

Title	双曲形偏微分方程式の数値解法プログラムの研究開発
Author(s)	坂本, 正雄
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1990, 79, p. 53-60
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/65900
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

双曲型偏微分方程式の数値解法プログラムの研究開発

大阪大学工学部精密工学科

坂本 正雄

1. 概要

結晶性固体の塑性変形は主に転位の運動特性により記述される。転位の運動方程式は振動弦モデルによると次のように近似される。

$$M \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} = \Gamma \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} + b \tau - B \frac{\partial x}{\partial t} \quad (1)$$

ここで簡単のために転位はほぼ z 軸に平行であるとし、その形状を $x(z)$ とした。 M は転位の単位長さ当りの有効質量、 Γ は転位の線張力、 b はバーガース・ベクトルの長さ、 τ は有効応力、 B は動摩擦係数、 t は時間である。なお結晶の幅は ℓ 、つまり $0 \leq z \leq \ell$ とした。また鏡像力のために転位は結晶表面に垂直であるとの境界条件を課すと

$$\left(\frac{\partial x}{\partial z} \right)_{z=0} = \left(\frac{\partial x}{\partial z} \right)_{z=\ell} = 0 \quad (2)$$

である。

τ は外部応力や、溶質原子、他の転位等の存在のために、場所 (x, z) により変動するので、ここでは $b \tau = f(x, z)$ と記す。

今 $x = \alpha b X$ 、 $z = \beta b Z$ 、 $t = \beta^2 B b^2 T / \Gamma$ と変数を置き替えると(1)式は

$$A \frac{\partial^2 X}{\partial T^2} + \frac{\partial X}{\partial T} - \frac{\partial^2 X}{\partial Z^2} = F(X, Z) \quad (3)$$

$$A = \frac{M \Gamma}{\beta^2 B b^2} \quad F(X, Z) = \frac{\beta^2 b}{\Gamma \alpha} f(\alpha b X, \beta b Z) \quad (4)$$

となる。ここで α 、 β は任意定数、 (X, Z) は無次元座標、 T は無次元時間である。境界条件は、

$$\left(\frac{\partial X}{\partial Z} \right)_{Z=0} = \left(\frac{\partial X}{\partial Z} \right)_{Z=LZ} = 0 \quad (5)$$

ただし $LZ = \ell / \beta b$ である。すなわち、減衰項を含む、任意力作用下の、境界を固定しない弦(転位)の運動は、(3)、(4)、(5)式を解けばよい。

本研究開発では $X(Z, T)$ を解としてもつ双曲型偏微分方程式(3)、(4)式を(5)式の境界条件と、

$$\left(\frac{\partial X}{\partial T} \right)_{T=0} = V(Z, T=0) \quad (6)$$

の初期条件の下で解く、FORTRAN 77 SX スーパーコンピュータ用のサブルーチンを開発した。ここで $V(Z, T)$ は無次元速度である。なお解は実数解のみを扱っている。(4)式の $F(X, Z)$ は、 α, β, b を適当な値にとって、 X および Z のきざみを 1 とすることにより 2次元配列 $F(J, Z)$ を作って

$$F(X, Z) = F(J, Z) + \{F(J+1, Z) - F(J, Z)\}(X - J) \quad (7)$$

という直線補間で与えている。ここで $J = \text{INT}(X)$ であり、 $Z = 0, 1, 2, \dots, LZ$ である。

2. 使用法

CALL PDEHT (F, LX, LZ, A, DT, IT, I, X, XO, XN, V, VMAX, XMIN, XMAX, IER)

である。引数の説明等は表1の通りである。

表1. 引数の説明等

引数	型	種類・寸法	内 容
F	単精度実数型	2次元配列	入力。F(0 : LX, 0 : LZ) の任意数値データ配列。保存される。
LX	整数型		入力。配列F(0 : LX, 0 : LZ) の寸法宣言子。LX \geq 1。上限はメモリーサイズにより制限される。保存される。
LZ	整数型		入力。配列F(0 : LX, 0 : LZ) の寸法宣言子。LZ \geq 1。上限はメモリーサイズにより制限される。保存される。
A	倍精度実数型		入力。双曲型偏微分方程式(3)式の係数A。A > 0。保存される。
DT	倍精度実数型		入力。時間のきざみ幅。0 < DT < \sqrt{A} であれば解は収束するが、DTが大きいほど解の精度が悪いので注意が必要。保存される。
IT	整数型		入力。計算の繰り返し数。経過時間はIT * DTとなる。IT \geq 1。保存される。
I	整数型		出力。計算打切時の繰り返し数が入る。経過時間はI * DTとなる。正常終了時はI = ITである。

引数	型	種類・寸法	内 容
X	倍精度実数型	1次元配列	入出力。X (-1 : LZ + 1) の1次元配列。入力データは座標 X (J), J = 0, 1, 2, …, LZ を与える。0 ≤ X (J) < LX でなければならない。計算終了後は出力データが入る。
XO	倍精度実数型	1次元配列	作業用配列。XO (0 : LZ)。
XN	倍精度実数型	1次元配列	作業用配列。XN (-1 : LZ)。
V	倍精度実数型	1次元配列	入出力。V (0 : LZ) の1次元配列。入力データは速度 V (J), J = 0, 1, 2, …, LZ を与える。計算終了時は結果が出力される。
VMAX	倍精度実数型		出力。計算途中における速度 V の絶対値の最大を与える。VMAX は 1 / DT より十分小さいほど解の精度がよい。
XM IN	倍精度実数型		出力。X 又は XN で現れた最小値。0 ≤ XM IN < LX の必要がある。
XMAX	倍精度実数型		出力。X 又は XN で現れた最大値。0 ≤ XMAX < LX の必要がある。
I E R	整数型		出力。エラーインディケータ

現在センターライブラリーは、SX77で直接使用できるようにはなっていない。そこで本ライブラリー・サブプログラムPDEHTを使用するためには、そのソース・プログラムをユーザーのソース・プログラムに結合しなければならない。例えば

ACOSのTSSにおいて

```
OLD MAIN; LIBSOURCE / CLIB7 / PDEHT, R
RESE
RESAVE MAIN
```

とすればよい。ここでMAINはユーザーの行番付のソース・プログラム、RESAVE後のMAINはMAINにPDEHTを結合したユーザーのソース・プログラムである。

3. エラーインディケータ I E R の説明

表1のエラーインディケータ I E R の内容は次の通りである。

- IER=0 正常終了
- 1 $A \leq 0$ である。処理を中断する。
 - 2 $LX < 1$ である。処理を中断する。
 - 3 $LZ < 1$ である。処理を中断する。
 - 4 $0 < DT < \sqrt{A}$ でない。処理を中断する。
 - 5 $IT < 1$ である。処理を中断する。
 - 6 入力、 $X(J)$, $J = 0, 1, 2, \dots, LZ$ の最小値をXM IN, 最大値をXMA Xとしたとき、 $XM IN < 0$ 又は $XMA X \geq LX$ である。処理を中断する。
 - 7 $XN(J)$, $J = 0, 1, 2, \dots, LZ$ の最小値をXM IN、最大値をXMA Xとしたとき、 $XM IN < 0$ 又は $XMA X \geq LX$ である。処理を中断する。I には中断時の計算繰返し数が入る。
 - 8 VMA Xは $1/DT$ より大きい。解の精度が良くないので処理を中断する。I には中断時の計算繰返し数が入る。

4. 計算方法

中心差分直接解法により(3)式を解く。(3)式はDTを無次元時間きざみ、m回計算後の時間Tを $T = mDT$ とすると、Z方向のきざみを1、 $X(Z, T) = X_{z,m}$ として

$$X_{z,m+1} = \frac{2DT^2}{(DT+2A)} \left\{ X_{z+1,m} - \left[2 - \frac{2A}{DT^2}\right] X_{z,m} + X_{z-1,m} + F(X_{z,m}, Z) \right\} + \frac{DT-2A}{DT+2A} X_{z,m-1} \quad (8)$$

と表せる。境界条件は $X_{-1,m} = X_{1,m}$, $X_{LZ+1,m} = X_{LZ-1,m}$ である。解 $X(Z, T)$ が発振しないための収束条件は $0 < DT < \sqrt{A}$ である。なお無次元速度 $V(Z, T)$ は

$$V(Z, T) = \frac{1}{2DT} (X_{z,m+1} - X_{z,m-1}) \quad (9)$$

で与えている。

5. SXのTSSの簡易形による使用例

ソース・プログラム

```

SYSTEM ?FRT7 O MAIN
*LIST
0010C#SXRUN MAIN:FREE2 OBSERVE
0020     IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
0030     PARAMETER(LX=10,LZ=3)
0040     REAL*4 F(0:LX,0:LZ)
0050     REAL*8 X(-1:LZ+1),V(0:LZ),XO(0:LZ),XN(-1:LZ)
0060     DO 10 K=0,LZ
0070         DO 10 J=0,LX
0080             F(J,K)=1.D-1
0090     10 CONTINUE
0100     DO 20 K=0,LZ
0110         X(K)=5.DO
0120         V(K)=1.D-1
0130     20 CONTINUE
0140     A=1.0D2
0150     DT=5.D-1
0160     IT=2
0170     WRITE(6,*) (X(J),V(J),J=0,LZ)
0180     DO 40 K=1,3
0190         CALL PDEHT(F,LX,LZ,A,DT,IT,I,X,XO,XN,V,VMAX,XMIN,XMAX,IER)
0200         WRITE(6,30) IER,DT,VMAX,XMIN,XMAX,(X(J),V(J),J=0,LZ)
0210     30 FORMAT(1H0,I2,4E13.6/(1H ,6E13.6))
0220         IF(IER.NE.0) STOP
0230     40 CONTINUE
0240     STOP
0250     END
0260C
0270     SUBROUTINE PDEHT(F,LX,LZ,A,DT,IT,I,X,XO,XN,V,VMAX,XMIN,XMAX,IER)
0280     IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
0290     REAL*4 F(0:LX,0:LZ)
0300     REAL*8 X(-1:LZ+1),V(0:LZ),XO(0:LZ),XN(-1:LZ)
0310     IF(A.LE.0.DO) GO TO 100
0320     IF(LX.LT.1) GO TO 200
0330     IF(LZ.LT.1) GO TO 300
0340     DSA=DSQRT(A)
0350     IF(DT.LE.0.DO.OR.DT.GE.DSA) GO TO 400
0360     IF(IT.LT.1) GO TO 500
0370     XMIN=X(0)
0380     XMAX=X(0)
0390     DO 1 J=1,LZ
0400         IF(X(J).LT.XMIN) XMIN=X(J)
0410         IF(X(J).GT.XMAX) XMAX=X(J)
0420     1 CONTINUE
0430     IF(XMIN.LT.0.DO.OR.XMAX.GE.DFLOAT(LX)) GO TO 600
0440     IER=0
0450     I=0
0460     VMAX=DABS(V(0))
0470     VSCZ=2.DO*DT**2/(DT+2.DO*A)
0480     VSC4T=(2.DO*A-DT)/(2.DO*A+DT)
0490     VSA=VSC4T/VSCZ
0500     VSB=2.DO-(1.DO+VSC4T)/VSCZ
0510     X(-1)=X(1)
0520     X(LZ+1)=X(LZ-1)
0530     DO 10 J=0,LZ
0540         NI=X(J)
0550         XD2=X(J)-NI
0560         FV=(F(NI+1,J)-F(NI,J))*XD2+F(NI,J)
0570         XO(J)=VSCZ/(1.DO+VSCZ*VSA)*(X(J+1)-VSB*X(J)+X(J-1)+FV)
0580     8         -2.DO*DT*V(J)/(1.DO+VSCZ*VSA)
0590         XN(J)=2.DO*DT*V(J)+XO(J)
0600         IF(XN(J).LT.XMIN) XMIN=XN(J)
0610         IF(XN(J).GT.XMAX) XMAX=XN(J)
0620         IF(DABS(V(J)).GT.VMAX) VMAX=DABS(V(J))
0630     10 CONTINUE
0640     IF(XMIN.LT.0.DO.OR.XMAX.GE.DFLOAT(LX)) GO TO 700
0650     IF(VMAX.GT.1.DO/DT) GO TO 800
0660     DO 20 J=0,LZ
0670         XO(J)=X(J)
0680         X(J)=XN(J)

```

```

0690 20 CONTINUE
0700 DO 30 I=1,IT
0710 X(-1)=X(1)
0720 X(LZ+1)=X(LZ-1)
0730 DO 40 J=0,LZ
0740 NI=X(J)
0750 XD2=X(J)-NI
0760 FV=(F(NI+1,J)-F(NI,J))*XD2+F(NI,J)
0770 XN(J)=VSCZ*(X(J+1)-VSB*X(J)+X(J-1)-VSA*XO(J)+FV)
0780 IF(XN(J).LT.XMIN) XMIN=XN(J)
0790 IF(XN(J).GT.XMAX) XMAX=XN(J)
0800 V(J)=5.D-1/DT*(XN(J)-XO(J))
0810 IF(DABS(V(J)).GT.VMAX) VMAX=DABS(V(J))
0820 XO(J)=X(J)
0830 X(J-1)=XN(J-1)
0840 40 CONTINUE
0850 X(LZ)=XN(LZ)
0860 IF(XMIN.LT.0.DO.OR.XMAX.GE.DFLOAT(LX)) GO TO 710
0870 IF(VMAX.GT.1.DO/DT) GO TO 810
0880 30 CONTINUE
0890 60 DO 50 J=0,LZ
0900 X(J)=XO(J)
0910 50 CONTINUE
0920 RETURN
0930 100 IER=1
0940 WRITE(6,101) IER,A
0950 101 FORMAT(1H0,'** IER=',I1,' A=',D23.16,' **')
0960 RETURN
0970 200 IER=2
0980 WRITE(6,201) IER,LX
0990 201 FORMAT(1H0,'** IER=',I1,' LX=',I11,' **')
1000 RETURN
1010 300 IER=3
1020 WRITE(6,301) IER,LZ
1030 301 FORMAT(1H0,'** IER=',I1,' LZ=',I11,' **')
1040 RETURN
1050 400 IER=4
1060 WRITE(6,401) IER,DT,DSA
1070 401 FORMAT(1H0,'** IER=',I1,' DT=',D23.16,' DSQRT(A)=' ,D23.16,' **')
1080 RETURN
1090 500 IER=5
1100 WRITE(6,501) IER,IT
1110 501 FORMAT(1H0,'** IER=',I1,' IT=',I11,' **')
1120 RETURN
1130 600 IER=6
1140 WRITE(6,601) IER,XMIN,XMAX,I
1150 601 FORMAT(1H0,'** IER=',I1,' XMIN=',D23.16,' XMAX=',D23.16,' I=',
1160 & I11,' **')
1170 RETURN
1180 700 IER=7
1190 WRITE(6,601) IER,XMIN,XMAX,I
1200 RETURN
1210 710 IER=7
1220 WRITE(6,601) IER,XMIN,XMAX,I
1230 GO TO 60
1240 800 IER=8
1250 WRITE(6,801) IER,VMAX,I
1260 801 FORMAT(1H0,'** IER=',I1,' VMAX=',D23.16,' I=',I11,' **')
1270 RETURN
1280 810 IER=8
1290 WRITE(6,801) IER,VMAX,I
1300 GO TO 60
1310 END

```

実行例

```
*SXRUN
5.000000000000000 0.100000000000000 5.000000000000000 0.100000000000000
5.000000000000000 0.100000000000000 5.000000000000000 0.100000000000000

0 0.500000E+00 0.100000E+00 0.500000E+01 0.515000E+01
0.510000E+01 0.100000E+00 0.510000E+01 0.100000E+00 0.510000E+01 0.100000E+00
0.510000E+01 0.100000E+00

0 0.500000E+00 0.100000E+00 0.510000E+01 0.525000E+01
0.520000E+01 0.100000E+00 0.520000E+01 0.100000E+00 0.520000E+01 0.100000E+00
0.520000E+01 0.100000E+00

0 0.500000E+00 0.100000E+00 0.520000E+01 0.535000E+01
0.530000E+01 0.100000E+00 0.530000E+01 0.100000E+00 0.530000E+01 0.100000E+00
0.530000E+01 0.100000E+00
*
```

謝 辞

本研究開発課題は大阪大学大型計算機センター研究開発計画の一環として行われた。