のプログラムを見てみることにする。→トップページ

プログラムの出力がでたら、

- gnuplot の splot コマンドを使って立体的に可視化してみよう。
- $y = 0$ に電圧をかけた場合の解や、他の場所に電圧をかけた場合の解も見てみよう。

5.3 Laplace 方程式の変数分離による解法

2 次元ラプラス方程式の数値解を求めたが、変数分離による方法で解いた解と比べてみよう。

$$
\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = 0 \tag{10}
$$

同様の境界条件の解を求めてみる（図 2）。物理的には $x = 0$,$y = 0, L$ を接地し、$x = L$ のみに ψ_0 の電圧をかけた時の電位を計算することに対応する。

このような問題を解析的に解く場合には普通、変数分離法を用いる。変数分離法では解の 2 つの変数（この場合には x と y）に対する依存性が掛け算で分かれてしまうという形を仮定するところから出発する。すなわち、

$$
\psi(x, y) = \psi_x(x)\psi_y(y)
$$

これを元のラプラス方程式 (20) に代入して整理すると、

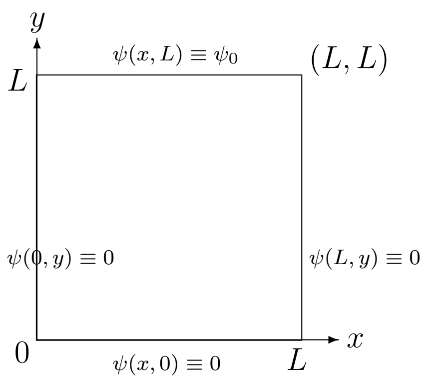

図 2: 境界条件

$$
\frac{1}{\psi_x}\frac{d^2\psi_x}{dx^2} = -\frac{1}{\psi_y}\frac{d^2\psi_y}{dy^2} \tag{11}
$$

するとこの左辺は x のみの関数、右辺は y のみの関数となるので、結局ある定数 A に等しくならざるを得ない。以下の A の正負によって場合わけをし、境界条件に適合する解を探していく。

(1) $A = 0$ のとき

$$\frac{1}{\psi_x}\frac{d^2\psi_x}{dx^2} = -\frac{1}{\psi_y}\frac{d^2\psi_y}{dy^2} = 0$$

であるので、それぞれ簡単に積分が実行でき、a, b, c, d を定数として、

$$\psi_x = ax + b \tag{12}$$

$$\psi_y = cy + d \tag{13}$$

よって

$$\psi(x, y) = (ax + b)(cy + d) \tag{14}$$

であるが、これに境界条件 $\psi(0, y) \equiv 0$, $\psi(L, y) \equiv 0$ を課すと

$$\begin{aligned} b(cy + d) &\equiv 0 \\ (aL + b)(cy + d) &\equiv 0 \end{aligned}$$

となる。1 番目の式から

$$b = 0 \quad \text{or} \quad c = d = 0$$

$c = d = 0$ の時には $\psi \equiv 0$ となる。また $b = 0$ でかつ $cy + d \not\equiv 0$ であると、2 番目の式から $aL = 0$ であるが、$L \neq 0$ であるので、$a = 0$ となる。したがって $ax + b \equiv 0$ であり、やはり $\psi \equiv 0$ となる。

　したがっていずれにせよこの解が与えられた境界条件を満たすためには $\psi(x, y) \equiv 0$ しかない。これは今興味のない trivial な解なので捨てることにする。

(2) $A = k^2 (> 0)$ のとき (ここで k は正の実数)

$$\frac{1}{\psi_x}\frac{d^2\psi_x}{dx^2} = -\frac{1}{\psi_y}\frac{d^2\psi_y}{dy^2} = k^2$$

であるので、まず ψ_x の方を考えると、解はやはり簡単に積分できて、

$$\psi_x = ae^{kx} + be^{-kx}$$

したがって

$$\psi(x, y) = (ae^{kx} + be^{-kx})\psi_y(y)$$

であるが、境界条件 $\psi(0, y) = \psi(L, y) \equiv 0$ から、$\psi_y \not\equiv 0$ であれば、$a + b = 0$ かつ $ae^{kL} + be^{-kL} = 0$ でなければならない。この 2 式から、b を消去すると、

$$a(e^{kL} - e^{-kL}) = 0$$

となるが、$kL=0$という意味のない場合を除くと必ず$a=0$となり、したがって$b=0$も結論される。したがって$\psi(x,y)\equiv 0$となる。ところでこれは$\psi_y\not\equiv 0$という仮定の下に得られた結果であるが、$\psi_y\equiv 0$であればそもそも$\psi(x,y)\equiv 0$であるので、やはりこの場合も興味のない解となることがわかったので捨てる。

(3) $A=-k^2(<0)$のとき (ここでkは正の実数)
まずψ_xに関して解くと、

$$\psi_x = a\sin(kx) + b\cos(kx)$$

先ほどと同様$\psi_y\equiv 0$は意味がないので、$\psi_y\not\equiv 0$とすると、境界条件$\psi(0,y)\equiv 0$より、まず$b=0$が得られる。続いて$\psi(L,y)\equiv 0$より、$a\sin(kL)=0$であるが、$a=0$の無意味な解を除くと、kに関して条件がつくことがわかる。すなわち

$$k = k_n \equiv \frac{n\pi}{L} \qquad (n=1,2,3,\cdots) \tag{15}$$

次にψ_yを解くと

$$\psi_y = ce^{k_n y} + de^{-k_n y}$$

が得られるが、境界条件$\psi(x,0)\equiv 0$より、$c=-d$となる。よって

$$\psi_y = c(e^{k_n y} - e^{-k_n y})$$

あわせると、

$$\psi(x,y) = ac\sin(k_n x)(e^{k_n y} - e^{-k_n y})$$

であるが、nは自然数ならば何でもよく、かつ元のラプラス方程式が線形方程式なので、解の和（線形結合）もまた解となることを考慮すると、もっとも一般的な解の形は

$$\psi(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)(e^{\frac{n\pi}{L}y} - e^{-\frac{n\pi}{L}y}) \tag{16}$$

acはひとつの係数として新たにa_nとし、k_nは定義どおりに書き下した。この形の解に最後の境界条件$\psi(x,L)=\psi_0$を課す。すると

$$\psi_0 = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)(e^{n\pi} - e^{-n\pi}) \tag{17}$$

であるが、これから未知のa_nを決定することができる。実際には三角関数の直交性、

$$\int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx = \frac{L}{2} \tag{18}$$

$$\int_0^L \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right)dx = 0 \tag{19}$$

を用いる（上の式はMathematicaか手計算で確認する、ただし$m\neq n$)。境界条件(17)の両辺に$\sin(m\pi x/L)$をかけて積分すると、$m\neq n$の項はすべて消え、

$$\psi_0\frac{L}{n\pi}(1-\cos(n\pi)) = a_n(e^{n\pi} - e^{-n\pi})\frac{L}{2}$$

となり、a_n に関してとくことができる。解いた a_n を用いると、結局

$$\psi(x,y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \frac{1-(-1)^n}{e^{n\pi} - e^{-n\pi}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) (e^{\frac{n\pi}{L} y} - e^{-\frac{n\pi}{L} y})$$

が得られる。理解できたらこの級数解を計算し、可視化して先ほどの数値解と比較してみよう。

5.4 ポアソン方程式

ポアソン方程式はラプラス方程式の右辺に電荷密度がある場合であるがこの場合も同様にとくことができる。2 次元の場合の差分方程式は

$$\phi_{ij} = \frac{1}{4} (\phi_{i-1j} + \phi_{i+1j} + \phi_{ij-1} + \phi_{ij+1}) + \frac{1}{4} \frac{\rho_{ij}}{\epsilon_0} (\Delta x)^2$$

ここで ρ_{ij} は (x_i, y_j) での電荷 (面) 密度を表している。いま ij の点に電荷 Q を置くのであれば、電荷の保存の式から $Q = \rho_{ij} (\Delta x)^2$ である。理解できたら適当な境界条件と電荷分布から電場を求めて見よ。

5.5 提出課題

3 次元のラプラス方程式

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = 0 \tag{20}$$

を立方体内部で解くコードを作れ。自分で適当な境界条件を置いてみて電位がどうなるかを可視化してみよ。

提出期限：次回授業開始時