

# 離散変分法によるMaxwell方程式の数値シミュレーション

土屋 拓也\*(早稲田大学基幹理工学部), 米田 元(早稲田大学基幹理工学部)  
 \*t-tsuchiya@aoni.waseda.jp \*http://www.aoni.waseda.jp/t-tsuchiya/

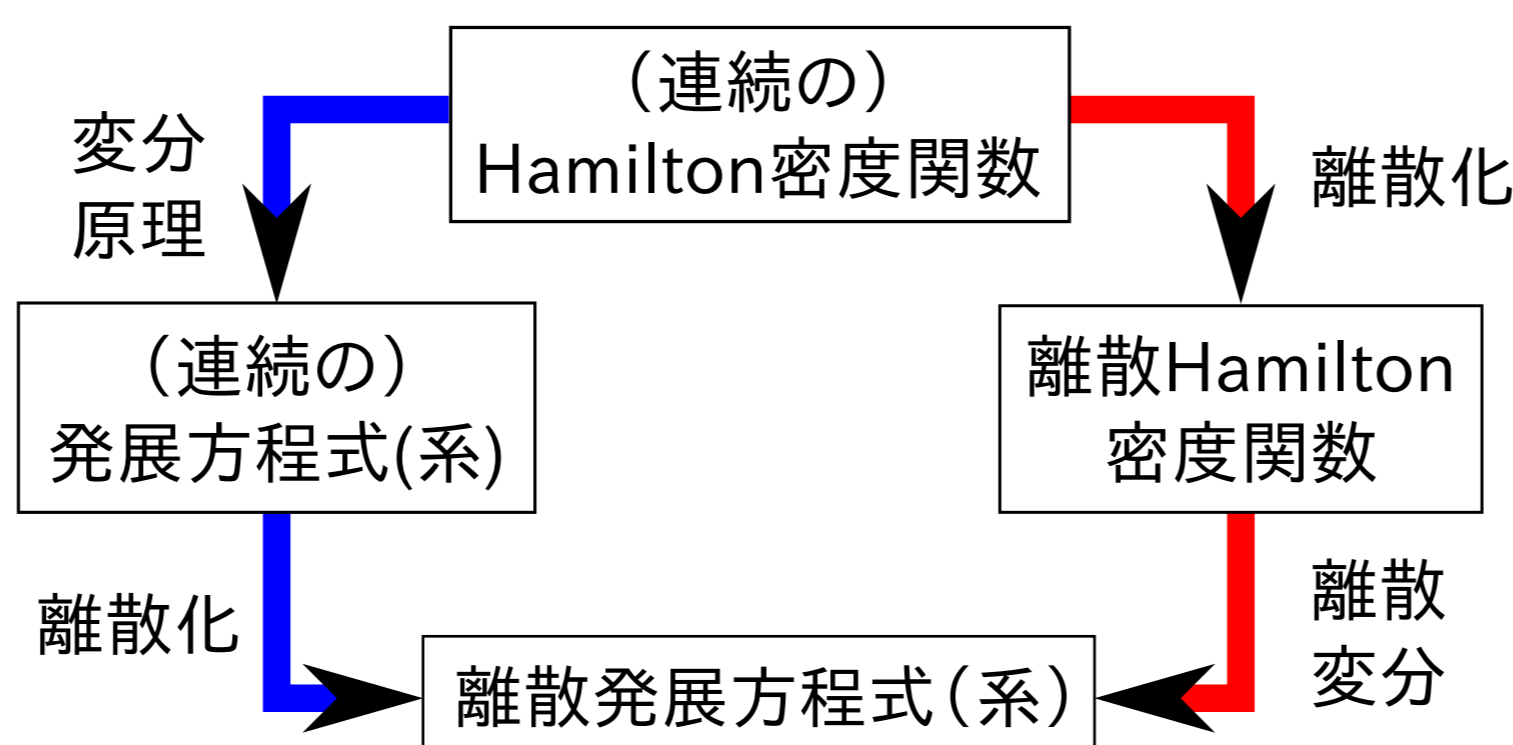
## <導入>

- 数値計算において、離散化の手法は方程式に依存することが知られている。
- 離散化手法は普通似た性質のもつ方程式でよく用いられる手法を“借りて”使うことが一般的である。
- しかし、用いる離散化手法が適切でない場合、その離散化誤差が計算とともに蓄積され数値計算の結果が不適切なものになる。
- 特に非線形現象における発展方程式の解析において、数値計算は主な手法となることが多いが、その離散化手法は最適でない場合が存在する。
- 今回、Hamilton構造をもつ方程式系に対して適切な離散方程式を構築できる離散変分法を用いて、Maxwell方程式の離散方程式を構築し、いくつかの数値計算を行いその結果を比較した。

## <手法>

### 一般的な離散化

- (連続の)Hamilton密度関数を与える。
- 変分原理から(連続の)発展方程式を作る。
- 発展方程式を離散化し、離散発展方程式を得る。
- 離散化手法が適切かどうかは発展方程式に依存(適切でないことも)。



### 離散変分法

- (連続の)Hamilton密度関数を与える。
- Hamilton密度関数を離散化する。
- 離散Hamilton密度関数から離散変分により離散発展方程式を得る。
- 離散Hamilton密度関数に特化した適切な離散化された発展方程式が得られる。

## <Maxwell方程式への適用>

登場している変数は  $A^i$ : ベクトルポテンシャル,  $\Pi_i$ :  $A^i$  の共役変数,  $\phi$ : スカラーポテンシャル,  $\rho$ : 電荷密度,  $J_i$ : 電流密度,  $\pi$ : 拘束条件である。  
**Crank-Nicolsonによる離散化** 一般的な離散化手法の例として、Crank-Nicolsonを用いると離散方程式は以下のようになる:

$$\pi_{(k)}^{(n)} = \widehat{\delta}_i^{(1)} \Pi_{(k)}^{i(n)} + \rho_{(k)}^{(n)} \approx 0, \quad (1)$$

$$\frac{A_{(k)}^{i(n+1)} - A_{(k)}^{i(n)}}{\Delta t} = -\widehat{\delta}^{ij} \widehat{\delta}_j^{(1)} \phi_{(k)}^{(n+1)} + \frac{1}{2\epsilon_0} (\Pi_{(k)}^{i(n+1)} + \Pi_{(k)}^{i(n)}), \quad (2)$$

$$\frac{\Pi_{i(k)}^{(n+1)} - \Pi_{i(k)}^{(n)}}{\Delta t} = \frac{1}{2\mu_0} \widehat{\delta}_a^{(1)} \widehat{\delta}^{(1)a} (A_{i(k)}^{(n+1)} + A_{i(k)}^{(n)}) - \frac{1}{2\mu_0} \widehat{\delta}_a^{(1)} \widehat{\delta}_i^{(1)} (A_a^{(n+1)} + A_a^{(n)}) + J_{i(k)}^{(n)}, \quad (3)$$

連続の式は

$$\frac{\rho_{(k)}^{(n+1)} - \rho_{(k)}^{(n)}}{\Delta t} = -\widehat{\delta}_i^{(1)} (J_i^{(n+1)} + J_i^{(n)}), \quad (4)$$

$$\frac{\rho_{(k)}^{(n+1)} - \rho_{(k)}^{(n)}}{\Delta t} + \widehat{\delta}_i^{(1)} J_i^{(n)} = 0. \quad (9)$$

となる。このとき、離散化された拘束条件(1)の時間発展は、

$$\frac{\pi_{(k)}^{(n+1)} - \pi_{(k)}^{(n)}}{\Delta t} = \frac{1}{2\mu_0} \widehat{\delta}^{(1)i} \left\{ \widehat{\delta}^{-a} \widehat{\delta}_a^{(1)} (A_{i(k)}^{(n+1)} + A_{i(k)}^{(n)}) - \widehat{\delta}^{-a} \widehat{\delta}_i^{(1)} (A_a^{(n+1)} + A_a^{(n)}) \right\}, \quad (5)$$

$$\frac{\pi_{(k)}^{(n+1)} - \pi_{(k)}^{(n)}}{\Delta t} = \frac{1}{2\mu_0} \widehat{\delta}^{(1)i} \left\{ \widehat{\delta}^{(1)a} \widehat{\delta}_a^{(1)} (A_{i(k)}^{(n+1)} + A_{i(k)}^{(n)}) - \widehat{\delta}^{(1)a} \widehat{\delta}_i^{(1)} (A_a^{(n+1)} + A_a^{(n)}) \right\} = 0, \quad (10)$$

となる。つまり、 $A^1 = A^1(y, z)$ ,  $A^2 = A^2(z, x)$  や  $A^3 = A^3(x, y)$  のように  $x^i = (x, y, z)$  としたとき、 $i \neq j$  のとき  $A^j$  が  $x^i$  を成分として含んでいる ( $\partial_i A^j \neq 0$ ) と、式(5)が**恒等的に0にならない**。と任意のベクトルポテンシャル  $A^i$  に対して**恒等的に0となる**。⇒ 初期での数値誤差がそのまま推移する。

## <数値計算>

次の2つの計算例はそれぞれ、(5)の右辺が0になる場合と、ならない場合を実現するように意図的に作成したものである。ともに空間分割数は  $100 \times 100 \times 100$ , CFLは0.1, 境界条件は周期境界条件, 初期値ともに厳密解である。

計算例1 初期値は以下の厳密解を  $t = 1$  としたもの:

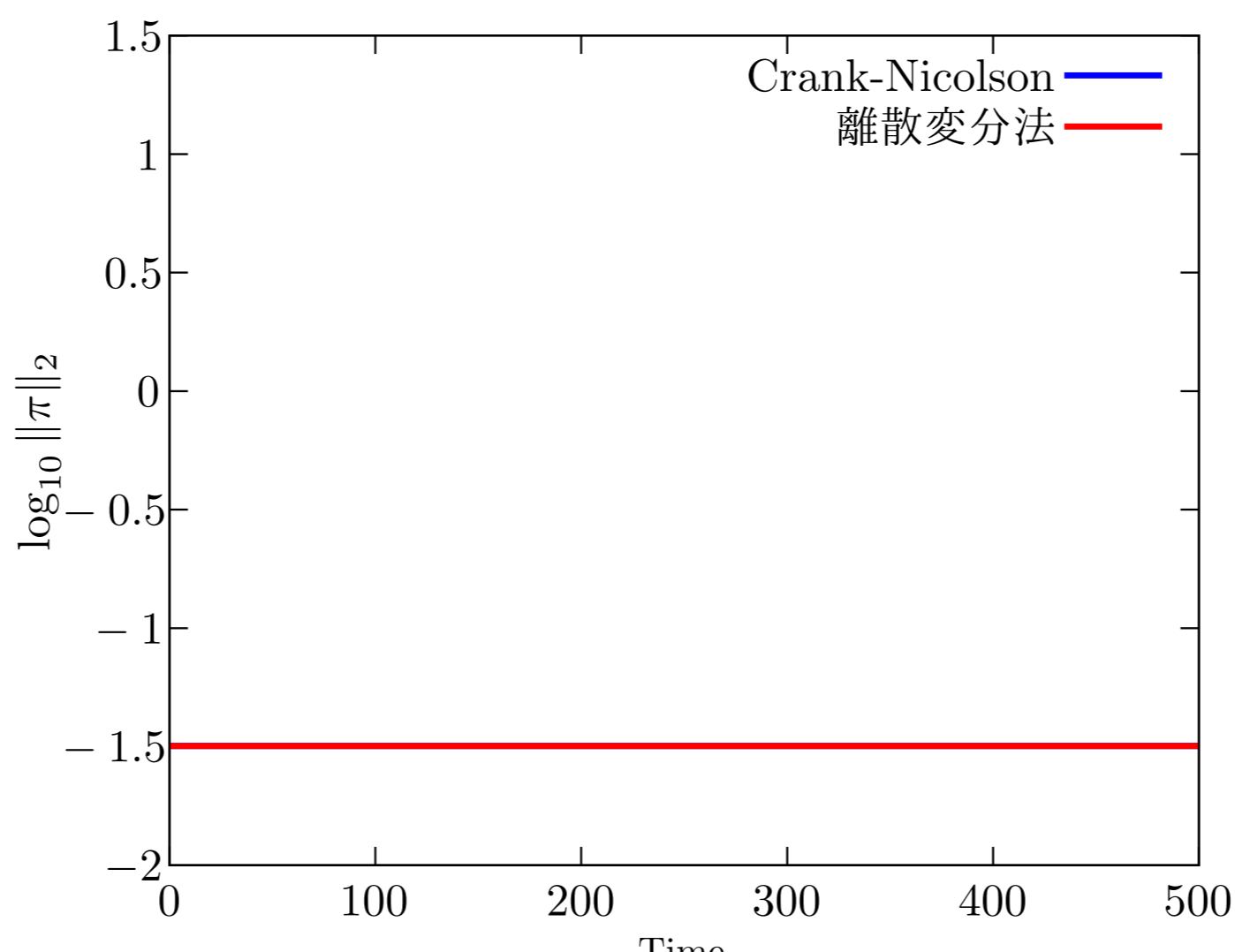
$$A_i = 2\pi \left( \frac{\cos(\omega t + 2\pi x)}{\omega^2}, \frac{\sin(\omega t + 2\pi y)}{\omega^2}, \sin(2\pi z) \right), \quad (11)$$

$$\Pi^i = 2\pi \left( -\frac{\sin(\omega t + 2\pi x)}{\omega}, \frac{\cos(\omega t + 2\pi y)}{\omega}, -t \sin(2\pi z) \right), \quad (12)$$

$$\phi = t \cos(2\pi z), \quad (13)$$

$$\rho = 4\pi^2 \left( \frac{\cos(\omega t + 2\pi x)}{\omega} + \frac{\sin(\omega t + 2\pi y)}{\omega} + t \cos(2\pi z) \right), \quad (14)$$

$$J_i = -2\pi \begin{pmatrix} \cos(\omega t + 2\pi x) \\ \sin(\omega t + 2\pi y) \\ \sin(2\pi z) \end{pmatrix}. \quad (15)$$



- 横軸:時間, 縦軸:拘束条件値(数値誤差)。
- 縦軸の値は誤差のlogなので、小さいことが良い結果を意味する。
- ベクトルポテンシャル  $A^i$  が  $\partial_i A^i = 0$  を満たすので、拘束条件  $\pi$  の値がCrank-Nicolsonでも恒等的に0になることが予測される。
- Crank-Nicolsonスキームによる結果(青線)と離散変分法による結果(赤線)は一致した。
- 数値計算の結果から、ともに拘束値  $\pi$  の初期値が時間とともに推移している。

計算例2 初期値は以下の厳密解を  $t = 1$  としたもの:

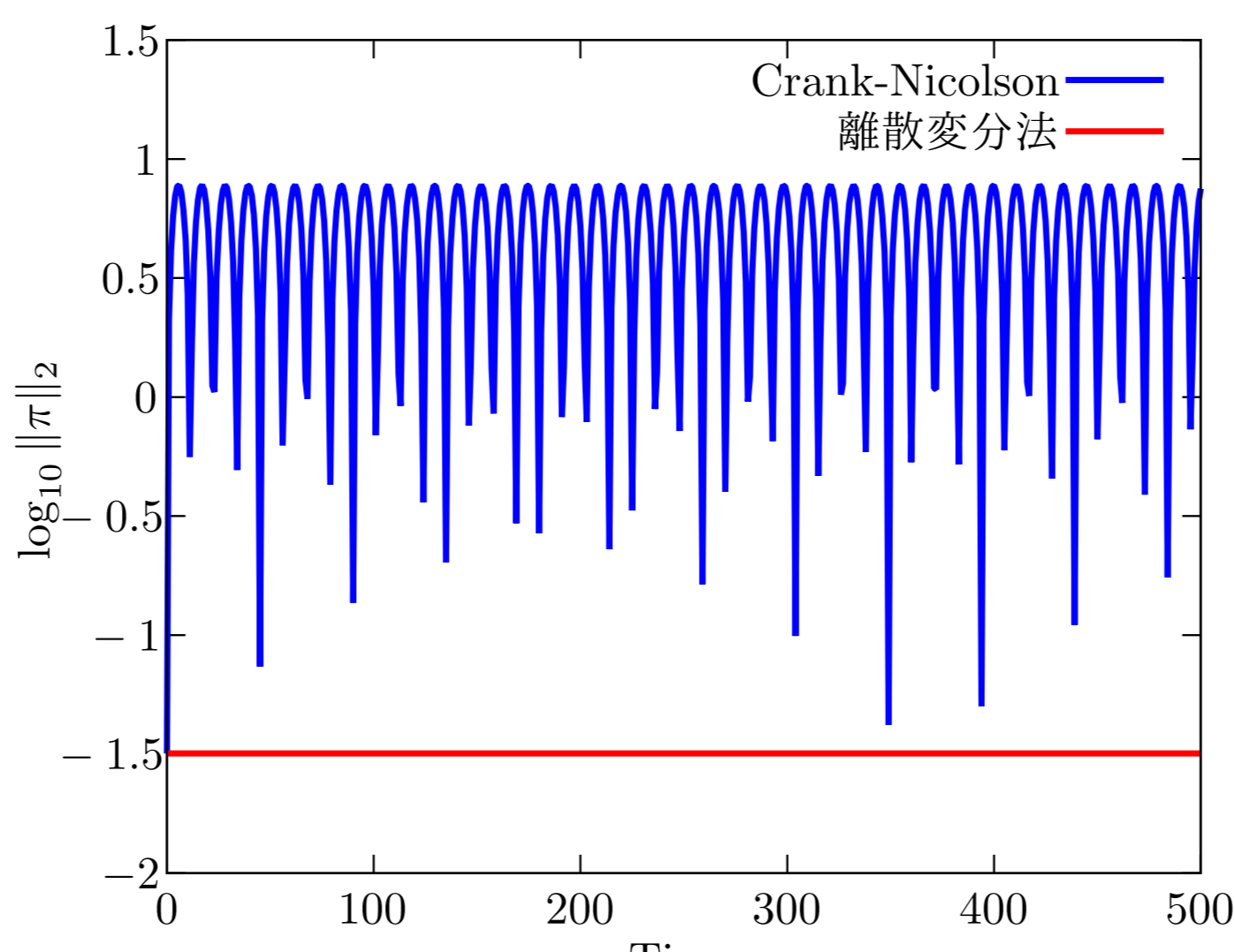
$$A_i = 2\pi \left( \frac{\cos(\omega t + 2\pi x)}{\omega^2}, \frac{\sin(\omega t + 2\pi y)}{\omega^2}, \sin(2\pi(x + y + z)) \right), \quad (16)$$

$$\Pi^i = 2\pi \left( -\frac{\sin(\omega t + 2\pi x)}{\omega}, \frac{\cos(\omega t + 2\pi y)}{\omega}, -t \sin(2\pi z) \right), \quad (17)$$

$$\phi = t \cos(2\pi z), \quad (18)$$

$$\rho = 4\pi^2 \left( \frac{\cos(\omega t + 2\pi x)}{\omega} + \frac{\sin(\omega t + 2\pi y)}{\omega} + t \cos(2\pi z) \right), \quad (19)$$

$$J_i = -2\pi \begin{pmatrix} \cos(\omega t + 2\pi x) + 4\pi^2 \sin(2\pi(x + y + z)) \\ \sin(\omega t + 2\pi y) + 4\pi^2 \sin(2\pi(x + y + z)) \\ \sin(2\pi z) - 8\pi^2 \sin(2\pi(x + y + z)) \end{pmatrix}. \quad (20)$$



- 横軸:時間, 縦軸:拘束条件値(数値誤差)。
- 縦軸の値は誤差のlogなので、小さいことが良い結果を意味する。
- ベクトルポテンシャル  $A^i$  が  $\partial_i A^i = 0$  を満たさないため、拘束条件  $\pi$  の値がCrank-Nicolsonでは恒等的に0にならないことが予測される。
- 数値計算の結果から、離散変分の場合(赤色)は拘束値  $\pi$  の初期値が時間とともに推移しているが、Crank-Nicolsonの場合(青色)は誤差が増大することがわかる。

## <結果>

- 式(5)から、Crank-Nicolsonスキームでは初期値によっては拘束条件が保存しない場合がある。
- 式(10)から、離散変分法では初期値によらず拘束条件が保存する。
- 数値計算によって、上の2つのとおりの数値結果が得られた。
- 離散変分法のほうが優れた離散化手法であることが示された。



本ポスターはリンク先に置いてあります。