微分方程式と連立方程式の関係

- 計算機は連続的な値, 例えば, $\Phi(x)$, を扱うことはできないため, 飛び飛びの値（離散的な値）を用いる.
  - 例えば, $\Phi(0), \Phi(\Delta x), \Phi(2\Delta x), \dots, \Phi(x-\Delta x), \Phi(x), \Phi(x+\Delta x), \dots, \Phi(N\Delta x)$.
- これらの離散的な値を用いて微分を評価することを差分と呼ぶ.
- 差分を用いることで, 微分方程式は差分方程式に近似することができ, 結果として離散化された値に対する連立一次方程式となる.
- ここでは, 下の式を N+1 個の値で表現する方法を説明する.
  - $\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = C$
  - 境界条件
    - $\frac{d\Phi(0)}{dx} = 0$
    - $\Phi(x_{max}) = 0$

$\dfrac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = C$ の差分: 雑な説明

- 微分の定義
  - $\frac{d\Phi(x)}{dx} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Phi(x+\Delta x)-\Phi(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Phi(x)-\Phi(x-\Delta x)}{\Delta x}$.
- したがって,
  - $\frac{d\Phi(x)}{dx} \sim \frac{\Phi(x+\Delta x)-\Phi(x)}{\Delta x}$.
- さらに,
  - $\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = \frac{d}{dx}\frac{d\Phi(x)}{dx} \sim \frac{1}{\Delta x}\left(\frac{\Phi(x+\Delta x)-\Phi(x)}{\Delta x} - \frac{\Phi(x)-\Phi(x-\Delta x)}{\Delta x}\right) = \frac{\Phi(x+\Delta x)-2\Phi(x)+\Phi(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2}$.

$\dfrac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = C$ の差分: マトモな説明

- $\Phi(x-\Delta x)$, $\Phi(x+\Delta x)$ をテイラー展開
  - $\Phi(x-\Delta x) = \Phi(x) - \frac{d\Phi(x)}{dx}\Delta x + \frac{1}{2}\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2}(\Delta x)^2 - \frac{1}{6}\frac{d^3\Phi(x)}{dx^3}(\Delta x)^3 + O\big((\Delta x)^4\big)$
  - $\Phi(x+\Delta x) = \Phi(x) + \frac{d\Phi(x)}{dx}\Delta x + \frac{1}{2}\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2}(\Delta x)^2 + \frac{1}{6}\frac{d^3\Phi(x)}{dx^3}(\Delta x)^3 + O\big((\Delta x)^4\big)$
- ここで, $O\big((\Delta x)^4\big)$ は Δx の 4 次以上の項を表す. これらより,
  - $\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = \frac{\Phi(x+\Delta x)-2\Phi(x)+\Phi(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2} + O\big((\Delta x)^2\big)$
- したがって,
  - $\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} \sim \frac{\Phi(x+\Delta x)-2\Phi(x)+\Phi(x-\Delta x)}{(\Delta x)^2}$
- このとき, 微分の評価(の精度)は Δx の 2 次のオーダーである.
  - Δx が小さいほど誤差は小さい.
  - Δx を半分 (1/2) にすると, 誤差は 1/4 になる.

差分方程式から連立方程式へ 1

- 以上より,
  - $\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} = C$

  は
  - $\Phi(x - \Delta x) - 2\Phi(x) + \Phi(x + \Delta x) = C(\Delta x)^2$

  となる.
- これを, $x = \Delta x, 2\Delta x, 3\Delta x, \dots, (i-1)\Delta x, i\Delta x, (i+1)\Delta x, \dots, (N-1)\Delta x$に対して適用すると,
  - $\cdots$
  - $\Phi(0) - 2\Phi(\Delta x) + \Phi(2\Delta x) = C(\Delta x)^2$
  - $\Phi(\Delta x) - 2\Phi(2\Delta x) + \Phi(3\Delta x) = C(\Delta x)^2$
  - $\Phi(2\Delta x) - 2\Phi(3\Delta x) + \Phi(4\Delta x) = C(\Delta x)^2$
  - $\dots$
  - $\Phi\big((i-2)\Delta x\big) - 2\Phi\big((i-1)\Delta x\big) + \Phi((i+0)\Delta x) = C(\Delta x)^2$
  - $\Phi\big((i-1)\Delta x\big) - 2\Phi\big((i+0)\Delta x\big) + \Phi((i+1)\Delta x) = C(\Delta x)^2$
  - $\Phi\big((i+0)\Delta x\big) - 2\Phi\big((i+1)\Delta x\big) + \Phi((i+2)\Delta x) = C(\Delta x)^2$
  - $\dots$
  - $\Phi(N - 2\Delta x) - 2\Phi\big((N-1)\Delta x\big) + \Phi(N\Delta x) = C(\Delta x)^2$

差分方程式から連立方程式へ 2

- また, 下の境界条件を
  - $\frac{d\Phi(0)}{dx} = 0$
  - $\Phi(x_{max}) = 0$

  は, 前者に対しては,
  - $\Phi(-\Delta x) - 2\Phi(0) + \Phi(\Delta x) = C(\Delta x)^2$
  - $\frac{\Phi(\Delta x) - \Phi(-\Delta x)}{\Delta x} = 0$

  より
  - $-2\Phi(0) + 2\Phi(\Delta x) = C(\Delta x)^2$
- また後者に対しては,
  - $\Phi(x_{max}) = 0$
- となる.

差分方程式から連立方程式へ 4

- 以上より,
  - $-2\Phi(0)+2\Phi(\Delta x)=C(\Delta x)^2$
  - $\Phi(0)-2\Phi(\Delta x)+\Phi(2\Delta x)=C(\Delta x)^2$
  - $\Phi(\Delta x)-2\Phi(2\Delta x)+\Phi(3\Delta x)=C(\Delta x)^2$
  - $\Phi(2\Delta x)-2\Phi(3\Delta x)+\Phi(4\Delta x)=C(\Delta x)^2$
  - …
  - $\Phi\big((i-2)\Delta x\big)-2\Phi\big((i-1)\Delta x\big)+\Phi((i+0)\Delta x)=C(\Delta x)^2$
  - $\Phi\big((i-1)\Delta x\big)-2\Phi\big((i+0)\Delta x\big)+\Phi((i+1)\Delta x)=C(\Delta x)^2$
  - $\Phi\big((i+0)\Delta x\big)-2\Phi\big((i+1)\Delta x\big)+\Phi((i+2)\Delta x)=C(\Delta x)^2$
  - …
  - $\Phi\big((N-2)\Delta x\big)-2\Phi\big((N-1)\Delta x\big)+\Phi(N\Delta x)=C(\Delta x)^2$
  - $\Phi(N\Delta x)=0$
- の連立一次方程式となる.

差分方程式から連立方程式へ 5

- ここで,
  - $\Phi(0), \Phi(\Delta x), \Phi(2\Delta x), \ldots, \Phi\big((i-1)\Delta x\big), \Phi(i\Delta x), \Phi\big((i+1)\Delta x\big), \ldots$
- を
  - $\Phi_0, \Phi_1, \Phi_2, \ldots, \Phi_{i-1}, \Phi_i, \Phi_{i+1}, \ldots$
- のように書けば,
  - -2$\Phi_0 + 2\Phi_1 = C(\Delta x)^2$
  - $\Phi_0 - 2\Phi_1 + \Phi_2 = C(\Delta x)^2$
  - $\Phi_1 - 2\Phi_2 + \Phi_3 = C(\Delta x)^2$
  - $\Phi_2 - 2\Phi_3 + \Phi_4 = C(\Delta x)^2$
  - …
  - $\Phi_{i-2} - 2\Phi_{i-1} + \Phi_i = C(\Delta x)^2$
  - $\Phi_{i-1} - 2\Phi_i + \Phi_{i+1} = C(\Delta x)^2$
  - $\Phi_i - 2\Phi_{i+1} + \Phi_{i+2} = C(\Delta x)^2$
  - …
  - $\Phi_{N-2} - 2\Phi_{N-1} + \Phi_N = C(\Delta x)^2$
  - $\Phi_N = 0$
- と書ける.