第8章　熱方程式の差分法

8.1　目的

この章では熱方程式（拡散方程式）の差分法について取り扱う [1, 2]。

8.2　偏微分方程式

偏微分方程式は様々な現象の数学的記述に現れる。偏微分方程式とは、2つ以上の独立変数と未知関数およびその未知関数の偏微分を含むような方程式である。独立変数を x, t とし、未知関数を $u(x,t)$ とすると、偏微分方程式の一般系は

$$f\left(t, x, u, \frac{\partial u}{\partial t}, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial t \partial x}, \cdots\right) = 0 \tag{8.1}$$

となる。具体例としては、波動の時間発展を記述する波動方程式や、静電ポテンシャルの関数形を与えるラプラス方程式、そして本演習で扱う拡散方程式などがある。偏微分方程式を解くとは、決められた (x,t) に対して $u(x,t)$ を求めることである。解析的に解くのが困難な場合、数値計算を用いて近似的に解いてやることになる。

8.3　拡散方程式

拡散とは微粒子などが自発的に散らばり広がっていく現象である。1次元空間内での拡散を考える。微粒子の濃度を $C(x,t)$ とする。微粒子の流れを $J(x,t)$ とすると、粒子数の保存を表す連続の式は

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x} J(x,t) \tag{8.2}$$

と書ける。また、流れ $J(x,t)$ は濃度勾配に比例すると仮定すると

$$J(x,t) = -D \frac{\partial}{\partial x} C(x,t) \tag{8.3}$$

と表される。これらから拡散方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} C(x,t) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} C(x,t) \tag{8.4}$$

が得られる。

以下では $D = 1$ とした拡散方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x,t) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x,t) \tag{8.5}$$

を考える。

拡散方程式 (8.5) を解くためには初期条件

$$u(x,0) = u_0(x) \tag{8.6}$$

と境界 $x = 0, L$ における境界条件を考える必要がある。代表的な境界条件には

- Dirichlet 境界条件: 境界上での u の値が指定されている。

$$u(0,t) = u_{\mathrm{L}} \tag{8.7}$$
$$u(L,t) = u_{\mathrm{R}} \tag{8.8}$$

- Neumann 境界条件: 境界上での u の微分の値が指定されている。

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0,t) = J_{\mathrm{L}} \tag{8.9}$$
$$\frac{\partial u}{\partial x}(L,t) = J_{\mathrm{R}} \tag{8.10}$$

の2つがある。

8.4　数値解法

ここでは、時間と空間を離散化して拡散方程式 (8.5) を数値的に解くことを考える。時間と空間の刻み幅をそれぞれ Δt, Δx とする ($L = N\Delta x$)。離散化された時空間上での平均濃度を

$$u_j^n \equiv \frac{1}{\Delta x} \int_{(j-1)\Delta x}^{j\Delta x} u\,(y, n\Delta t)\, dy \tag{8.11}$$

と書く。u_j^n は区間 $[(j-1)\Delta x, j\Delta x]$ に対して割り当てられていることに注意が必要である。また、u_0^n, u_{N+1}^n は境界条件のために用いる。方程式 (8.2) を $[n\Delta t, (n+1)\Delta t]$ で積分すると

$$\begin{aligned} & u\left(x,(n+1)\Delta t\right) - u\left(x,n\Delta t\right) \\ = & -\int_{n\Delta t}^{(n+1)\Delta t} \frac{\partial}{\partial x} J(x,s) ds \end{aligned} \tag{8.12}$$

となる。(8.12) の右辺の積分を時刻 $n\Delta t$ の値で近似すると

$$\begin{aligned} & u\left(x,(n+1)\Delta t\right) - u\left(x,n\Delta t\right) \\ \simeq & -\Delta t \frac{\partial}{\partial x} J\left(x,n\Delta t\right) \end{aligned} \tag{8.13}$$

となる。この場合

$$\begin{aligned} & u_j^{n+1} - u_j^n \\ \simeq & -\frac{1}{\Delta x}\int_{(j-1)\Delta x}^{j\Delta x} \Delta t \frac{\partial}{\partial y} J\left(y,n\Delta t\right) dy \\ = & -\frac{\Delta t}{\Delta x}\left[J(j\Delta x,n\Delta t) - J((j-1)\Delta x,n\Delta t)\right] \end{aligned} \tag{8.14}$$

となる。ただし (8.3) より

$$J(j\Delta x,n\Delta t) = -\frac{\partial u}{\partial x}(j\Delta x,n\Delta t) \tag{8.15}$$

である。この量はさらに

$$J(j\Delta x,n\Delta t) \simeq -\frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} \tag{8.16}$$

と近似されるので、差分方程式

$$u_j^{n+1} - u_j^n \simeq \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\left(u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n\right) \tag{8.17}$$

を得る。

一方、(8.12) において積分をより精度の良い台形公式で近似すると

$$\begin{aligned} & u\left(x,(n+1)\Delta t\right) - u\left(x,n\Delta t\right) \\ \simeq & -\frac{\Delta t}{2}\left[\frac{\partial}{\partial x} J\left(x,(n+1)\Delta t\right) + \frac{\partial}{\partial x} J\left(x,n\Delta t\right)\right] \end{aligned} \tag{8.18}$$

となる。これを用いると

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} - u_j^n \simeq & \frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\left(u_{j-1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j+1}^{n+1}\right) \\ & + \frac{1}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\left(u_{j-1}^n - 2u_j^n + u_{j+1}^n\right) \end{aligned} \tag{8.19}$$

を得る。

(8.17) は $\left\{u_j^n\right\}_{j=1}^N$ から $\left\{u_j^{n+1}\right\}_{j=1}^N$ を直接求める漸化式になっている。このような数値解法を陽解法と呼ぶ。一方、(8.19) は右辺にも $\left\{u_j^{n+1}\right\}_{j=1}^N$ が現れており、$\left\{u_j^{n+1}\right\}_{j=1}^N$ の連立方程式として解いてやる必要がある。このような未知変数と既知変数の混在した差分方程式による数値解法を陰解法と呼ぶ。

8.5 オイラー陽解法

(8.17) のような最も単純な差分方程式による数値解法をオイラー陽解法と呼ぶ。以下では

$$c \equiv \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \tag{8.20}$$

と書くことにする。

初期条件は $\left\{u_j^0\right\}_{j=1}^N$ と表される。また、境界条件は

- Dirichlet 境界条件:

$$u_0^n = u_{\mathrm{L}} \tag{8.21}$$
$$u_{N+1}^n = u_{\mathrm{R}} \tag{8.22}$$

- Neumann 境界条件:

$$u_0^n = u_1^n - J_{\mathrm{L}}\Delta x \tag{8.23}$$
$$u_{N+1}^n = u_N^n + J_{\mathrm{R}}\Delta x \tag{8.24}$$

と表される。

8.5.1 安定性解析

数値計算を行う際、c の値がある値を越えると差分方程式が不安定になることが知られている。(8.17) は線形方程式であるので、波数 k の成分ごとに議論を行える。（任意の解はそれらの重ね合わせとして得られる。）今、(8.17) において波数 k の特解

$$u_j^n = \lambda_k^n e^{ikj} \tag{8.25}$$

を考える。増幅因子 λ_k の絶対値 $|\lambda_k|$ が任意の波数 k に対して 1 より小さければ差分方程式は安定である（即ち、任意の波数のモードは時間とともに減衰する）。この特解を (8.17) に代入すると

$$\begin{aligned} & \lambda_k^{n+1} e^{ikj} \\ = \; & \lambda_k^n e^{ikj} \\ & + c\left(\lambda_k^n e^{ik(j-1)} - 2\lambda_k^n e^{ikj} + \lambda_k^n e^{ik(j+1)}\right) \end{aligned} \tag{8.26}$$

を得る。これより

$$\lambda_k = 1 - 4c\sin^2\frac{k}{2} \tag{8.27}$$

となる。従って、$|\lambda_k| < 1$ が任意の k に対して満たされるためには

$$c \leq \frac{1}{2} \tag{8.28}$$

でなければならない。この条件は、Δx を小さくとるとき、Δt もそれに合わせて小さくしなければならないことを表す。

8.5.2 アルゴリズム

オイラー陽解法のアルゴリズムは Algorithm 2 のようにまとめられる。

8.6 クランク-ニコルソン法

(8.19) はクランク-ニコルソン法と呼ばれる。この方法はオイラー陽解法よりも精度が良くなって

アルゴリズム 2 オイラー陽解法

Input: 初期条件 $\left\{u_j^0\right\}_{j=1}^N$, 境界条件
Output: 時刻 $n\Delta t$ $(n = 1, \cdots, T)$ における $\left\{u_j^n\right\}_{j=1}^N$

u_0^0, u_{N+1}^0 を境界条件に従って与える
for $n = 0$ to $T-1$ **do**
  $\left\{u_j^n\right\}_{j=1}^N$ から $\left\{u_j^{n+1}\right\}_{j=1}^N$ を (8.17) に従って計算
  u_0^{n+1}, u_{N+1}^{n+1} を境界条件に従って与える
  $\left\{u_j^{n+1}\right\}_{j=1}^N$ を出力
end for

いる。(8.19) を書き直すと

$$\begin{aligned} & -\frac{c}{2}u_{j-1}^{n+1} + (1+c)u_j^{n+1} - \frac{c}{2}u_{j+1}^{n+1} \\ = \; & (1-c)u_j^n + \frac{c}{2}u_{j-1}^n + \frac{c}{2}u_{j+1}^n \end{aligned} \tag{8.29}$$

となる。ただし、境界条件は

- Dirichlet 境界条件: $u_0^n = u_{\mathrm{L}}$, $u_{N+1}^n = u_{\mathrm{R}}$ より

$$\begin{aligned} & (1+c)u_1^{n+1} - \frac{c}{2}u_2^{n+1} \\ = \; & (1-c)u_1^n + cu_{\mathrm{L}} + \frac{c}{2}u_2^n \end{aligned} \tag{8.30}$$

$$\begin{aligned} & -\frac{c}{2}u_{N-1}^{n+1} + (1+c)u_N^{n+1} \\ = \; & (1-c)u_N^n + cu_{\mathrm{R}} + \frac{c}{2}u_{N-1}^n \end{aligned} \tag{8.31}$$

- Neumann 境界条件: $u_0^n = u_1^n - J_{\mathrm{L}}\Delta x$, $u_{N+1}^n = u_N^n + J_{\mathrm{R}}\Delta x$ より

$$\begin{aligned} & \left(1+\frac{c}{2}\right)u_1^{n+1} - \frac{c}{2}u_2^{n+1} \\ = \; & \left(1-\frac{c}{2}\right)u_1^n - cJ_{\mathrm{L}}\Delta x + \frac{c}{2}u_2^n \end{aligned} \tag{8.32}$$

$$\begin{aligned} & -\frac{c}{2}u_{N-1}^{n+1} + \left(1+\frac{c}{2}\right)u_N^{n+1} \\ = \; & \left(1-\frac{c}{2}\right)u_N^n + cJ_{\mathrm{R}}\Delta x + \frac{c}{2}u_{N-1}^n \end{aligned} \tag{8.33}$$

である。これらの連立方程式を解く際にはLU分解という方法が用いられる。

8.6.1 安定性解析

8.5.1と同様に安定性解析を行う。(8.29)において波数kの特解

$$u_j^n = \lambda_k^n e^{ikj} \tag{8.34}$$

を代入すると、

$$\begin{aligned} & -\frac{c}{2}\lambda_k^{n+1}e^{ik(j-1)} + (1+c)\lambda_k^{n+1}e^{ikj} \\ & -\frac{c}{2}\lambda_k^{n+1}e^{ik(j+1)} \\ = & \ (1-c)\lambda_k^n e^{ikj} + \frac{c}{2}\lambda_k^n e^{ik(j-1)} + \frac{c}{2}\lambda_k^n e^{ik(j+1)} \end{aligned} \tag{8.35}$$

となる。これから

$$\lambda_k = \frac{1-2c\sin^2\frac{k}{2}}{1+2c\sin^2\frac{k}{2}} \tag{8.36}$$

と求まる。$c>0$より、全てのkに対して$|\lambda_k|<1$であることがわかり、クランク-ニコルソン法は全てのcについて安定であると言える。

8.6.2 LU分解

(8.29)と境界条件(8.30), (8.31)あるいは(8.32), (8.33)を合わせた連立方程式は$\boldsymbol{x} \equiv \left(u_1^{n+1},\cdots,u_N^{n+1}\right)^{\mathsf{T}}$と既知な量を成分とするベクトル$\boldsymbol{z}$及び、ある行列$A$を用いて

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z} \tag{8.37}$$

のように表される。AはDirichlet境界条件では

$$A = \begin{pmatrix} 1+c & -\frac{c}{2} & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{c}{2} & 1+c & -\frac{c}{2} & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -\frac{c}{2} & 1+c & -\frac{c}{2} \\ 0 & \cdots & 0 & -\frac{c}{2} & 1+c \end{pmatrix} \tag{8.38}$$

Neumann境界条件では

$$A = \begin{pmatrix} 1+\frac{c}{2} & -\frac{c}{2} & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{c}{2} & 1+c & -\frac{c}{2} & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -\frac{c}{2} & 1+c & -\frac{c}{2} \\ 0 & \cdots & 0 & -\frac{c}{2} & 1+\frac{c}{2} \end{pmatrix} \tag{8.39}$$

となる。また、$\boldsymbol{z}$はDirichlet境界条件では

$$\begin{aligned} z_1 &= (1-c)u_1^n + cu_{\mathrm{L}} + \frac{c}{2}u_2^n \\ z_j &= (1-c)u_j^n + \frac{c}{2}u_{j-1}^n + \frac{c}{2}u_{j+1}^n \\ & \qquad (2 \le j \le N-1) \\ z_N &= (1-c)u_N^n + cu_{\mathrm{R}} + \frac{c}{2}u_{N-1}^n \end{aligned} \tag{8.40}$$

Neumann境界条件では

$$\begin{aligned} z_1 &= \left(1-\frac{c}{2}\right)u_1^n - cJ_{\mathrm{L}}\Delta x + \frac{c}{2}u_2^n \\ z_j &= (1-c)u_j^n + \frac{c}{2}u_{j-1}^n + \frac{c}{2}u_{j+1}^n \\ & \qquad (2 \le j \le N-1) \\ z_N &= \left(1-\frac{c}{2}\right)u_N^n + cJ_{\mathrm{R}}\Delta x + \frac{c}{2}u_{N-1}^n \end{aligned} \tag{8.41}$$

である。(8.37)から$\boldsymbol{x}$を求めるのが目標である。

LU分解とはAを上三角行列Uと下三角行列Lの積$A=LU$に分解することである。今、Aを

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & \cdots & 0 \\ c_1 & a_2 & b_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & c_{N-2} & a_{N-1} & b_{N-1} \\ 0 & \cdots & 0 & c_{N-1} & a_N \end{pmatrix} \tag{8.42}$$

のように書く。

$$L = \begin{pmatrix} \alpha_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ c_1 & \alpha_2 & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & c_{N-2} & \alpha_{N-1} & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & c_{N-1} & \alpha_N \end{pmatrix} \tag{8.43}$$

$$U = \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \beta_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & 0 & 1 & \beta_{N-1} \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{8.44}$$

と置くと

$$LU = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_1\beta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ c_1 & \alpha_2 + c_1\beta_1 & \alpha_2\beta_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & c_{N-2} & \alpha_{N-1} + c_{N-2}\beta_{N-2} & \alpha_{N-1}\beta_{N-1} \\ 0 & \cdots & 0 & c_{N-1} & \alpha_N + c_{N-1}\beta_{N-1} \end{pmatrix} \tag{8.45}$$

となる。(8.42) と (8.45) を比較すると

$$
\begin{aligned}
&\alpha_1 = a_1\\
&\beta_1 = \frac{b_1}{\alpha_1}\\
&\alpha_2 = a_2 - c_1\beta_1\\
&\beta_2 = \frac{b_2}{\alpha_2}\\
&\vdots\\
&\alpha_{N-1} = a_{N-1} - c_{N-2}\beta_{N-2}\\
&\beta_{N-1} = \frac{b_{N-1}}{\alpha_{N-1}}\\
&\alpha_N = a_N - c_{N-1}\beta_{N-1}
\end{aligned}
\tag{8.46}
$$

のように昇順に L と U を求められる。

次に LU 分解を用いて連立方程式 (8.37) を解く方法を説明する。$LU\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}$ において $U\boldsymbol{x} \equiv \boldsymbol{y}$ とおくと

$$
L\boldsymbol{y} \quad = \quad \boldsymbol{z} \tag{8.47}
$$

となる。この式から $\boldsymbol{y}$ を求め、$U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ から $\boldsymbol{x}$ を求める。まず $L\boldsymbol{y} = \boldsymbol{z}$ は

$$
\begin{pmatrix}
\alpha_1 & 0 & 0 & \cdots & 0\\
c_1 & \alpha_2 & 0 & \ddots & \vdots\\
0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0\\
\vdots & \ddots & c_{N-2} & \alpha_{N-1} & 0\\
0 & \cdots & 0 & c_{N-1} & \alpha_N
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
y_1\\ y_2\\ \vdots\\ y_{N-1}\\ y_N
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
z_1\\ z_2\\ \vdots\\ z_{N-1}\\ z_N
\end{pmatrix}
\tag{8.48}
$$

より、$\boldsymbol{y}$ は昇順に

$$
\begin{aligned}
y_1 &= \frac{z_1}{\alpha_1}\\
y_2 &= \frac{z_2 - c_1 y_1}{\alpha_2}\\
&\vdots\\
y_{N-1} &= \frac{z_{N-1} - c_{N-2}y_{N-2}}{\alpha_{N-1}}\\
y_N &= \frac{z_N - c_{N-1}y_{N-1}}{\alpha_N}
\end{aligned}
\tag{8.49}
$$

のように求まる。次に $U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ は

$$
\begin{pmatrix}
1 & \beta_1 & 0 & \cdots & 0\\
0 & 1 & \beta_2 & \ddots & \vdots\\
0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0\\
\vdots & \ddots & 0 & 1 & \beta_{N-1}\\
0 & \cdots & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
x_1\\ x_2\\ \vdots\\ x_{N-1}\\ x_N
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
y_1\\ y_2\\ \vdots\\ y_{N-1}\\ y_N
\end{pmatrix}
\tag{8.50}
$$

より、$\boldsymbol{x}$ は降順に

$$
\begin{aligned}
x_N &= y_N\\
x_{N-1} &= y_{N-1} - \beta_{N-1}x_N\\
&\vdots\\
x_2 &= y_2 - \beta_2 x_3\\
x_1 &= y_1 - \beta_1 x_2
\end{aligned}
\tag{8.51}
$$

のように求まる。実際の計算では $\{\alpha_j\}$, $\{\beta_j\}$ は配列に保存して置くと良い。

8.6.3 アルゴリズム

以上をまとめて、クランク-ニコルソン法では Algorithm 3 のように計算を行う。

8.7 その他の陰解法

一般に (8.12) において $0 \le \theta \le 1$ を用いて

$$
\begin{aligned}
u_j^{n+1} - u_j^n \quad = \quad & \theta c\left(u_{j-1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j+1}^{n+1}\right)\\
& +(1-\theta)c\left(u_{j-1}^{n} - 2u_j^{n} + u_{j+1}^{n}\right)
\end{aligned}
\tag{8.52}
$$

という差分方程式を考えることができる。$\theta = 0$ がオイラー陽解法、$\theta = 1/2$ がクランク-ニコルソ

アルゴリズム 3 クランク-ニコルソン法

Input: 初期条件 $\left\{u_j^0\right\}_{j=1}^N$, 境界条件

Output: 時刻 $n\Delta t$ $(n = 1, \cdots, T)$ における $\left\{u_j^n\right\}_{j=1}^N$

LU 分解：境界条件に合わせて $\{\alpha_j\}$, $\{\beta_j\}$ を (8.46) に従って計算
for $n = 0$ to $T-1$ **do**
  $\left\{u_j^n\right\}_{j=1}^N$ から $\boldsymbol{z}$ を (8.40) または (8.41) に従って計算
  (8.49) に従って $\boldsymbol{y}$ を計算
  (8.51) に従って $\boldsymbol{x}$ を計算し、これを $\left\{u_j^{n+1}\right\}_{j=1}^N$ とする
  $\left\{u_j^{n+1}\right\}_{j=1}^N$ を出力
end for

ン法に対応する。また、$\theta = 1$ を完全陰的スキームと呼ぶ。(8.52) を書き直すと

$$\begin{aligned} & -\theta c u_{j-1}^{n+1} + (1+2\theta c) u_j^{n+1} - \theta c u_{j+1}^{n+1} \\ = \; & \{1 - 2(1-\theta)c\}\, u_j^n \\ & + (1-\theta) c u_{j-1}^n + (1-\theta) c u_{j+1}^n \end{aligned} \tag{8.53}$$

となる。ただし、境界条件は

- Dirichlet 境界条件: $u_0^n = u_\mathrm{L}$, $u_{N+1}^n = u_\mathrm{R}$ より

$$\begin{aligned} & (1+2\theta c) u_1^{n+1} - \theta c u_2^{n+1} \\ = \; & \{1 - 2(1-\theta)c\}\, u_1^n + c u_\mathrm{L} \\ & + (1-\theta) c u_2^n \end{aligned} \tag{8.54}$$

$$\begin{aligned} & -\theta c u_{N-1}^{n+1} + (1+2\theta c) u_N^{n+1} \\ = \; & \{1 - 2(1-\theta)c\}\, u_N^n + c u_\mathrm{R} \\ & + (1-\theta) c u_{N-1}^n \end{aligned} \tag{8.55}$$

- Neumann 境界条件: $u_0^n = u_1^n - J_\mathrm{L}\Delta x$, $u_{N+1}^n = u_N^n + J_\mathrm{R}\Delta x$ より

$$\begin{aligned} & (1+\theta c)\, u_1^{n+1} - \theta c u_2^{n+1} \\ = \; & \{1 - (1-\theta)c\}\, u_1^n - c J_\mathrm{L}\Delta x \\ & + (1-\theta) c u_2^n \end{aligned} \tag{8.56}$$

$$\begin{aligned} & -\theta c u_{N-1}^{n+1} + (1+\theta c)\, u_N^{n+1} \\ = \; & \{1 - (1-\theta)c\}\, u_N^n + c J_\mathrm{R}\Delta x \\ & + (1-\theta) c u_{N-1}^n \end{aligned} \tag{8.57}$$

である。

これらの連立方程式を解く際にも LU 分解が用いられる。今の場合は (8.37) の行列 A は Dirichlet 境界条件では

$$A = \begin{pmatrix} 1+2\theta c & -\theta c & 0 & \cdots & 0 \\ -\theta c & 1+2\theta c & -\theta c & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -\theta c & 1+2\theta c & -\theta c \\ 0 & \cdots & 0 & -\theta c & 1+2\theta c \end{pmatrix} \tag{8.58}$$

Neumann 境界条件では

$$A = \begin{pmatrix} 1+\theta c & -\theta c & 0 & \cdots & 0 \\ -\theta c & 1+2\theta c & -\theta c & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -\theta c & 1+2\theta c & -\theta c \\ 0 & \cdots & 0 & -\theta c & 1+\theta c \end{pmatrix} \tag{8.59}$$

となる。また、$\boldsymbol{z}$ は Dirichlet 境界条件では

$$\begin{aligned} z_1 &= \{1-2(1-\theta)c\}\, u_1^n + cu_{\mathrm{L}} \\ &\quad +(1-\theta)cu_2^n \\ z_j &= \{1-2(1-\theta)c\}\, u_j^n + (1-\theta)cu_{j-1}^n \\ &\quad +(1-\theta)cu_{j+1}^n \\ &\qquad (2 \le j \le N-1) \\ z_N &= \{1-2(1-\theta)c\}\, u_N^n + cu_{\mathrm{R}} \\ &\quad +(1-\theta)cu_{N-1}^n \end{aligned} \tag{8.60}$$

Neumann 境界条件では

$$\begin{aligned} z_1 &= \{1-(1-\theta)c\}\, u_1^n - cJ_{\mathrm{L}}\Delta x \\ &\quad +(1-\theta)cu_2^n \\ z_j &= \{1-2(1-\theta)c\}\, u_j^n + (1-\theta)cu_{j-1}^n \\ &\quad +(1-\theta)cu_{j+1}^n \\ &\qquad (2 \le j \le N-1) \\ z_N &= \{1-(1-\theta)c\}\, u_N^n + cJ_{\mathrm{R}}\Delta x \\ &\quad +(1-\theta)cu_{N-1}^n \end{aligned} \tag{8.61}$$

である。

8.7.1 安定性解析

8.5.1 と同様に安定性解析を行う。(8.53) において波数 k の特解

$$u_j^n = \lambda_k^n e^{ikj} \tag{8.62}$$

を代入すると、

$$\lambda_k = \frac{1-4(1-\theta)c\sin^2\frac{k}{2}}{1+4\theta c\sin^2\frac{k}{2}} \tag{8.63}$$

と求まる。これより、無条件安定（全ての $c > 0$, k に対して $|\lambda_k| < 1$ が成り立つ）であるための条件は $1/2 \le \theta \le 1$ であることがわかる。

8.8 演習問題

以下の 3 つの問題の解答をレポートとして提出せよ。

問題 1 (拡散方程式の数値解)

拡散方程式 (8.5) ($L = 10$) を初期条件

$$u_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}(x-5)^2} \tag{8.64}$$

の下で数値的に解く。以下の 4 つの場合を考えよ。

1. オイラー陽解法 (8.17) で境界条件は Dirichlet 境界条件 $u_{\mathrm{L}} = u_{\mathrm{R}} = 0$ を用いて数値的に解け。刻み幅は $\Delta t = 0.01$, $\Delta x = 0.5$ ($N = 20$) とせよ。

2. オイラー陽解法 (8.17) で境界条件は Neumann 境界条件 $J_{\mathrm{L}} = J_{\mathrm{R}} = 0$ を用いて数値的に解け。刻み幅は $\Delta t = 0.01$, $\Delta x = 0.5$ ($N = 20$) とせよ。

3. クランク-ニコルソン法 (8.19) で境界条件は Dirichlet 境界条件 $u_{\mathrm{L}} = u_{\mathrm{R}} = 0$ を用いて数値的に解け。刻み幅は $\Delta t = 0.01$, $\Delta x = 0.05$ ($N = 200$) とせよ。

4. クランク-ニコルソン法 (8.19) で境界条件は Neumann 境界条件 $J_{\mathrm{L}} = J_{\mathrm{R}} = 0$ を用いて数値的に解け。刻み幅は $\Delta t = 0.01$, $\Delta x = 0.05$ ($N = 200$) とせよ。

いずれの場合も $t = 1, 2, 3, 4, 5$ ($n = 100, 200, 300, 400, 500$) における $u(x,t)$ の値を出力すること。また、得られた $u(x,t)$ の値をそれぞれ一つの図（横軸 x, 縦軸 u）に図示せよ。

*（注意）本演習では (8.11) のように u_j^n に区間 $[(j-1)\Delta x, j\Delta x]$ を割り当てるという離散化を行なっている。従って、初期条件は

$$u_j^0 = \frac{1}{2}\left[u_0((j-1)\Delta x) + u_0(j\Delta x)\right] \tag{8.65}$$

であると考えるのが自然である。また、$\left\{u_j^n\right\}_{j=1}^{N}$ をプロットする場合は、各 j に対応する座標として $x = (j-1/2)\,\Delta x$ を採用するのが自然である。ただし、これらと異なる方法をとったとしても減点はしない。問題 2, 3 も同様である。

*（注意）本問題では方程式と初期条件の対称性より $x = 5$ について対称な結果が得られるはず

である。もし解答のグラフが $x=5$ について対称となっていない場合はプログラムが間違っていると考えてほしい。

＊（注意）グラフを生成する部分についてはソースコードに含める必要はない。問題 2, 3 も同様である。

問題 2 (Fisher 方程式)

拡散方程式に非線形項 $f(u)=u(1-u)$ を加えた偏微分方程式 (Fisher 方程式)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = u(1-u)+\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{8.66}$$

を考える。この方程式は遺伝学における優性遺伝子の空間伝播を表現するために提案された。初期条件

$$u_0(x) = \frac{1}{(1+e^{bx-5})^2} \tag{8.67}$$

境界条件 ($L=200$)

$$u(0,t) = 1 \tag{8.68}$$

$$u(L,t) = 0 \tag{8.69}$$

の下で $b=0.25,\ 0.5,\ 1.0$ の場合に Fisher 方程式をオイラー陽解法

$$\frac{u_j^{n+1}-u_j^n}{\Delta t} = f\left(u_j^n\right)+\frac{u_{j-1}^n-2u_j^n+u_{j+1}^n}{\Delta x^2} \tag{8.70}$$

を用いて数値的に解け。ただし、刻み幅は $\Delta x = 0.05$ $(N=4000)$, $\Delta t=0.001$ とし、$t=10,20,30,40$ $(n=10000,20000,30000,40000)$ の $u(x,t)$ の値を出力すること。また、得られた $u(x,t)$ の値を b の値ごとに一枚の図（横軸 x, 縦軸 u）に図示せよ。

また、得られた結果について考察せよ。（例えば b の値を様々に変えた時に振る舞いがどのように変わるかを見るなど。）

問題 3 (1 次元調和振動子の Schrödinger 方程式)

量子力学において、1 次元調和振動子のダイナミクスは、次の Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t}(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{k}{2}x^2\right)\psi(x,t) \tag{8.71}$$

に従う。$\psi(x,t)=\psi_{\mathrm{R}}(x,t)+i\psi_{\mathrm{I}}(x,t)$ $(\psi_{\mathrm{R}},\psi_{\mathrm{I}}\in\mathbb{R})$ のように波動関数を実部と虚部に分けると、それぞれの従う方程式は

$$\hbar\frac{\partial \psi_{\mathrm{R}}}{\partial t}(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{k}{2}x^2\right)\psi_{\mathrm{I}}(x,t) \tag{8.72}$$

$$-\hbar\frac{\partial \psi_{\mathrm{I}}}{\partial t}(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{k}{2}x^2\right)\psi_{\mathrm{R}}(x,t) \tag{8.73}$$

となり、2 つの拡散型方程式の組で表される。この際、粒子の位置の確率密度は $P(x,t)\equiv|\psi(x,t)|^2=\psi_{\mathrm{R}}(x,t)^2+\psi_{\mathrm{I}}(x,t)^2$ で与えられる。

今、パラメータを $\hbar=1$, $m=1$, $k=1$ とし、初期条件

$$\psi(x,0) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{\frac{1}{4}}}e^{-2(x-5)^2} \tag{8.74}$$

の下で Schrödinger 方程式を数値的に解くことを考える。ただし、空間領域は $[-L/2,L/2]$ とし、境界条件は周期境界条件

$$\psi\left(\frac{L}{2},t\right) = \psi\left(-\frac{L}{2},t\right) \tag{8.75}$$

とする。

数値的に解く際には Visscher のスキーム [3] と呼ばれる、実部と虚部の時間発展を半ステップだけずらして解く陽解法を用いる。即ち、離散化された波動関数の実部、虚部をそれぞれ $\left\{R_j^n\right\}$, $\left\{I_j^n\right\}$ と書くと、$1\le j\le N$ $(L=N\Delta x)$ に対し

て時間発展は

$$\begin{aligned} & R_j^{n+1} \\ = \; & R_j^n \\ & +\Delta t\left(-\frac{1}{2}\frac{I_{j-1}^n - 2I_j^n + I_{j+1}^n}{\Delta x^2} + \frac{1}{2}x_j^2 I_j^n\right) \end{aligned} \tag{8.76}$$

$$\begin{aligned} & I_j^{n+1} \\ = \; & I_j^n \\ & -\Delta t\left(-\frac{1}{2}\frac{R_{j-1}^{n+1} - 2R_j^{n+1} + R_{j+1}^{n+1}}{\Delta x^2}\right. \\ & \left. +\frac{1}{2}x_j^2 R_j^{n+1}\right) \end{aligned} \tag{8.77}$$

と記述される。ただし、

$$x_j \equiv \left(j - \frac{1}{2}\right)\Delta x - \frac{L}{2} \tag{8.78}$$

であり、境界条件は全ての n で

$$R_0^n = R_N^n \tag{8.79}$$

$$R_{N+1}^n = R_1^n \tag{8.80}$$

$$I_0^n = I_N^n \tag{8.81}$$

$$I_{N+1}^n = I_1^n \tag{8.82}$$

と表される。また、初期条件は $1 \le j \le N$ で

$$\begin{aligned} R_j^0 &= \frac{1}{2}\left[\psi\left((j-1)\Delta x - \frac{L}{2}, 0\right)\right. \\ &\quad \left. +\psi\left(j\Delta x - \frac{L}{2}, 0\right)\right] \end{aligned} \tag{8.83}$$

$$\begin{aligned} I_j^0 &= -\Delta t\left(-\frac{1}{2}\frac{R_{j-1}^0 - 2R_j^0 + R_{j+1}^0}{\Delta x^2}\right. \\ &\quad \left. +\frac{1}{2}x_j^2 R_j^0\right) \end{aligned} \tag{8.84}$$

と表される。$N = 400$, $\Delta x = 0.05$ ($L = 20$), $\Delta t = 0.001$ の下でこの系を数値的に解き、$t = 1,2,3,4,5,6,7,8$ ($n = 1000, 2000, 3000, 4000, 5000, 6000, 7000, 8000$) における確率密度 $\left(R_j^n\right)^2 + I_j^n I_j^{n-1}$ ($1 \le j \le N$) の値を出力せよ。また、得られた確率密度 $\left(R_j^n\right)^2 + I_j^n I_j^{n-1}$ の値を一つの図（横軸は x_j）に図示せよ。

参考文献

[1] 山本哲朗, 数値解析入門 (サイエンスライブラリ 現代数学への入門 14), サイエンス社 (1976)

[2] 高橋大輔, 数値計算 (理工系の基礎数学 8), 岩波書店 (1996)

[3] P. B. Visscher, Computers in Physics **5**, 596 (1991)

[上田仁彦]