6 偏微分方程式

われわれは時々刻々変化する 3次元空間の世界に住んでいる。このため,解析したい現象を微分方程式による数学モデルで表現した場合に,独立変数が 2つ以上の偏微分方程式になる場合が多い。例えば,ある場所での気温の変化を調べるには,地図上の位置 (x,y),高さ h,時刻 t の 4 つの変数がかかわってくる。この章では,基本的な 3 つの偏微分方程式を題材に,それらを解くための数値計算法について説明する。

6-1 偏微分方程式

偏微分方程式と数値計算 独立変数を 2 個以上含むような関数の偏導関数 についての方程式を偏微分方程式(partial differential equation)という。例えば u を x, y, z の関数としたとき、

$$\frac{\partial^3 u}{\partial x^2 \partial y} + \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial u}{\partial z} - \sin u = 0 \tag{6.1}$$

は偏微分方程式である.ところが、偏微分方程式全般に対する解法を統一的に 論じることは、理論であれ数値計算であれ困難を極める.そこで、ある特定の 型の偏微分方程式に対象を限定して、個別に議論を行なうというのが現状であ る.逆に、それだけ偏微分方程式の奥が深く、得られた成果がバリエーション に富んでいるといえる.

本書でも、偏微分方程式全般の数値計算については触れない、対象とする偏 微分方程式は次の3つだけに限定することにする.

$$\begin{cases} (1) & \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ (2) & \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ (3) & \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \end{cases}$$
 (6.2)

これらの方程式の共通の特徴を以下に述べる.

- ・従属変数が u ひとつだけであり、u について線形の方程式である.
- ・独立変数が $x \ge t$ あるいは $x \ge y$ の2つだけである.
- ・偏導関数は2階までである.
- ・偏導関数の係数がすべて定数である.

この章では、これらの方程式を適当な初期条件あるいは境界条件の下で解き、解 u を求めるための数値計算法を学ぶ。

上の3種の方程式だけでは、あまりに話題を限定しすぎていると思われるかもしれない。しかしながら、偏微分方程式が関わる問題で、その基本的な部分に(6.2)式の3つの方程式のいずれかが関係するものは非常に多い。したがって、これらの方程式をよく知ることはたいへん重要である。一方、(6.2)式の方程式はどれも線形の偏微分方程式なので理論的にもかなりくわしく調べられており、多くの場合に微分解を明示的に得ることができる。その上でなお数値計算法を学ぶ意図は次のとおりである。

(6.2)式の方程式を基本とし、より現実の問題に近づいた偏微分方程式がたくさん存在する。このような偏微分方程式の中には理論で解析することが困難なものも多い。そこで数値計算を利用して解くことに意味が出てくる。そして、そのための数値計算法が、(6.2)式の各方程式を解くための数値計算法を基本としている場合が多い。したがって、(6.2)式の3つの方程式を解くための数値計算法を学ぶだけでも大きな意味がある。

偏微分方程式の具体例

ここで、(6.2)式の3つの方程式が関わっている現象の具体例を以下に示す。

(1) 棒の温度分布の時間変化

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) \qquad (0 < x < 1, \ t > 0) \tag{6.3a}$$

$$u(x,0) = 2x(1-x)$$
 $(0 \le x \le 1)$ (6.3b)

$$u(0,t) = u(1,t) = 0 (t \ge 0) (6.3c)$$

上の問題は以下のような現象を表わしている。まず,図 6-1 のような細長い均質な棒を考える。棒の各点の位置を表わす座標をxとし,左端をx=0,右端をx=1とする。時刻tでの棒上の位置xにおける温度をu(x,t)とする。初期時刻t=0で,(6.3b)式のような温度分布を与える(図 6-1 のグラフ)。また,(6.3c)式の条件が示すように,以降の時刻で棒の両端をつねに一定温度0にする。さらに,両端では熱が自由に出入りできるとする。これらの条件の下で,棒上の温度分布のt>0 での時間変化を記述した偏微分方程式が,(6.3a)式である。(6.3a)式は拡散方程式(diffusion equation)もしくは熱伝導方程式(heat conduction equation)とよばれる。また,(6.3b)式は初期条件,(6.3c)式は境界条件とよばれる。u(x,t)(0<x<1, t>0)を求めることがこの問題の目的である。

徴分解は,

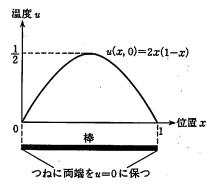


図 6-1 棒と初期温度分布

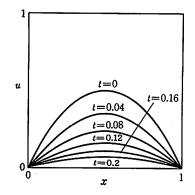


図 6-2 棒の温度分布の時間変化

$$u(x,t) = \frac{16}{\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^3} e^{-(2n-1)^2 \pi^2 t} \sin(2n-1)\pi x$$
 (6.4)

というように級数で表わすことができる.この微分解を図 6-2 に示す.一定温度に保たれた捧の両端から熱が逃げていき,棒全体の温度が両端の温度と等しくなろうとするさまが観察できる.

(2) 弦の振動

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) \qquad (0 < x < 1, \ t > 0) \tag{6.5a}$$

$$u(x,0) = 2x(1-x)$$
 $(0 \le x \le 1)$ $(6.5b)$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x,0) = 0 \qquad (0 \le x \le 1) \tag{6.5c}$$

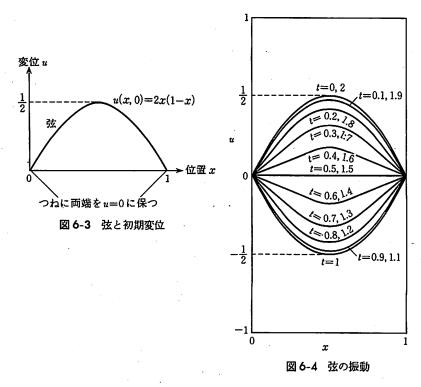
$$u(0,t) = u(1,t) = 0$$
 $(t \ge 0)$ (6.5d)

上の問題は以下のような現象を表わしている。まず、x を空間座標とする。図 6-3 のように $0 \le x \le 1$ の範囲に弦をおく。時刻 t での位置 x における弦の変位を u(x,t) とする。(6.5d)式が示すように、弦の両端は x=0,1 でつねに u=0 に固定されている。初期時刻 t=0 で(6.5b)式のように弦の形を定める。また、この時刻では弦が静止しているとするので、(6.5c)式の条件も加わる。これらの条件の下で、その後の時刻の弦の振動を記述した偏微分方程式が (6.5a)式である。(6.5a)式は波動方程式(wave equation)とよばれる。また (6.5b)、(6.5c)式は初期条件、(6.5d)式は境界条件である。0 < x < 1、t > 0 の範囲の u(x,t) を求めることがこの問題の目的である。

微分解は,

$$u(x,t) = \frac{8}{\pi^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^3} \left\{ \sin((2n-1)\pi(x+t)) + \sin((2n-1)\pi(x-t)) \right\}$$
(6.6)

となる. この解を図 6-4 に示す. ゴムひもの振動で見受けられるような, 弦の 周期的な上下運動が観察できる.



(3) 板の定常温度分布

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 & (0 < x < 1, \ 0 < y < 1) \quad (6.7a) \\ u(x,0) = \sin \pi x, \quad u(x,1) = 0 & (0 \le x \le 1) \\ u(0,y) = u(1,y) = 0 & (0 \le y \le 1) \end{cases}$$
(6.7b)

上の問題は以下のような現象を表わしている。まず,正方形の均質な板を考える。板の1辺の長さを1とし,図 6-5 のように空間座標x,yを定める。そして,ある時刻で板の周囲の温度分布を固定する。すると,十分長い時間が経過した後に,板の内部の温度分布は周囲の温度分布から決まるある一定の分布に収束する。ただし,板の周囲では熱が自由に出入りできるとする。各点(x,y)での温度をu(x,y)とすると,長時間経過した後の温度分布は(6.7a)式に

従う。(6.7a)式はラプラス方程式(Laplace's equation) とよばれる。(6.7b)式は板の周囲の固定された温度分布を表わしており、境界条件となる。この問題では、内部の温度分布 u(x,y) (0 < x < 1, 0 < y < 1) を求めることが目的である。

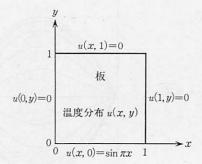


図 6-5 板の定常温度分布

微分解は,

$$u(x,y) = \frac{\sin \pi x \sinh \pi (1-y)}{\sinh \pi}$$
 (6.8)

となる。図 6-6 に、u(x,y) の 3 次元グラフと等高線図を示す。y=0 の辺での高い温度が、他の 3 辺に近づくにつれてなだらかに低くなっていく様子が観察できる。付加条件が境界条件だけであるので、この問題は境界値問題である。

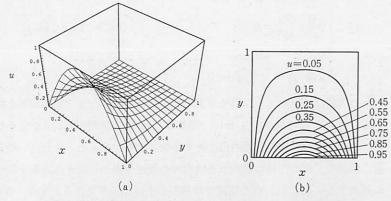


図 6-6 板の温度分布 u(x,y). (a) 3 次元グラフ, (b) 等高線図

これに対し拡散方程式や波動方程式の問題は初期値・境界値問題である.

以上の(6.3a), (6.5a), (6.7a)式の偏微分方程式は,それぞれ放物型,双曲型,楕円型という型で分類された方程式の典型例となっている.このように型で区別されている理由は,それぞれの偏微分方程式の解が,同じ型のものでは共通の性質をもっており,違う型のものでは性質が大きく異なるからである.以降の節では上の3つの方程式を解くための差分法を順に紹介していく.

6-2 拡散方程式

拡散方程式の差分法 この節では(6.3)式の問題を解く差分法を考える. ただし、初期条件をすこし一般化した次式の問題を考える.

$$\left[\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right] \qquad (0 < x < 1, \ t > 0) \tag{6.9a}$$

$$u(x,0) = \phi(x)$$
 $(0 \le x \le 1)$ $(6.9b)$

$$u(0,t) = u(1,t) = 0$$
 $(t \ge 0)$ (6.9c)

ここで、(6.9b)式と(6.9c)式が整合するように、関数 $\phi(x)$ は $\phi(0) = \phi(1) = 0$ を満たすとする.

まず,第 5 章の常微分方程式と同様に,独立変数に関する格子点を作ることから始める。(6.9)式の独立変数は空間x,時間tの2つであるので,それぞれに離散的な座標点を設け,図 6-7 に示すような2次元の格子点の集まりを考える。 Δx , Δt はそれぞれx, t に関する格子点の間隔であり, $N\Delta x=1$ とする。また, $x_j=j\Delta x$, $t_n=n\Delta t$ とする。さらに,微分解 $u(x_j,t_n)$ に対応する差分解を U_i^n と表わす。

次に $_{n}(x_{j},t_{n})$ の格子点において $_{n}(6.9a)$ 式を差分方程式で近似する。まず、左辺の時間微分の項は前進差分商を用いて、

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) \doteq \frac{1}{\Delta t} \{ u(x_j, t_n + \Delta t) - u(x_j, t_n) \}$$
 (6.10)

と近似できる. t で偏微分するというのは、x を固定して t で微分することである. 上式の右辺は、まさにその差分版になっている. (6.9a)式右辺の空間

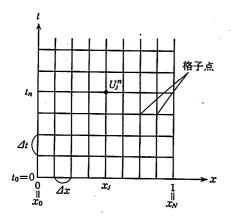


図 6-7 2次元の格子点

微分の項は、(5.33c)式の形の2階差分商を用いて、

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) = \frac{1}{(\Delta x)^2} \{ u(x_j + \Delta x, t_n) - 2u(x_j, t_n) + u(x_j - \Delta x, t_n) \} \quad (6.11)$$

と近似する。この形の差分商を採用した理由は、x 軸の正負の向きを逆転しても(6.9a)式が変わらないという対称性を保存したいからである。さらにu をU で置き換えると、差分方程式

$$\frac{1}{\Delta t}(U_j^{n+1} - U_j^n) = \frac{1}{(\Delta x)^2}(U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n)$$

$$(j=1, 2, \dots, N-1, n=0, 1, \dots)$$
 (6.12)

が得られる. この式を書き換えて,

$$U_j^{n+1} = \alpha U_{j+1}^n + (1-2\alpha) U_j^n + \alpha U_{j-1}^n$$
 (6.13)

を得る. ただし $\alpha = \Delta t/(\Delta x)^2$ である. この式は, 時刻 t_n での U から次の時刻 t_{n+1} での U の値がすぐに計算できる形をしている. この簡便さゆえに時間微分の項を前進差分商で近似した.

さらに, 初期条件(6.9b)式は

$$U_j^0 = \phi(x_j) \qquad (j=0,1,\dots,N) \tag{6.14}$$

と置き換わり、境界条件(6.9c)式は

$$U_0^n = U_N^n = 0$$
 $(n = 0, 1, \dots)$ (6.15)

と置き換わる.

拡散方程式のアルゴリズム この数値計算の目標は U_i^n $(j=1,2,\cdots,N-1,n=1,2,\cdots)$ を求めることである。 $(6.13)\sim(6.15)$ 式を眺めると、そのための数値計算のアルゴリズムが見えてくる。解を求める時刻の上限値を T とし、適当な自然数 M を定めて $\Delta t = T/M$ とする、アルゴリズムは

- (1) N, M, T を設定する $\Delta x \coloneqq 1/N, \quad \Delta t \coloneqq T/M, \quad \alpha \coloneqq \Delta t/(\Delta x)^2$

「
$$n := 0, 1, \cdots, M-1$$
 の順に
$$\begin{bmatrix} j := 1, 2, \cdots, N-1 \text{ の順に} \\ U_j^{n+1} := \alpha U_{j+1}^n + (1-2\alpha) U_j^n + \alpha U_{j-1}^n \\ を繰り返す \\ U_0^{n+1} := 0, \quad U_N^{n+1} := 0 \\ を繰り返す$$

となる.このアルゴリズムでは変数 U_j^n $(j=0,1,\cdots,N,\ n=0,1,\cdots,M)$ をすべて用意している.ところが, U_j^{n+1} $(j=1,2,\cdots,N-1)$ の計算には前の時刻の U_j^n $(j=0,1,\cdots,N)$ だけが必要であり,それ以前の時刻のものは必要ない.そこで,必要なメモリ量を少なくするためにすこし改良したアルゴリズムを以下に示す.

(1) N, M, T を設定する $\Delta x \coloneqq 1/N, \quad \Delta t \coloneqq T/M. \quad \alpha \coloneqq \Delta t/(\Delta x)^2$

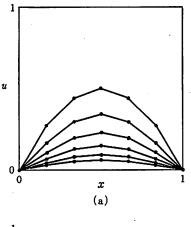
$$(2)$$
 $\begin{bmatrix} j := 0,1,\cdots,N \ arphi \ U_j := \phi(j \Delta x) \end{bmatrix}$ を繰り返す $new_-U_0 := 0, \quad new_-U_N := 0$

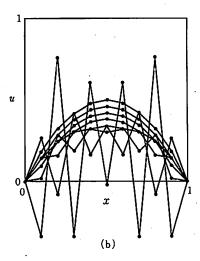
「
$$n := 0, 1, \cdots, M-1$$
 の順に
$$\begin{bmatrix} j := 1, 2, \cdots, N-1 & \text{の順に} \\ new_-U_j := \alpha U_{j+1} + (1-2\alpha)U_j + \alpha U_{j-1} \\ を繰り返す \\ j := 0, 1, \cdots, N & \text{の順に} \\ U_j := new_-U_j \\ を繰り返す \\ を繰り返す$$

ここで変数 U_j , new_-U_j はそれぞれ U_j^n , U_j^{n+1} の役割を果たす. (6.13)式のように、前の時刻 t_n での値から次の時刻 t_{n+1} での値を直ちに計算できる形の差分方程式を陽公式(explicit scheme)とよぶ。

拡散方程式の計算例 では、具体的に数値計算を行なった結果を示す。ここでは(6.3)式の問題を採用して、 $\phi(x)=2x(1-x)$ とする。図 6-8(a)は、N=6(すなわち dx=1/6)、dt=1/100 とした場合の結果である。図 6-2 の微分解と比較すると、差分解のふるまいが似ていることがわかる。しかし、これではあまりに空間の格子点が粗い。そこで、dx を小さくして N=10 (すなわち dx=1/10)、dt=1/100 とした結果を図 6-8(b)に示す。この差分解は微分解と全く異なる挙動を示している。図には示していないが、もうすこし時刻を進めていくと計算が途中で発散してしまう。そこでこんどは dt を小さくして、時間方向の分解能をあげることにする。N=10 (すなわち dx=1/10)、dt=1/500 とした結果が図 6-8(c)である。こんどはどうやら微分解を正しく反映していそうである。

差分方程式の整合性 以上の結果は、 $\Delta x \in \Delta t$ との間に何らかの関係を設けないと、思いどおりの結果が得られないことを示唆している。その理由を知るために、差分方程式の導出の段階から点検していく。まず、差分方程式 (6.12)式が元の微分方程式(6.9a)式と矛盾していないことをチェックする。そのための準備としてティラーの公式を用いて、





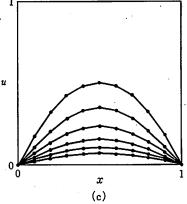


図 6-8 (a) N=6 ($\Delta x=1/6$), Δt = 1/100 の場合の差分解. n=0, 4, 8, ..., 20 でのグラフ. (b) N=10 ($\Delta x=1/10$), $\Delta t=1/100$ の場合の差分解. n=0,1,2,...,7 でのグラフ. (c) N=10 ($\Delta x=1/10$), $\Delta t=1/500$ の場合の差分解. n=0,20,40,...,100 でのグラフ

$$u(x_{j}, t_{n} + \Delta t) = u(x_{j}, t_{n}) + \Delta t \frac{\partial u}{\partial t}(x_{j}, t_{n}) + \frac{(\Delta t)^{2}}{2} \frac{\partial^{2} u}{\partial t^{2}}(x_{j}, t_{n}) + O((\Delta t)^{3})$$

$$u(x_{j} \pm \Delta x, t_{n}) = u(x_{j}, t_{n}) \pm \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x_{j}, t_{n}) + \frac{(\Delta x)^{2}}{2} \frac{\partial^{2} u}{\partial x^{2}}(x_{j}, t_{n})$$

$$\pm \frac{(\Delta x)^{3}}{6} \frac{\partial^{3} u}{\partial x^{3}}(x_{j}, t_{n}) + \frac{(\Delta x)^{4}}{24} \frac{\partial^{4} u}{\partial x^{4}}(x_{j}, t_{n})$$

$$\pm \frac{(\Delta x)^{5}}{120} \frac{\partial^{5} u}{\partial x^{5}}(x_{j}, t_{n}) + O((\Delta x)^{6})$$

$$(6.16)$$

と展開する. この展開は、(1.15)式の1変数関数のテイラーの公式を多変数に

拡張したものである.

次に、差分方程式(6.12)式の $U_j^n,U_j^{n+1},U_{j+1}^n$ をそれぞれ $u(x_j,t_n),u(x_j,t_n+\Delta t),u(x_j\pm\Delta x,t_n)$ に置き換え、上の展開式を用いて左辺と右辺の差を見積もると、

$$\frac{1}{\Delta t} \{ u(x_j, t_n + \Delta t) - u(x_j, t_n) \}
- \frac{1}{(\Delta x)^2} \{ u(x_j + \Delta x, t_n) - 2u(x_j, t_n) + u(x_j - \Delta x, t_n) \}
= \frac{\partial u}{\partial t} (x_j, t_n) - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} (x_j, t_n) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} (x_j, t_n) - \frac{(\Delta x)^2}{12} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} (x_j, t_n)
+ O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^4)
= \begin{cases}
O(\Delta t) + O((\Delta x)^2) & (\Delta t/(\Delta x)^2 \pm 1/6 \text{ Ø} \frac{1}{36}) \\
O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^4) & (\Delta t/(\Delta x)^2 = 1/6 \text{ Ø} \frac{1}{36})
\end{cases} (6.17)$$

となる. ただし、u が(6.9a)式を満足していることを用いた. 上の式の値は Δt と $(\Delta x)^2$ を同時に 0 に近づけると 0 に収束する. もちろん、これだけでは U_i^n が微分解 $u(x_i,t_n)$ に収束するかどうかの保証はない. しかし、 Δt , $(\Delta x)^2$ を同時に小さくするように格子点を細かくしていけば、(6.12)式が微分解 u を代入しても近似的に成り立つ. この意味で(6.12)式は(6.9a)式に矛盾していない.

フーリエ分解の方法と安定性の条件 では、差分方程式が矛盾していないにもかかわらず、図 6-8(b)のような振動発散の現象が生じた理由は何であろうか、このことを説明するために、フーリエ(Fourier)分解の方法を差分方程式に適用する。まず、(6.12)式すなわち(6.13)式の特解として、

$$U_j^n = f(n)\exp(ikj\Delta x) \tag{6.18}$$

の形のものを求める。ここでiは虚数単位,kは実数である。上式を(6.13)式に代入して、

$$f(n+1) = \{\alpha \exp(ik\Delta x) + 1 - 2\alpha + \alpha \exp(-ik\Delta x)\} f(n)$$
$$= \left(1 - 4\alpha \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}\right) f(n)$$
(6.19)

を得る. ゆえにf(0)=1とすると

$$f(n) = \left(1 - 4\alpha \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}\right)^n \tag{6.20}$$

となる. つまり,

$$U_j^n = \left(1 - 4\alpha \sin^2 \frac{k \Delta x}{2}\right)^n \exp(ikj\Delta x) \tag{6.21}$$

は(6.13)式の特解である。(6.13)式は U について線形の差分方程式であるので、一般解はこの特解の重ね合わせで表わされる。なお、初期の時刻にいくつかの k に対する特解の重ね合わせだけで差分解が構成されていても、計算途中で発生する誤差により、任意の k に対する特解の成分が差分解に入り込みうることを注意しておく。

もし、あるんに対して

$$\left|1 - 4\alpha \sin^2 \frac{k \Delta x}{2}\right| > 1 \tag{6.22}$$

であると、時間が進むにつれてその k に対する特解の絶対値が指数的に増大していく、すなわち計算が発散する。ゆえに発散しないための条件は、任意の k に対して

$$\left| 1 - 4\alpha \sin^2 \frac{k \Delta x}{2} \right| \le 1 \tag{6.23}$$

となることである。これより $\alpha \sin^2(k \Delta x/2) \le 1/2$ となる。さらに、任意の k に対してこの条件が成立するためには、 $\sin^2(k \Delta x/2) \le 1$ より

$$\alpha = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \le \frac{1}{2} \tag{6.24}$$

とならなければならない. Δx と Δt がこの条件を満たしていないと計算が発散するのである.

一方,微分方程式(6.9a)式の特解は,k を任意定数として $\exp(-k^2t + ikx)$ である.時間がたつにつれ,この関数の絶対値は指数的に減少していく.ということは,任意のx で時間がたつにつれ解が減衰していき,おとなしくなることを意味している.この傾向は図 6-2 でも示されている.以上のことから,条件(6.24)式が満たされないかぎり,差分解は微分解と似ても似つかぬものに

なる. 図 6-8(a), (c)の Δx , Δt は (6.24)式を満たし,(b)の場合は満たしていない.そのことが計算結果に反映したのである.たとえば,N=50 ($\Delta x=1/50$), $\Delta t=1/10000$ とすれば,(6.24)式の条件は満足される.その結果を図 6-9 に示すが,やはり計算はうまくいっている.計算が発散しないための Δx , Δt に対する (6.24)式のような条件は安定性の条件(stability condition)とよばれる.

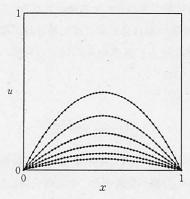


図 6-9 N=50 ($\Delta x=1/50$), $\Delta t=1/10000$ の場合の差分解. $n=0,400,800,\cdots,2000$ でのグラフ

厳密な安定性の条件を導くためには数学的にもっと詳細な議論を必要とする. フーリエ分解の方法についての上の説明は、その骨組みを大まかに示したものであり、詳しくは例えば巻末に挙げた参考書を見ていただきたい。また、フーリエ分解の方法は場合によっては使えないこともある。しかしながら、安定性の条件を導出する方法として、フーリエ分解の方法はより一般的な他の方法よりも簡単である.

差分法のチェックポイント 拡散方程式の差分法について, うまく計算できるための条件を上で調べた. そのチェックポイントは,

- (1) 差分方程式が元の微分方程式に矛盾していないこと.
- (2) さらに、 Δx , Δt が安定性の条件を満たしていること

の 2 点であった。 もちろん, Δx , $\Delta t \rightarrow 0$ とした極限で差分解が微分解に本当に 収束するかどうかは,いままでの説明だけでは証明されたことにならない. し

かし、上の2つのチェックポイントは差分法がうまく働くための目安としてたいへん有効である。

6-3 陰公式

陽公式の問題点 前節で陽公式による拡散方程式の解法を説明した。この解法で計算が安定に進むためには、 $\Delta x \in \Delta t$ が(6.24)式の安定性の条件を満たさなければならない。ところが、この条件は計算量の点で問題がある。例えば、時刻0から1まで計算を行なうとする。時間方向の格子点の総数は $1/\Delta t$ である。計算の手間を減らすためには Δt をなるべく大きく取りたい。そこで(6.24)式から

$$\Delta t \doteq \frac{1}{2} (\Delta x)^2 \tag{6.25}$$

とするのがよいであろう. 一方, 空間に関する分解能も高めたい. そこで Δx を 1/10 倍小さくしたとする. すると Δt は上の関係より 1/100 倍小さくせざるを得ない. ということは, 時間方向の格子点数が 100 倍に増えることを意味する. これでは, Δx を小さくしていったときに, あまりに格子点数が多くなりすぎて計算の効率が悪い.

陰公式 この問題は陽公式の安定性の条件から生じている。これから説明 する陰公式を使用すると、この問題を解決することができる。まず、(6.12)式 の右辺の n をすべて n+1 で置き換える。

$$\frac{1}{\Delta t}(U_j^{n+1} - U_j^n) = \frac{1}{(\Delta x)^2}(U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1})$$

$$(j=1,2,\cdots,N-1, n=0,1,\cdots)$$
(6.26)

この式を整理すると、 $\alpha = \Delta t/(\Delta x)^2$ として

$$-\alpha U_{j-1}^{n+1} + (1+2\alpha)U_j^{n+1} - \alpha U_{j+1}^{n+1} = U_j^n$$
 (6.27)

となる. U_0^n と U_N^n の値は(6.15)式から任意のn に対して0 である. そこで (6.27)式をあるn で各j について並べると, $U_1^{n+1} \sim U_{N-1}^{n+1}$ に関する連立1 次方

の任意の 1 点の情報が,次の瞬間には全領域に伝わるという重要な性質を拡散 方程式はもっている.この性質から,陰公式が陽公式より優れていることを以下のように裏付けすることができる.まず,陽公式では U_j^n の情報は次の時刻で U_j^{n+1} , U_j^{n+1} , U_j^{n+1} にしか伝わらない.なぜならば(6.13)式で U_j^{n+1} と関係するのは, U_{j-1}^n , U_j^n , U_{j+1}^n だけであるからである.これに対し,陰公式では U_j^n の情報は連立 1 次方程式を通じて $j=1,2,\cdots,N-1$ の U_j^{n+1} すべてに影響を及ぼす.すなわち,ある点の情報が次の時刻で空間のすみずみまでゆきわたる.以上のことから,陰公式の方が元の微分方程式の性質を自然に反映していることがわかる.このことが安定性の条件の差となって現われたのである.

6-4 波動方程式

波動方程式の差分法 この節では、(6.5)式の波動方程式の初期値・境界値問題を解くための差分法について説明する. ただし, もうすこし初期条件を一般化して,

$$\left(\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right) \qquad (0 < x < 1, \ t > 0) \quad (6.32a)$$

$$u(x,0) = \phi(x), \quad \frac{\partial u}{\partial t}(x,0) = \phi(x) \qquad (0 \le x \le 1)$$
 (6.32b)

$$u(0,t) = u(1,t) = 0 (t \ge 0) (6.32c)$$

とする. ただし、 ϕ , ϕ は任意の関数であり、 ϕ (0)= ϕ (1)=0とする.

格子点は、拡散方程式の場合と同じ図 6-7 のものを用いる。前と同様に N、 Δt を定め、 $\Delta x=1/N$ とする。また、 $x_j=j\Delta x$ 、 $t_n=n\Delta t$ とし、微分解 $u(x_j,t_n)$ に対応する差分解を U_j^n とする。

次に、(6.32a)式を次式の差分方程式で近似する.

$$\frac{1}{(\Delta t)^2} (U_j^{n+1} - 2U_j^n + U_j^{n-1}) = \frac{1}{(\Delta x)^2} (U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n)$$

$$(j=1,2,\cdots,N-1, n=1,2,\cdots)$$
(6.33)

この式を書き換えると.

$$U_j^{n+1} = 2U_j^n - U_j^{n-1} + \alpha (U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n)$$
(6.34)

となる. ただし、 $\alpha=(\Delta t/\Delta x)^2$ とする. この式は、時刻 t_{n-1},t_n での U から次 の時刻 t_{n+1} での U が計算できるという形をしている. したがって、初期条件 として、 U_i^0,U_i^1 を決めたい.

初期条件の導出 まず、 U_i^0 は(6.32b)式の左の式から、

$$U_j^0 = \phi(x_j)$$
 $(j=0,1,\dots,N)$ (6.35)

とすればよい. U_i^l を決める方法はいくつか考えられるが、ここでは以下のようにする. まず、テイラーの公式を用いると、

$$u(x, \Delta t) = u(x, 0) + \Delta t \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, 0) + O((\Delta t)^3) \quad (6.36)$$

となる. (6.32b)式の右の式から $\frac{\partial u}{\partial t}(x,0) = \phi(x)$ である. さらに、t=0 でも (6.32a)式が成り立つとすると、

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x,0) = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,0) \tag{6.37}$$

となる. この式の右辺は2階差分商を用いて

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x,0) \doteq \frac{1}{(\Delta x)^2} \{ u(x + \Delta x, 0) - 2u(x,0) + u(x - \Delta x, 0) \}$$
 (6.38)

と近似できる. よって(6.36)式は

$$U_{j}^{1} = U_{j}^{0} + \Delta t \psi(x_{j}) + \frac{\alpha}{2} (U_{j+1}^{0} - 2U_{j}^{0} + U_{j-1}^{0}) \qquad (j=1,2,\cdots,N-1) \tag{6.39}$$

という差分方程式で近似できる. さらに、境界条件は(6.32c)式から、

$$U_0^n = U_N^n = 0$$
 $(n=0,1,\cdots)$ (6.40)

となる.

波動方程式のアルゴリズム 以上から、数値計算のアルゴリズムは以下のようになる。ただし、解を求める時刻の上限値を T とし、適当な自然数 M を定めて $\Delta t = T/M$ とする。

(1) N, M, T を設定する

$$\Delta x := 1/N$$
, $\Delta t := T/M$, $\alpha := (\Delta t/\Delta x)^2$

程式が得られる. (6.27)式を行列の形で表現すると.

$$\begin{pmatrix} 1+2\alpha & -\alpha & & & & & & \\ -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha & & & & & \\ & -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha \\ & & & & & 1+2\alpha & -\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ U_3^{n+1} \\ \vdots \\ U_{N-2}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_1^n \\ U_2^n \\ U_2^n \\ U_3^n \\ \vdots \\ U_{N-2}^n \\ U_{N-1}^n \end{pmatrix}$$
(6. 28)

となる. $U_1^n \sim U_{N-1}^n$ が与えられたなら、この連立 1 次方程式を解いて $U_1^{n+1} \sim U_{N-1}^{n+1}$ を求めることができる.

(6.28)式の左辺の行列は3重対角とよばれる特別な形をしており、(6.28)式は効率よく解くことができる.このため、時刻を t_n から t_{n+1} に進める際に要する計算の手間は、陽公式の場合よりも多くなるが、数倍程度ですむ. (6.28)式の解法は7-3節でくわしく述べることとし、ここではこの連立1次方程式を解くことができるとだけしておこう.以上のように、(6.27)式は次の時刻でのUの値を求めるために連立1次方程式を解かなければならず、陰公式(implicit scheme)とよばれる.

数値計算のアルゴリズムは、前節で示した陽公式のアルゴリズムで、ステップ(3)の

$$\begin{bmatrix} j\coloneqq 1,2,\cdots,N-1 \, の順に \ new_U_j\coloneqq lpha U_{j+1}+(1-2lpha) U_j+lpha U_{j-1} \ &$$
を繰り返す

の部分を、上の連立1次方程式を解く手続きに置き換えるだけである.

陰公式の整合性と安定性の条件 (6.26)式に微分解 u を代入し、左辺と右辺の差を見積もると、

$$\frac{1}{\Delta t} \{ u(x_j, t_n + \Delta t) - u(x_j, t_n) \}
- \frac{1}{(\Delta x)^2} \{ u(x_j + \Delta x, t_n + \Delta t) - 2u(x_j, t_n + \Delta t) + u(x_j - \Delta x, t_n + \Delta t) \}
= O(\Delta t) + O((\Delta x)^2)$$
(6.29)

となり、元の微分方程式(6.9a)式と矛盾していない。また、上式の右辺から、

差分方程式が微分方程式を近似する度合いも $\Delta t/(\Delta x)^2 + 1/6$ ならば陽公式と同程度であることがわかる.

次に安定性の条件を調べる. (6.27)式の特解は

$$U_j^n = \left(1 + 4\alpha \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}\right)^{-n} \exp(ikj\Delta x) \tag{6.30}$$

となる.

$$1 + 4\alpha \sin^2 \frac{k\Delta x}{2} \ge 1 \tag{6.31}$$

であるので、 $\left(1+4\alpha\sin^2\frac{k \Delta x}{2}\right)^{-n}$ はつねに 1 以下である。すなわち、 α がどのような値であろうとも、任意の k に対する特解の絶対値は n を大きくしても増大しない。ということは、この陰公式は無条件安定(unconditionally stable)、すなわち、どのような Δx , Δt の値に対しても計算が安定に進む。

陰公式の計算例 図 6-10 に $\Delta x=1/50$, $\Delta t=1/100$ とした場合の計算結果を示す。陽公式を用いると,この Δx の場合 Δt はせいせい 1/5000 にしかとれない。すなわち,陽公式では同じ時刻に到達するために時間方向の格子点数が50 倍必要なのである。陰公式の 1 時刻あたりの計算の手間は陽公式の数倍程度であるので,陰公式の方が効率がよい。

拡散方程式の性質と安定性の条件 詳細は省略するが、ある時刻での空間

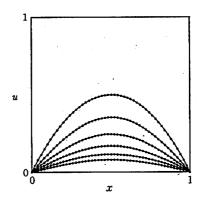


図 6-10 N=50 ($\Delta x=1/50$), $\Delta t=1/100$ の場合の陰公式の差分解. $n=0,4,8,\cdots,20$ でのグラフ