神戸市立工業高等専門学校
電気工学科／電子工学科
専門科目「数値解析」

2017.11.17

偏微分方程式1

山浦 剛（tyamaura@riken.jp）

講義資料ページ

- http://climate.aics.riken.jp/members/yamaura/numerical_analysis.html

偏微分方程式とは

- 独立変数が2つ以上の関数を考え、その偏導関数についての方程式を**偏微分方程式**という。自然界の分野で、流体、重力場、電磁場などの“場”を記述するためによく用いられる。

- 線形偏微分方程式
  - 放物型偏微分方程式： **拡散方程式**
  - 双曲型偏微分方程式： **波動方程式（移流方程式）**
  - 楕円型偏微分方程式： ポアソン方程式、ラプラス方程式、ヘルムホルツ方程式

- 非線形偏微分方程式
  - 非線形波動を記述する方程式、コルトヴェーグ･ドフリース（KdV）方程式： $\frac{\partial u}{\partial t} + \alpha u \frac{\partial u}{\partial x} + \beta \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0$
  - 流体の運動を記述する方程式、ナビエ･ストークス方程式： $\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v} \cdot \boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{v} = -\frac{1}{\rho} \boldsymbol{\nabla} \mathrm{p} + \frac{\boldsymbol{\mu}}{\boldsymbol{\rho}} \Delta \boldsymbol{v} + \boldsymbol{F}$
  - 他に重力場を記述するアインシュタイン方程式、分散波の運動を記述する非線形シュレディンガー方程式など。

補足：2階線形偏微分方程式の分類

- ２つの独立変数x, yに対する従属変数uの2階偏微分方程式を考える
  - $A\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f\left(u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, x, y\right)$
- 特性曲線$\frac{du_y}{du_x} = \frac{-B \pm \sqrt{B^2 - AC}}{A}$を考え、この曲線の性質で偏微分方程式を3つに分類
  - $B^2 - AC = 0$：放物型偏微分方程式（BとA, Cいずれかがゼロ） ⇒ 拡散方程式
  - $B^2 - AC > 0$：双曲型偏微分方程式（Bがゼロ、AとCが異符号） ⇒ 波動方程式
  - $B^2 - AC < 0$：楕円型偏微分方程式（Bがゼロ、AとCが同符号） ⇒ ポアソン方程式

拡散方程式

- 1次元拡散方程式の一般形は、次のようになる。
  - $\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$
- このκは**拡散係数**と呼ばれ、物理量uが散らばっていく速さを規定する。
- 例題: 棒の温度分布の時間変化(pp. 115)
  - $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},\ \ u(x,0) = 2x(1-x),\ \ u(0,t) = u(1,t) = 0$
  - 2番目の式は初期条件(初期時刻の温度分布)、3番目の式は境界条件(端の温度を規定)
  - この式の微分解は、$u(x,t) = \frac{16}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(2n-1)^3}e^{-(2n-1)^2\pi^2 t}\sin(2n-1)\pi x$

拡散方程式の差分法1

- 拡散方程式を差分化し、数値的に解いていく。初期条件を一般化して、
  - $\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$, $u(x,0) = \phi(x)$, $u(0,t) = u(1,t) = 0$
- まず常微分方程式の場合と同様、独立変数(x, t)に対する格子点を考える。
  - $x_j = j\Delta x$, $t_n = n\Delta t$, $N\Delta x = 1$
- 差分方程式で微分方程式を近似。時間微分項は前進差分商を用いて、
  - $\frac{\partial}{\partial t} u(x_j, t_n) \approx \frac{1}{\Delta t}\{u(x_j, t_n + \Delta t) - u(x_j, t_n)\}$
- 空間微分項は2階中心差分商(pp. 89)を用いて、
  - $\frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x_j, t_n) \approx \frac{1}{\Delta x^2}\{u(x_j + \Delta x, t_n) - 2u(x_j, t_n) + u(x_j - \Delta x, t_n)\}$

拡散方程式の差分法2

- 従属変数uを格子点の位置での変数U_j^nで代表させると、差分化された拡散方程式は、
  - $\frac{1}{\Delta t}\left\{U_j^{n+1} - U_j^n\right\} = \frac{\kappa}{\Delta x^2}\left\{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n\right\} \quad (j = 1,2,\ldots,N-1, n = 0,1,\ldots)$
- この式を漸化式として変形させると、
  - $U_j^{n+1} = U_j^n + \alpha\left\{U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n\right\} = \alpha U_{j+1}^n + (1-2\alpha)U_j^n + \alpha U_{j-1}^n$
  - ただし、$\alpha = \kappa\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$
- 直前の時刻t_nから次の時刻t_{n+1}を計算できる差分方程式を、**陽公式**という。
- このときの初期条件と境界条件は、
  - $U_j^0 = \phi(x_j) \qquad (j = 0,1,\ldots,N)$
  - $U_0^n = U_N^n = 0 \qquad (n = 0,1,\ldots)$

差分方程式の整合性

- 拡散方程式の差分解の計算例：
  - $\phi(x) = 2x(1-x),\ \Delta x = \frac{1}{6},\ \Delta t = \frac{1}{100},\ \kappa = 1$ ⇒ 図6-8a ⇒ 正しく解けてそう。
  - $\phi(x) = 2x(1-x),\ \Delta x = \frac{1}{10},\ \Delta t = \frac{1}{100},\ \kappa = 1$ ⇒ 図6-8b ⇒ 解が激しく振動する。不適。
  - $\phi(x) = 2x(1-x),\ \Delta x = \frac{1}{10},\ \Delta t = \frac{1}{500},\ \kappa = 1$ ⇒ 図6-8c ⇒ 正しく解けてそう。
- ΔtとΔxの関係から、微分解に正しく近づくかが決まっている模様。どのような関係か？
- 差分方程式を、テイラー展開を用いて整理すると、
  - $\frac{1}{\Delta t}\{u(x_j, t_n + \Delta t) - u(x_j, t_n)\} - \frac{1}{\Delta x^2}\{u(x_j + \Delta x, t_n) - 2u(x_j, t_n) + u(x_j - \Delta x, t_n)\}$
  - $= \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\Delta x^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} + O(\Delta t^2) + O(\Delta x^4)$
  - 誤差は$\frac{\Delta t}{\Delta x^2} = \frac{1}{6}$のとき、$O(\Delta t^2) + O(\Delta x^4)$，それ以外で$O(\Delta t) + O(\Delta x^2)$
  - これは、ΔtとΔx^2を同時に0に近づけると、0に収束していくことを示す ⇒ 差分方程式に矛盾はない

差分方程式の安定性解析1

- 差分方程式が矛盾していないのに、なぜ解が振動発散したりするのか？
  - フーリエ分解の方法で、差分方程式の安定性を調べる
- 差分方程式 $U_j^{n+1} = \alpha U_{j+1}^n + (1-2\alpha)U_j^n + \alpha U_{j-1}^n$の特解として、次の形を考える。
  - $U_j^n = f(n)e^{ikj\Delta x}$,　 k: 実数，i: 虚数単位
- これを差分方程式に代入すると、
  - $f(n+1)e^{ikj\Delta x} = \alpha f(n)e^{ik(j+1)\Delta x} + (1-2\alpha)f(n)e^{ikj\Delta x} + \alpha f(n)e^{ik(j-1)\Delta x}$
  - $f(n+1) = f(n)\left\{\alpha e^{ik\Delta x} + (1-2\alpha) + \alpha e^{-ik\Delta x}\right\}$　（オイラーの公式）
  - $f(n+1) = f(n)(1-2\alpha+2\alpha\cos k\Delta x)$　（半角公式）
  - $f(n+1) = f(n)\left(1-4\alpha\sin^2\frac{k\Delta x}{2}\right)$

差分方程式の安定性解析2

- ここで$f(0)=1$とすると、
  - $f(n)=\left(1-4\alpha\sin^2\frac{k\Delta x}{2}\right)^n$
- ゆえに、$U_j^n=\left(1-4\alpha\sin^2\frac{k\Delta x}{2}\right)^n e^{ikj\Delta x}$ は、この差分方程式の特解である。
  - 差分方程式は線形なので、一般解は特解の重ね合わせで表現される。
- この解の安定性を考える。あるkに対し、$\left|1-4\alpha\sin^2\frac{k\Delta x}{2}\right|>1$であるとすると、解の絶対値は時間経過とともに指数関数的に増大していく。 ⇒ 解の発散
- 解が発散しないための条件は、任意のkに対して、
  - $\left|1-4\alpha\sin^2\frac{k\Delta x}{2}\right|\leq 1 \;\Rightarrow\; \alpha\sin^2\frac{k\Delta x}{2}\leq\frac{1}{2} \;\Rightarrow\; \alpha=\kappa\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\leq\frac{1}{2}$
- この条件を、**安定性の条件**という。

差分法のチェックポイント

- 差分法を数値的に安定して解くためには、次の2つをチェックする必要がある。
  - (1) 差分方程式が元の微分方程式と矛盾していないこと
  - (2) $\Delta x, \Delta t$が安定性の条件を満たしていること
- これは差分解が微分解に収束することを保証するわけではないが、目安になる。
  - 拡散係数κも追加的に安定性の条件に入ることに注意
- 大きな問題点：　Δxを小さくとるたびに、Δtを二乗で小さくしていかなければならない。
  - $\Delta t \leq \frac{\kappa}{2} \Delta x^2$ であればよいが、Δxを$\frac{1}{10}$倍にすると、Δtを$\frac{1}{100}$倍にしなければならない
  - 時間方向の格子点を相当細かく区切らないといけない　⇒　計算負荷の増大

陰公式

- 差分法が安定して解けないのは、陽公式による安定性の条件から来ている。この問題に対応するため、次のような差分方程式を考える。
  - $\frac{1}{\Delta t}\left\{U_j^{n+1}-U_j^n\right\}=\frac{\kappa}{\Delta x^2}\left\{U_{j+1}^{n+1}-2U_j^{n+1}+U_{j-1}^{n+1}\right\} \quad (j=1,2,\dots,N-1, n=0,1,\dots)$
  - 右辺の差分商で時刻n以外の従属変数を用いて解く差分方程式を、**陰公式**という。
- この差分方程式を整理すると、
  - $-\alpha U_{j+1}^{n+1}+(1+2\alpha)U_j^{n+1}-\alpha U_{j-1}^{n+1}=U_j^n$ 　ただし、$\alpha=\kappa\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$
- これをjに対する連立方程式に直し、行列で書くと、
  - $$\begin{bmatrix} 1+2\alpha & -\alpha & & & & \mathbf{0} \\ -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha & & & \\ & -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha \\ \mathbf{0} & & & & -\alpha & 1+2\alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ U_3^{n+1} \\ \vdots \\ U_{N-2}^{n+1} \\ U_{N-1}^{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} U_1^n \\ U_2^n \\ U_3^n \\ \vdots \\ U_{N-2}^n \\ U_{N-1}^n \end{bmatrix}$$

陰公式の安定性解析

- 陰公式における差分方程式の矛盾性を調べる
  - $\frac{1}{\Delta t}\left\{u\left(x_j, t_n+\Delta t\right)-u\left(x_j, t_n\right)\right\}-\frac{1}{\Delta x^2}\left\{u\left(x_j+\Delta x, t_n+\Delta t\right)-2u\left(x_j, t_n+\Delta t\right)+u\left(x_j-\Delta x, t_n+\Delta t\right)\right\}=O(\Delta t)+O(\Delta x^2)$
  - これは、ΔtとΔx^2を同時に0に近づけると、0に収束していくことを示す　⇒　差分方程式に矛盾はない
- 同様に安定性解析も行う。この差分方程式の特解は、
  - $U_j^n=\left(1+4\alpha\sin^2\frac{k\Delta x}{2}\right)^{-n}e^{ikj\Delta x}$　　ただし、$\alpha=\kappa\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$
- このとき、$1+4\alpha\sin^2\frac{k\Delta x}{2}\geq 1$なので、任意の$k$に対して$\alpha$がどのような値でも発散しない。
  - この陰公式はどのような$\Delta t, \Delta x$でも計算が安定に進む　⇒　**無条件安定**
- 陰公式は連立1次方程式を通じてU_j^nの情報が全てのU_j^{n+1}に影響する。
  - 陽公式の場合、U_j^{n+1}に影響するのは$U_{j+1}^n, U_j^n, U_{j-1}^n$の3点のみ。
  - 拡散方程式は、ある時刻の任意の1点の情報が瞬時に全領域に伝わる性質を持ち、陰公式と相性が良い。

練習問題

- 次の拡散方程式の初期値・境界値問題を差分法で解く。
  - $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (0 < x < 1), \quad u(x,0) = \begin{cases} x & \left(0 \le x \le \frac{1}{2}\right) \\ 1 - x & \left(\frac{1}{2} < x \le 1\right) \end{cases}, \quad u(0,t) = u(1,t) = 0 \quad (t \ge 0)$
  - 陽公式を用いて、$(\Delta x, \Delta t) = \left(\frac{1}{10}, \frac{1}{1000}\right)$の時、$t = \frac{1}{500}$での$x = \frac{1}{2}$における値を答えよ。
- 次の差分方程式が無条件安定であることを示せ。
  - $\frac{1}{\Delta t}\left\{U_j^{n+1} - U_j^n\right\} = \frac{\kappa}{\Delta x^2}\left\{U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}\right\} \quad (j = 1,2,\ldots,N-1, n = 0,1,\ldots)$

回答例1

- 次の拡散方程式の初期値・境界値問題を差分法で解く。
  - $\frac{\partial u}{\partial t}=\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\quad(0<x<1),\quad u(x,0)=\begin{cases}x & \left(0\le x\le\frac{1}{2}\right)\\ 1-x & \left(\frac{1}{2}<x\le 1\right)\end{cases},\quad u(0,t)=u(1,t)=0\quad(t\ge 0)$
  - 陽公式を用いて、$(\Delta x,\Delta t)=\left(\frac{1}{10},\frac{1}{1000}\right)$の時、$t=\frac{1}{500}$での$x=\frac{1}{2}$における値を答えよ。
- 差分方程式を立てる。
  - $U_j^{n+1}=\alpha U_{j+1}^n+(1-2\alpha)U_j^n+\alpha U_{j-1}^n$　ただし、$\alpha=\frac{\Delta t}{\Delta x^2}=0.1$
- 求める答えをU_j^nとおくと、$(j,n)=(5,2)$
  - $U_5^2=0.1U_6^1+0.8U_5^1+0.1U_4^1,\quad U_6^1=0.1U_7^0+0.8U_6^0+0.1U_5^0,\quad U_5^1=0.1U_6^0+0.8U_5^0+0.1U_4^0,\quad U_4^1=0.1U_5^0+0.8U_4^0+0.1U_3^0$
- 初期条件より、$U_3^0=U_7^0=0.3,\ U_4^0=U_6^0=0.4,\ U_5^0=0.5$ なので、$U_4^1=0.4,\ U_5^1=0.48,\ U_6^1=0.4$　よって、$U_5^2=0.464$

回答例2

- 次の差分方程式が無条件安定であることを示せ。
  - $\frac{1}{\Delta t}\{U_j^{n+1} - U_j^n\} = \frac{\kappa}{\Delta x^2}\{U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1}\} \quad (j = 1,2,\dots,N-1, n = 0,1,\dots)$
- 差分方程式の特解を求め、それが発散しないような条件を考える。特解として、
  - $U_j^n = f(n)e^{ikj\Delta x}, \quad k$: 実数，$i$: 虚数単位
- これを差分方程式に代入すると、$\alpha = \kappa\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$とおいて、
  - $-\alpha f(n+1)e^{ik(j+1)\Delta x} + (1+2\alpha)f(n+1)e^{ikj\Delta x} - \alpha f(n+1)e^{ik(j-1)\Delta x} = f(n)e^{ikj\Delta x}$
  - $f(n) = f(n+1)\{-\alpha e^{ik\Delta x} + (1+2\alpha) - \alpha e^{-ik\Delta x}\} = f(n+1)(1+2\alpha-2\alpha\cos k\Delta x) = f(n+1)\left(1+4\alpha\sin^2\frac{k\Delta x}{2}\right)$
- $f(0) = 1$とすると、$f(n) = \left(1+4\alpha\sin^2\frac{k\Delta x}{2}\right)^{-n}$なので、$U_j^n = \left(1+4\alpha\sin^2\frac{k\Delta x}{2}\right)^{-n} e^{ikj\Delta x}$はこの差分方程式の特解となる。
- 任意のk, αについて$1+4\alpha\sin^2\frac{k\Delta x}{2} \geq 1$なので、時間経過で$U_j^n$が発散することはない。ゆえにこの差分方程式は無条件安定。