双曲型偏微分方程式の数値解法プログラムの研究開発（Ⅲ）

—減衰項を付加出来る波動方程式—

大阪大学工学部精密工学科

坂本正雄，森　勇藏

1．はじめに

今回作成したプログラムは，スーパーコンピュータＳＸ－３Ｒで使用するためのものであるが，ＡＣＯＳはもちろん，ワークステーションでも，ＦＯＲＴＲＡＮ７７の走るコンピュータであればどの機種でも使用出来る．解くべき方程式が同じであれば適用分野は特に限定されない．しかし境界条件の関係で，適用分野は主に結晶塑性関係であろうと思われるが，特に溶質原子によるランダムに変動する応力場中での，外部応力の負荷による，転位の慣性効果を伴った運動特性を，弦モデルにより計算することを意識している．また，減衰項を任意の値（正から零まで）にして計算出来るようにしたので，超伝導遷移による転位運動の減衰項変化を考慮出来る．専門的には，極低温での固溶体硬化の研究者をユーザーとして想定している．なお，転位の有効線張力及び単位長さ当たりの有効質量が，転位の運動速度に依存しないとしてプログラミングされているので，有効線張力及び有効質量が転位の運動速度に依存することを考慮するときには，参考文献[1,2]を参照されたい．

利用形態はサブルーチンであり，ソース・プログラムの言語はＦＯＲＴＲＡＮ７７である．本サブルーチンは，大阪大学大型計算機センターの研究開発課題として認められたものであり，センターライブラリー・ＣＬＩＢ７に，サブルーチン名“ＰＤＥＨＴＤ”（倍精度版），“ＰＤＥＨＴＳ”（単精度版）として登録されている．

2．概　要

以前にも“双曲型偏微分方程式の数値解法プログラムの研究開発”をセンターニュースに報告[3,4]したが，そこでは，減衰項に関係する動摩擦係数Bを零に出来ない計算法になっていた．今回は$B=0$の場合にも計算出来るようにしたので，多少，以前の報告と重複するが，初めから省略せずに記述する．

転位の運動方程式は，弦モデル[5]によると，次のような減衰項を含む波動方程式で近似される．

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

ここで簡単のために，転位はz軸にほぼ平行であるとし，その形状を$x(z, t)$とする．Mは転位の単位長さ当たりの有効質量，Eは転位の有効線張力，τは転位に働く有効応力，bはバーガース・ベクトルの大きさ，tは時間である．

転位の両端自由の境界条件のときは，結晶の幅をl，つまり$0 \leqq z \leqq l$として，転位は鏡像力のために結晶表面に垂直となるので

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

である．転位の両端固定の境界条件のときは，転位のピン止め間隔をl，つまり$0 \leqq z \leqq l$として，ピン止め点における転位のx座標をそれぞれx_1，x_2とすると

$$x(z=0, t) = x_1, \quad x(z=l, t) = x_2 \tag{3}$$

である．

有効応力τは，外部応力や溶質原子，他の転位，等が存在するために，場所(x, z)により変動するので，ここでは転位に働く単位長さ当たりの力を，$\tau b = f(x, z)$と記述する．いま，$x = \alpha b X$，$z = \beta b Z$，$t = \beta b T(M/E)^{1/2}$と変数を置き換えると(1)式は

$$\frac{\partial^2 X}{\partial T^2} + G\frac{\partial X}{\partial T} - \frac{\partial^2 X}{\partial Z^2} = F(X, Z) \tag{4}$$

$$G = \frac{\beta b B}{(ME)^{1/2}} \tag{5}$$

$$F(X, Z) = \frac{\beta^2 b}{\alpha E} f(x, z) \tag{6}$$

となる．ここでα，βは任意正定数，(X, Z)は無次元座標，Tは無次元時間である．境界条件は両端自由のとき

$$\left(\frac{\partial X}{\partial Z}\right)_{Z=0} = \left(\frac{\partial X}{\partial Z}\right)_{Z=L} = 0 \tag{7}$$

となる．ただし$L = l/\beta b$である．あるいは両端固定のとき，境界条件は

$$X(Z=0, T) = X_1, \quad X(Z=L, T) = X_2 \tag{8}$$

となる．ただし，$X_1 = x_1/\alpha b$，$X_2 = x_2/\alpha b$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，(4)式を(7)式の境界条件の下で解けばよく，境界を固定した弦(転位)の運動は，(4)式を(8)式の境界条件の下で解けばよい．なお，LをZの等分割数とするので，Lが正の整数となるようにβを決める．

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(4)式を，(7)式又は(8)式の境界条件と，$X(Z,\ T=0)$及び

$$\left(\frac{\partial X}{\partial T}\right)_{T=0}=V(Z,\ T=0) \tag{9}$$

という初期条件の下で解く，ＦＯＲＴＲＡＮ７７／ＳＸ－３Ｒ・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．また(6)式の$F(X,\ Z)$は，a，β，bを適当な値にとって，X及びZの刻みを１にすることにより，２次元配列$\mathrm{F(I,\ J)}$を作って

$$F(X,\ Z)=\mathrm{F(I,\ J)}+(\mathrm{F(I+1,\ J)}-\mathrm{F(I,\ J)})(X-\mathrm{I}) \tag{10}$$

という線形補間で与えている．ここで$\mathrm{I}=\mathrm{INT}(X)$である．なお，両端自由の場合$\mathrm{J}=Z=0,1,2,\cdots,L$であるが，両端固定の場合$\mathrm{J}=Z-1=0,1,2,\cdots,L-2$である．

３．計算方法

中心差分陽解法により(4)式を解く．(4)式は，δを無次元時間刻み，m回計算後の無次元時間Tを$T=m\delta$とすると，Z方向の刻みを１，$X(Z,\ T)=X_{\mathrm{J},m}$として

$$X_{\mathrm{J},m+1}=\frac{2\delta^2}{G\delta+2}\left\{X_{\mathrm{J}+1,m}+\left(\frac{2}{\delta^2}-2\right)X_{\mathrm{J},m}+X_{\mathrm{J}-1,m}+F(X_{\mathrm{J},m},\ Z)\right\}+\frac{G\delta-2}{G\delta+2}X_{\mathrm{J},m-1} \tag{11}$$

と表せる．境界条件は，両端自由のとき$X_{-1,m}=X_{1,m}$及び$X_{L+1,m}=X_{L-1,m}$であり，両端固定のとき$X_{-1,m}=X_1$及び$X_{L-1,m}=X_2$である．

このようにして求めた解$X(Z,\ T)$が発振せずに安定に収束する条件は，次のようにして求められる．(4)式で$F(X,\ Z)=0$としたものを中心差分式で書けば

$$X_{k,m+1}=\frac{2\delta^2}{(G\delta+2)\Delta^2}\left\{X_{k+1,m}+\left(\frac{2\Delta^2}{\delta^2}-2\right)X_{k,m}+X_{k-1,m}\right\}+\frac{G\delta-2}{G\delta+2}X_{k,m-1} \tag{12}$$

となる．ここでΔはZ方向の刻み幅，kはZ方向の刻みの番号で$k=0,1,2,\cdots\cdots$である．なお，解の安定性を調べるときには$F(X,\ Z)=0$としても一般性を失わない．いま解がZ軸を中心にして振幅δ_X波長2Δで定常振動しているとすれば，$X_{k,m}=\delta_X$，$X_{k-1,m}=X_{k+1,m}=X_{k,m-1}=X_{k,m+1}=-\delta_X$という関係が成り立つ．これを(12)式に代入すれば，$\delta^2/\Delta^2=1$という式が得られる．したがって定常振動が減衰する条件は$0<\delta/\Delta<1$

となる．ここで(11)式では$\Delta=1$であることを考慮すると結局

$$0<\delta<1 \tag{13}$$

が安定条件となる．

なお無次元速度$V(Z,\ T)$は

$$V(Z,\ T)=(X_{J,m+1}-X_{J,m-1})/2\delta \tag{14}$$

で与えている．

4．使用法

本サブルーチン“ＰＤＥＨＴＤ”(倍精度版)を使うにはＦＯＲＴＲＡＮ７７プログラム単位の中で

```
CALL PDEHTD(NB, F, LX, LZ, G, DT, IT, I, X, XO,
     XN, V, VMAX, XMIN, XMAX, IER)
```

と呼び出せばよい．引数の説明等は表１のとおりである．なお，“ＰＤＥＨＴＳ”(単精度版)を使用するときには，表１の倍精度実数型をすべて単精度実数型に変更するとよい．

次にＦＯＲＴＲＡＮ７７の変数との対応を示すと，Ｘ(Ｊ)は任意のmにおける$X_{J,m}$であり，ＧはGであり，ＤＴはδであり，Ｖ(Ｊ)は任意のmにおける$V(Z,\ m\delta)$であり，ＬＺは両端自由のときL，及び両端固定のとき$L-2$である．

ＮＢ＝０，すなわち(7)式の境界条件では，初期条件としてＸ(Ｊ)，Ｊ＝0,1,2,･･･，ＬＺ及びＶ(Ｊ)，Ｊ＝0,1,2,･･･，ＬＺを与えればよく，Zの値はそのままＪの値に等しくなる．しかし，ＮＢ≒０，すなわち(8)式の境界条件では，初期条件としてＸ(Ｊ)，Ｊ＝-1,0,1,2,･･･，ＬＺ，ＬＺ＋1及びＶ(Ｊ)，Ｊ＝0,1,2,･･･，ＬＺを与えればよいが，Z＝Ｊ＋１となっているので注意が必要である．つまり，X_1＝Ｘ(-1)，X_2＝Ｘ(ＬＺ＋1)，$l=\beta b$(ＬＺ＋2)である．

現在センターライブラリー・ＣＬＩＢ７はスーパーコンピュータで直接使用出来るようにはなっていない．そこで本サブルーチン“ＰＤＥＨＴＤ”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/PDEHTD,R
RESE
SAVE MPPDEHTD
```

とすればよい．ここでＭＡＩＮはユーザーの行番号付，形式２の自由形式(ＦＲＥＥ２)[6]

表１　引数の説明等

引　数	型	種類・寸法	内　　　　容
ＮＢ	整数型		入力．ＮＢ＝0のときは両端自由，すなわち(7)式の境界条件となる．ＮＢ≒0のときは両端固定，すなわち(8)式の境界条件となる．保存される．
Ｆ	倍精度実数型	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≧１．上限はメモリー容量により制限される．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≧１．上限はメモリー容量により制限される．保存される．
Ｇ	倍精度実数型		入力．双曲型偏微分方程式(4)式の係数G．Ｇ≧0．保存される．
ＤＴ	倍精度実数型		入力．時間の刻み幅．0＜ＤＴ＜1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≧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．
Ｘ	倍精度実数型	１次元配列	入出力．Ｘ(-1:ＬＺ+1)の配列．入力データはＮＢ＝0のとき座標Ｘ(Ｊ)，Ｊ＝0,1,2,･･･,ＬＺを与える．ＮＢ≒0のときはＸ(Ｊ)，Ｊ＝-1,0,1,2,･･･,ＬＺ,ＬＺ+1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．計算終了後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が１／ＤＴより小さいほど解の精度はよい．
ＸＭＩＮ	倍精度実数型		出力．Ｘ又はＸＮで現れた最小値．0≦ＸＭＩＮ＜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．
ＩＥＲ	整数型		出力．エラーインディケーター

で書かれたソース・プログラムであり，ＳＡＶＥ後のＭＰＰＤＥＨＴＤはＭＡＩＮに“ＰＤＥＨＴＤ”を結合したユーザーのソース・プログラムである．

5．エラーインディケーターＩＥＲの説明

表１のエラーインディケーターＩＥＲの内容は次のとおりである．

ＩＥＲ＝０　正常終了

１　Ｇ＜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＜１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,･･･,ＬＺの最小値をＸＭＩＮ，最大値をＸＭＡＸとしたとき，ＸＭＩＮ＜０又はＸＭＡＸ≧ＬＸである．処理を中断する．

７　ＸＮ(Ｊ)，Ｊ＝0,1,2,･･･,ＬＺの最小値をＸＭＩＮ，最大値をＸＭＡＸとしたとき，ＸＭＩＮ＜０又はＸＭＡＸ≧ＬＸである．処理を中断する．Ｉには中断時の計算繰り返し数が入る．

８　ＶＭＡＸは１／ＤＴより大きい．解の精度がよくないので処理を中断する．Ｉには中断時の計算繰り返し数が入る．

6．ＦＯＲＴＲＡＮ７７／ＳＸ－３Ｒ・簡易形バッチＪＯＢによる使用例(精度検定例)

Granato[7)]によれば，(4)式において$F(X,\ Z)=F_0$＝一定とし，$X(Z=0,\ T)=X(Z=L,\ T)=X_0$の両端固定の境界条件を課すと解析解は，$X(Z,\ T=0)=X_0$, $V(Z,\ T=0)=V_0$の初期条件の下で

$$X(Z,\ T)=X_0+\frac{F_0}{2}Z(L-Z)+e^{-\gamma T}\sum_{n=0}^{\infty}(A_{2n+1}\cos\omega'_{2n+1}T+ B_{2n+1}\sin\omega'_{2n+1}T)\sin\left\{\frac{(2n+1)\pi Z}{L}\right\} \tag{15}$$

と表される．ここで，$\gamma=G/2$，$A_{2n+1}=-4F_0L^2/\pi^3(2n+1)^3$, $B_{2n+1}=4V_0/(2n+1)\pi\omega'_{2n+1}+\gamma A_{2n+1}/\omega'_{2n+1}$, $\omega'_{2n+1}=(2n+1)\omega_0[1-\gamma^2/(2n+1)^2\omega_0{}^2]^{1/2}$，$\omega_0=\pi/L$である．この解析解と，サブルーチン“ＰＤＥＨＴＤ”の数値解を比較した，ＳＸ－３Ｒの簡易形バッチＪＯＢによる使用例(精度検定例)がリスト１，及びリスト２である．またリスト３は“ＰＤＥＨＴＤ”のソース・プログラムである．

簡単にメイン・プログラム内のＦＯＲＴＲＡＮ変数を説明しておく．ＸＧが解析解であり，ＸＥは“ＰＤＥＨＴＤ”の数値解と解析解との差，つまり誤差，Ｆ０＝F_0，Ｘ(－１)＝Ｘ(ＬＺ＋１)＝X_0，ＰＩ＝π，Ｗ０＝ω_0，ＧＭ＝γ，ＮＭＡＸは和Σのnの打切最大値，ＮＴは計算繰り返し数，Ｎ＝n，ＷＤ＝ω'_{2n+1}，Ｂ１＝A_{2n+1}，Ｂ２＝B_{2n+1}，ＤＳＵＭは解析解の級数和の打切誤差であり，ここでは10^{-5}以下で解析解の誤差は十分小さくなったとしている．またＥＭＡＸはＮＴの各値における数値解と解析解との間の最大誤差である．なおメイン・プログラムと“ＰＤＥＨＴＤ”では主な変数名を同じにしてある．

計算結果をみると，この精度検定例では，ＮＴ＝400でも最大誤差ＥＭＡＸは10^{-2}以下であり，十分精度は高いと考えられる．さらに高精度にするには，Z方向の等分割数Lを大きくし，無次元時間刻みＤＴを小さくすればよい．なおベクトル化率は約87.9%，ＣＰＵ時間は約0.021秒，使用メモリーは約587キロバイトであった．

リスト１　メイン・プログラム

```
*#SXRUN MPPDEHTD:FREE2 CPTIME=10
C
C "PDEHTD"の精度検定例
C
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      PARAMETER(LX=30,LZ=98)
      REAL*8 F(0:LX,0:LZ)
      REAL*8 X(-1:LZ+1),V(0:LZ),XO(0:LZ),XN(-1:LZ),XG(0:LZ),XE(0:LZ)
      CALL CLOCK(CPU)
      PRINT *,'CPU=',CPU,' sec',' プログラム実行開始時のCPU時間'
C
C F0の値を与える
C
      F0=1.D-2
      DO 10 J=0,LX
        DO 10 K=0,LZ
          F(J,K)=F0
   10 CONTINUE
C
C XとVの初期条件を与える
C
      DO 20 K=0,LZ
        X(K)=5.D0
        V(K)=0.D0
   20 CONTINUE
      G=1.D-2
      DT=0.5D0
C
C 両端固定の境界条件を与える
C
      NB=1
      X(-1)=5.D0
      X(LZ+1)=5.D0
      PI=ACOS(-1.D0)
      PRINT *,'PI=',PI
      ZL=LZ+2
      W0=PI/ZL
      GM=0.5D0*G
      BL=-4.D0*F0*ZL**2/PI**3
      NMAX=100
      IT=100
```

```
      DO 100 NT=0,400,IT
        EGT=EXP(-GM*DT*NT)
        DO 200 J=0,LZ
          XG(J)=5.D0+F0*0.5D0*(J+1)*(LZ-J+1)
  200   CONTINUE
        DO 101 N=0,NMAX
          N21=2*N+1
          WD=N21*W0*SQRT(1.D0-GM**2/(N21**2*W0**2))
          B1=BL/N21**3
          B2=GM*B1/WD
          PN=N21*PI/ZL
          CWT=COS(WD*DT*NT)
          SWT=SIN(WD*DT*NT)
          DSUM=0.D0
          DO 102 J=0,LZ
            XJ=EGT*(B1*CWT+B2*SWT)*SIN(PN*(J+1))
            DSUM=MAX(ABS(XJ),DSUM)
C
C XGはGRANATOの解析解
C
            XG(J)=XG(J)+XJ
  102     CONTINUE
C
C 解析解は収束したか
C
          IF(DSUM.LT.1.D-5) GO TO 103
  101   CONTINUE
  103   PRINT *,' '
C
        PRINT *,'PDEHTDの数値解Xと解析解XGとの比較'
C
        PRINT *,'N=',N,' DSUM=',DSUM
        EMAX=0.D0
        IF(NT.NE.0)
     &    CALL PDEHTD(NB,F,LX,LZ,G,DT,IT,I,X,XO,XN,V,VMAX,XMIN,XMAX,IER)
        IF(IER.NE.0) STOP
        DO 104 J=0,LZ
C
C XEは誤差
C
          XE(J)=X(J)-XG(J)
          EMAX=MAX(ABS(XE(J)),EMAX)
  104   CONTINUE
        PRINT *,'NT=',NT,' EMAX=',EMAX,' EMAXは誤差の最大値'
        WRITE(6,30) IER,DT,VMAX,XMIN,XMAX,X(-1),LZ+1,X(LZ+1),LZ,
     &    (X(J),J=0,LZ)
        WRITE(6,31) LZ,XE
   31   FORMAT(1H ,'誤差'/1H ,'XE(J),J=0,',I3/(1H ,10F7.3))
  100 CONTINUE
   30 FORMAT(1H ,'IER=',I1,' DT=',E13.6/1H ,'VMAX=',E13.6,' XMIN=',
     &  E13.6,' XMAX=',E13.6/1H ,'数値解'/1H ,'X(-1)=',F7.3,' X(',
     &  I3,')=',F7.3/1H ,'X(J),J=0,',I3/(1H ,10F7.3))
      CALL CLOCK(CPU)
      PRINT *,' '
      PRINT *,'CPU=',CPU,' sec',' 実行終了CPU時間'
      STOP
      END
```

リスト2　計算結果

```
CPU=3.953850000000000D-04 sec  プログラム実行開始時のCPU時間
PI=3.141592653589793

PDEHTDの数値解Xと解析解XGとの比較
N=54 DSUM=9.961640838374890D-06
NT=0 EMAX=1.100228135966219D-04 EMAXは誤差の最大値
IER=0 DT= 0.500000E+00
VMAX= 0.000000E+00 XMIN= 0.000000E+00 XMAX= 0.000000E+00
数値解
X(-1)=  5.000 X( 99)=  5.000
```

```
X(J),J=0, 98
   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000
   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000
   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000
   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000
   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000
   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000
   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000
   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000
   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000
   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000   5.000
誤差
XE(J),J=0, 98
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000

ＰＤＥＨＴＤの数値解Ｘと解析解ＸＧとの比較
N=10 DSUM=9.250044615349394D-06
NT=100 EMAX=7.631603199444114D-03 ＥＭＡＸは誤差の最大値
IER=0 DT= 0.500000E+00
VMAX= 0.386460E+00 XMIN= 0.500000E+01 XMAX= 0.158388E+02
数値解
X(-1)=   5.000 X( 99)=   5.000
X(J),J=0, 98
   5.440   5.869   6.289   6.699   7.099   7.489   7.870   8.240   8.602   8.953
   9.295   9.628   9.951  10.264  10.568  10.863  11.149  11.425  11.693  11.951
  12.200  12.439  12.670  12.892  13.105  13.309  13.504  13.690  13.868  14.037
  14.197  14.349  14.492  14.626  14.752  14.870  14.979  15.079  15.172  15.257
  15.333  15.400  15.459  15.511  15.556  15.592  15.618  15.634  15.643  15.645
  15.643  15.634  15.618  15.592  15.556  15.511  15.459  15.400  15.333  15.257
  15.172  15.079  14.979  14.870  14.752  14.626  14.492  14.349  14.197  14.037
  13.868  13.690  13.504  13.309  13.105  12.892  12.670  12.439  12.200  11.951
  11.693  11.425  11.149  10.863  10.568  10.264   9.951   9.628   9.295   8.953
   8.602   8.240   7.870   7.489   7.099   6.699   6.289   5.869   5.440
誤差
XE(J),J=0, 98
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.001   0.000  -0.001   0.000   0.001   0.002   0.000  -0.003  -0.006  -0.008
  -0.006  -0.003   0.000   0.002   0.001   0.000  -0.001   0.000   0.001   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000
   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000   0.000

ＰＤＥＨＴＤの数値解Ｘと解析解ＸＧとの比較
N=46 DSUM=9.727784227011570D-06
NT=200 EMAX=4.065783084080010D-03 ＥＭＡＸは誤差の最大値
IER=0 DT= 0.500000E+00
VMAX= 0.386460E+00 XMIN= 0.543958E+01 XMAX= 0.250290E+02
数値解
X(-1)=   5.000 X( 99)=   5.000
X(J),J=0, 98
   5.789   6.567   7.330   8.078   8.808   9.521  10.217  10.897  11.562  12.211
  12.845  13.462  14.062  14.646  15.215  15.768  16.305  16.826  17.330  17.818
  18.291  18.748  19.188  19.612  20.021  20.413  20.789  21.150  21.494  21.823
  22.135  22.431  22.711  22.975  23.224  23.456  23.672  23.872  24.056  24.224
  24.376  24.513  24.633  24.737  24.825  24.897  24.953  24.993  25.017  25.025
  25.017  24.993  24.953  24.897  24.825  24.737  24.633  24.513  24.376  24.224
  24.056  23.872  23.672  23.456  23.224  22.975  22.711  22.431  22.135  21.823
  21.494  21.150  20.789  20.413  20.021  19.612  19.188  18.748  18.291  17.818
  17.330  16.826  16.305  15.768  15.215  14.646  14.062  13.462  12.845  12.211
  11.562  10.897  10.217   9.521   8.808   8.078   7.330   6.567   5.789
```

```
誤差
XE(J),J=0, 98
 -0.004 -0.004 -0.002  0.001  0.002  0.002  0.001 -0.001 -0.001 -0.001
  0.000  0.001  0.000 -0.001 -0.001  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000 -0.001 -0.001  0.000  0.001  0.000 -0.001
 -0.001 -0.001  0.001  0.002  0.002  0.001 -0.002 -0.004 -0.004

PDEHTDの数値解Xと解析解XGとの比較
N=10 DSUM=6.857163419406976D-06
NT=300 EMAX=9.678578487914535D-03 EMAXは誤差の最大値
IER=0 DT= 0.500000E+00
VMAX= 0.232290E+00 XMIN= 0.553363E+01 XMAX= 0.250327E+02
数値解
X(-1)=   5.000 X( 99)=   5.000
X(J),J=0, 98
  5.536  6.062  6.578  7.084  7.579  8.065  8.540  9.005  9.460  9.904
 10.339 10.762 11.176 11.579 11.972 12.353 12.725 13.086 13.436 13.776
 14.105 14.424 14.731 15.028 15.314 15.589 15.854 16.108 16.350 16.582
 16.802 17.013 17.212 17.399 17.575 17.740 17.894 18.038 18.170 18.291
 18.399 18.496 18.581 18.656 18.720 18.774 18.818 18.850 18.869 18.876
 18.869 18.850 18.818 18.774 18.720 18.656 18.581 18.496 18.399 18.291
 18.170 18.038 17.894 17.740 17.575 17.399 17.212 17.013 16.802 16.582
 16.350 16.108 15.854 15.589 15.314 15.028 14.731 14.424 14.105 13.776
 13.436 13.086 12.725 12.353 11.972 11.579 11.176 10.762 10.339  9.904
  9.460  9.005  8.540  8.065  7.579  7.084  6.578  6.062  5.536
誤差
XE(J),J=0, 98
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000 -0.001 -0.001  0.000  0.001  0.001
  0.000 -0.001 -0.002 -0.002 -0.001  0.001  0.004  0.007  0.009  0.010
  0.009  0.007  0.004  0.001 -0.001 -0.002 -0.002 -0.001  0.000  0.001
  0.001  0.000 -0.001 -0.001  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000

PDEHTDの数値解Xと解析解XGとの比較
N=39 DSUM=9.625726457509360D-06
NT=400 EMAX=4.238684619858768D-03 EMAXは誤差の最大値
IER=0 DT= 0.500000E+00
VMAX= 0.232562E+00 XMIN= 0.531812E+01 XMAX= 0.188757E+02
数値解
X(-1)=   5.000 X( 99)=   5.000
X(J),J=0, 98
  5.319  5.629  5.930  6.225  6.513  6.796  7.073  7.344  7.610  7.869
  8.122  8.367  8.606  8.838  9.064  9.285  9.499  9.707  9.908 10.102
 10.290 10.472 10.648 10.818 10.981 11.137 11.287 11.431 11.568 11.700
 11.824 11.942 12.054 12.160 12.259 12.351 12.437 12.518 12.591 12.658
 12.719 12.773 12.821 12.863 12.898 12.927 12.949 12.965 12.975 12.978
 12.975 12.965 12.949 12.927 12.898 12.863 12.821 12.773 12.719 12.658
 12.591 12.518 12.437 12.351 12.259 12.160 12.054 11.942 11.824 11.700
 11.568 11.431 11.287 11.137 10.981 10.818 10.648 10.472 10.290 10.102
  9.908  9.707  9.499  9.285  9.064  8.838  8.606  8.367  8.122  7.869
  7.610  7.344  7.073  6.796  6.513  6.225  5.930  5.629  5.319
誤差
XE(J),J=0, 98
  0.003  0.004  0.003  0.001  0.000 -0.002 -0.002 -0.001  0.000  0.001
  0.001  0.001  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.001  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.001  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.001  0.000  0.000  0.000  0.000
  0.000  0.001  0.000  0.000  0.000  0.000  0.000  0.001  0.001  0.001
  0.000 -0.001 -0.002 -0.002  0.000  0.001  0.003  0.004  0.003

CPU=2.094580000000000D-02 sec  実行終了CPU時間
```

リスト3 “ＰＤＥＨＴＤ”のソース・プログラム

```
      SUBROUTINE PDEHTD(NB,F,LX,LZ,G,DT,IT,I,X,XO,XN,V,VMAX,XMIN,XMAX,
     &  IER)
C
C 双曲型偏微分方程式の数値解法プログラム”ＰＤＥＨＴＤ”倍精度版
C
C 作成者  大阪大学工学部精密工学科    坂本正雄
C
C １９９３年１１月１５日
C
      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      REAL*8 F(0:LX,0:LZ)
      REAL*8 X(-1:LZ+1),V(0:LZ),XO(0:LZ),XN(-1:LZ)
      IF(G.LT.0.D0) GO TO 100
      IF(LX.LT.1) GO TO 200
      IF(LZ.LT.1) GO TO 300
      IF(DT.LE.0.D0.OR.DT.GE.1.D0) GO TO 400
      IF(IT.LT.1) GO TO 500
      XMIN=X(0)
      XMAX=X(0)
      DO 1 J=1,LZ
        XMIN=MIN(X(J),XMIN)
        XMAX=MAX(X(J),XMAX)
    1 CONTINUE
      IF(XMIN.LT.0.D0.OR.XMAX.GE.DBLE(LX)) GO TO 600
      X1=X(-1)
      IER=0
      I=0
      VMAX=ABS(V(0))
      VSCZ=2.D0*DT**2/(DT*G+2.D0)
      VSA=(DT*G-2.D0)/(DT*G+2.D0)
      VSB=2.D0/DT**2-2.D0
      IF(NB.EQ.0) THEN
C
C 両端自由の境界条件
C
        X(-1)=X(1)
        X(LZ+1)=X(LZ-1)
      END IF
      DO 10 J=0,LZ
        NI=X(J)
        XD2=X(J)-NI
        FV=(F(NI+1,J)-F(NI,J))*XD2+F(NI,J)
C
C 初速度ＶよりＸＯを求める
C
        XO(J)=0.5D0*DT**2*(X(J+1)+VSB*X(J)+X(J-1)+FV)
     &     -(0.5D0+0.25D0*DT*G)*V(J)
        XN(J)=V(J)+XO(J)
        XMIN=MIN(XN(J),XMIN)
        XMAX=MAX(XN(J),XMAX)
        VMAX=MAX(ABS(V(J)),VMAX)
   10 CONTINUE
      IF(XMIN.LT.0.D0.OR.XMAX.GE.DBLE(LX)) GO TO 700
      IF(VMAX.GT.2.D0) GO TO 800
      DO 20 J=0,LZ
        XO(J)=X(J)
        X(J)=XN(J)
   20 CONTINUE
      DO 30 I=1,IT
        IF(NB.EQ.0) THEN
          X(-1)=X(1)
          X(LZ+1)=X(LZ-1)
        ELSE
          X(-1)=X1
        END IF
        DO 40 J=0,LZ
          NI=X(J)
          XD2=X(J)-NI
          FV=(F(NI+1,J)-F(NI,J))*XD2+F(NI,J)
```

```
C
C XO, X, FよりXNを求める
C
          XN(J)=VSCZ*(X(J+1)+VSB*X(J)+X(J-1)+FV)+VSA*XO(J)
          XMIN=MIN(XN(J),XMIN)
          XMAX=MAX(XN(J),XMAX)
          V(J)=XN(J)-XO(J)
          VMAX=MAX(ABS(V(J)),VMAX)
          XO(J)=X(J)
          X(J-1)=XN(J-1)
   40   CONTINUE
        X(LZ)=XN(LZ)
        IF(XMIN.LT.0.D0.OR.XMAX.GE.DBLE(LX)) GO TO 710
        IF(VMAX.GT.2.D0) GO TO 810
   30 CONTINUE
      I=IT
   60 DO 50 J=0,LZ
C
C XとVを求める
C
        X(J)=XO(J)
        V(J)=0.5D0/DT*V(J)
   50 CONTINUE
      IF(NB.NE.0) X(-1)=X1
      RETURN
  100 IER=1
      RETURN
  200 IER=2
      RETURN
  300 IER=3
      RETURN
  400 IER=4
      RETURN
  500 IER=5
      RETURN
  600 IER=6
      RETURN
  700 IER=7
      RETURN
  710 IER=7
      GO TO 60
  800 IER=8
      VMAX=VMAX/(2.D0*DT)
      RETURN
  810 IER=8
      VMAX=VMAX/(2.D0*DT)
      GO TO 60
      END
```

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．

参考文献

1) M. Sakamoto : Philosophical Magazine A, Vol.63, No.6, (1991), 1241.

2) M. Sakamoto : Computer Aided Innovation of New Materials II, edited by M. Doyama, J. Kihara, M. Tanaka and R. Yamamoto, (Elsevier, Amsterdam, 1993) p.607.

3） 坂本正雄：大阪大学大型計算機センターニュース，Vol. 20，No. 3，1990-11，第79号，p. 53.

4） 坂本正雄：大阪大学大型計算機センターニュース，Vol. 21，No. 4，1992-3，第84号，p. 45.

5） 竹内　伸：転位のダイナミックスと塑性，鈴木　平編著(裳華房，東京，1985）p. 12.

6） ＳＸソフトウェア・ＦＯＲＴＲＡＮ77,77／ＳＸプログラミング手引書ＧＧＢ12-4，日本電気，1988年，p. 45.

7） A. V. Granato：Phys. Rev. B, Vol. 4，(1971)，2196.