

計算物理学および演習

偏微分方程式の数値解法 3

畝山多加志

1 初期値問題

これまで、偏微分方程式の境界値問題を考えてきたが、十分な時間が経過したあとの場だけでなく、時間経過とともにどのように場が変化するかに興味を持たれることも多い。例えば、拡散方程式で記述される場は十分時間が経てば Poisson 方程式を満たすようになるわけだが、どれくらい時間が経てば Poisson 方程式の解に近づくのかは初期状態によって異なるであろう。直接的に時間発展を考えるには与えられた初期境界・境界条件のもとで偏微分方程式を解くという初期値問題になるのだが、時間と空間の取扱いが違うために境界値問題の場合とは異なる数値スキームを考えねばならない。

さらに、時間微分と空間微分の階数で偏微分方程式の振る舞いは大きく変化する。拡散方程式のように時間微分 1 階で空間微分 2 階のものと移流のように時間微分も空間微分も 1 階のもの（波動方程式は時間微分も空間微分も 2 階だが、移流方程式に帰着できる）とでは性質が異なるため、微分の階数によって取扱いを変える必要がある。まずは拡散方程式を考えることにする。

2 1 次元拡散方程式

多次元の場合は変数が増えて大変なので、最も簡単な例としてまず 1 次元空間内の拡散方程式を考える。場は空間 x だけでなく時間 t にも依存する。

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (1)$$

ここで、 D は拡散係数である。うまく無次元化すれば $D = 1$ とできるのだが、あとで物理的な意味を議論するために拡散係数を D のまま残しておくことにする。境界条件および初期条件は以下のようなもの考える。

$$u(0, t) = u(L, t) = 0, \quad u(x, 0) = w(x) \quad (2)$$

なお、時間が十分経過した後の解は $u(x, t) \rightarrow 0 (t \rightarrow \infty)$ であり、数値的には境界値問題の解として得られるのは既に説明した通りである。

計算機で取り扱える形とするため、まず空間と時間の離散化を行う。

$$t_i = hi \quad (i = 0, 1, 2, \dots) \quad (3)$$

$$x_j = \Delta j \quad (j = 0, 1, 2, \dots, N) \quad (4)$$

ここで、境界値問題の場合と同様、空間刻みについては

$$x_N = \Delta N = L \quad (5)$$

という関係式を満たすように決めるものとする。また、場は

$$u_{j,i} = u(x_j, t_i), \quad w_j = w(x_j) \quad (6)$$

と離散化する。境界条件と初期条件は離散化した場を用いて表現できて、

$$u_{0,i} = u_{N,i} = 0, \quad u_{j,0} = w_j \quad (7)$$

である。

空間についての偏微分の扱いは境界値問題の場合と同様である。すなわち、

$$\left. \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \right|_{x_j, t_i} \approx \frac{u_{j+1, i} + 2u_{j, i} - u_{j-1, i}}{\Delta^2} \quad (8)$$

とする。あとは時間についての偏微分を何らかの形で差分に置き換えてやれば微分法定式の離散化・差分化が完了する。

2.1 FTCS 法

常微分方程式の Euler 法と同様の形で時間微分を差分で近似するのが最も単純な方法である。時間 t についての Taylor 展開を用いて、 $u_{j, i+1}$ を $u_{j, i}$ のまわりで展開する。

$$u_{j, i+1} = u_{j, i} + h \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{x_j, t_i} + O(h^2) \quad (9)$$

$O(h^2)$ の項を無視すれば

$$\frac{u_{j, i+1} - u_{j, i}}{h} \approx \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{x_j, t_i} = \left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x_j, t_i} \quad (10)$$

とできる。これを空間についての中心差分と組み合わせると

$$\frac{u_{j, i+1} - u_{j, i}}{h} = D \frac{u_{j+1, i} - 2u_{j, i} + u_{j-1, i}}{\Delta^2} \quad (11)$$

というスキームが得られる。時間については i が $i+1$ という先に進んだ点を使い、空間については j に対して $j-1, j+1$ と中心まわりの点を使っていることから、前進時間中心空間 (forward time centered space, FTCS) 法とよばれる。

FTCS 法は常微分方程式でいうところの Euler 法と思ってよい。スキームは単純でわかりやすいのだが、 h が大きくなると誤差が大きくなかつ不安定になってしまう。FTCS 法の局所誤差は導出過程からわかるように $O(h^2)$ である。

2.2 安定性解析

直感的には、FTCS 法が安定であるためには h が十分小さければよい。常微分方程式の Euler 法では h がどれだけ小さければ大丈夫かは方程式の形に依存しており、単純な場合には解析的に調べることができた。拡散方程式は $u(x, t)$ について線形の方程式であるため、同様にして安定性を調べることができる。

拡散方程式は Fourier 展開を行うことで解析的に解ける。これは正弦波が拡散方程式の右辺に表れる Laplace 演算子の固有関数となっているためである。これは境界値問題のスペクトル法で使った性質なのであるが、ここでは Fourier 展開を安定性の解析に用いる。いま、 $u(x, t)$ が波数 k を持つ波として以下のように表現されたと仮定する。

$$u(x, t) = \xi(t) e^{\sqrt{-1} k x} \quad (12)$$

ここで、 $\sqrt{-1}$ は虚数単位である。(あまりいい表記ではないが、離散化した時間 i と区別するため直接 $\sqrt{-1}$ と書くことにする¹。) 一般にこの形では境界条件を満たさないのだが、ひとまず境界条件のことは考えず、境界から離れた場所ではこのような形でよく表現できるのでこの関数を使うことにする。この関数は Laplace 演算子の固有関数であるから、他の波数を持つ波とは独立してこれだけで時間発展を解析することが可能である。このような関数の形を仮定して安定性を解析する方法は von Neumann 安定性解析、線形安定性解析などと呼ばれる。

¹計算機関係では i という文字を虚数単位以外で使うことが多いのでこのようなことが起こる。また、電気系では i は電流を表すのに使うため、被らないように虚数単位を j とする慣例がある。(ここでは j も使えないのだが。)

上記の $u(x, t)$ に対して FTCS スキームを適用する。まず、離散化してやれば

$$u_{j,i} = u(x_j, t_i) = \xi_i e^{\sqrt{-1}kx_j} \quad (13)$$

である。FTCS スキームの左辺は

$$\frac{u_{j,i+1} - u_{j,i}}{h} = \frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{h} e^{\sqrt{-1}kx_j} \quad (14)$$

右辺は

$$D \frac{u_{j+1,i} - 2u_{j,i} + u_{j-1,i}}{\Delta^2} = D \frac{e^{\sqrt{-1}k\Delta} - 2 + e^{-\sqrt{-1}k\Delta}}{\Delta^2} \xi_i e^{\sqrt{-1}kx_j} = -\frac{4D \sin^2(k\Delta/2)}{\Delta^2} \xi_i e^{\sqrt{-1}kx_j} \quad (15)$$

となる。ただし、 $\xi_i = \xi(t_i)$ とした。従って、FTCS スキームとして

$$\frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{h} = -\frac{4D \sin^2(k\Delta/2)}{\Delta^2} \xi_i \quad (16)$$

が得られる。これを变形すると

$$\xi_{i+1} = \left[1 - \frac{4Dh \sin^2(k\Delta/2)}{\Delta^2} \right] \xi_i \quad (17)$$

であるから、結局解として

$$\xi_i = \left[1 - \frac{4Dh \sin^2(k\Delta/2)}{\Delta^2} \right]^i \xi_0 \quad (18)$$

を得る。右辺のカッコ内は増幅因子などと呼ばれる。拡散方程式では時間が十分経たあとは定常解が実現されるべきであるから、一般にここで考えているような波は時間とともに減衰していくべきである。波数 k は任意の値を取れるとすると、減衰のための条件は任意の k に対して増幅因子の絶対値が 1 以下であることである。すなわち、

$$\left| 1 - \frac{4Dh \sin^2(k\Delta/2)}{\Delta^2} \right| \leq 1 \quad (19)$$

であればよいことになる。 $\sin^2(x)$ の最大値が 1 であることから、任意の k に対してこの条件が成立しているためには

$$-1 \leq 1 - \frac{4Dh}{\Delta^2} \quad (20)$$

すなわち

$$\frac{2Dh}{\Delta^2} \leq 1 \quad (21)$$

であればよい。期待した通り h が小さければ安定なのだが、この条件はただ h が小さいということではなく、 h が拡散係数と空間刻みによって決まる定数 Δ^2/D と比べて小さいことが必要であることを表している。空間刻み Δ を細かくすればするほど、あるいは拡散係数 D を大きくするほど、時間刻み h のほうには厳しい条件が要求されるようになるわけである。以上の結果の物理的意味は以下のような形になる。時間刻み h の間には拡散距離 \sqrt{Dh} 程度拡散することができる。この拡散距離が空間刻み Δ より大きくなるともはや考えている時間・空間刻みでは拡散現象を扱いきれない。

2.3 Crank-Nicolson 法

FTCS スキームは単純ではあるが安定であるためには時間刻み h について厳しい条件が課されることがわかった。常微分方程式では、陽解法よりも陰解法のほうが安定になる傾向がある（ただし陰解法にすると解くのは大変になる）。実際、偏微分方程式の初期値問題でも陰解法にすれば安定性は大きく改善される。

FTCS スキームで時間微分を差分にする際に $u_{j,i+1}$ を $u_{j,i}$ まわりで Taylor 展開したが、逆に $u_{j,i}$ を $u_{j,i+1}$ まわりで展開してみる。

$$u_{j,i} = u_{j,i+1} - h \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{x_j, t_{i+1}} + O(h^2) \quad (22)$$

先ほど同様に $O(h^2)$ の項を無視すれば

$$\frac{u_{j,i+1} - u_{j,i}}{h} \approx \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{x_j, t_{i+1}} \quad (23)$$

である。空間についての微分は FTCS と同様に中心差分をそのまま使うとすると、

$$\frac{u_{j,i+1} - u_{j,i}}{h} = D \frac{u_{j+1,i+1} - 2u_{j,i+1} + u_{j-1,i+1}}{\Delta^2} \quad (24)$$

が得られる。このスキームは後退時間中心空間 (backward time centered space, BTCS) 法とよばれる。FTCS スキームと比べると、右辺が時刻 t_{i+1} での値を使って表現された形になっていることがわかる。

さて、安定性はどうなっているか考える。安定性解析は FTCS 法とほとんど同じように行えて、その結果は

$$\frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{h} = -\frac{4D \sin^2(k\Delta/2)}{\Delta^2} \xi_{i+1} \quad (25)$$

となる。これを解くと

$$\xi_i = \left[\frac{1}{1 + \frac{4Dh \sin^2(k\Delta/2)}{\Delta^2}} \right]^i \xi_0 \quad (26)$$

である。増幅因子の絶対値は常に 1 より小さいので、BTCS 法は時間刻み h によらず無条件に安定なスキームである。もちろん、安定であるというだけで、 h が大きいと誤差自体は当然大きくなる。BTCS 法は FTCS 法と比べて、物理的に不適切な大きな拡散距離を持つような拡散を強制的に抑え込んでいるものと解釈できる。

常微分方程式の場合、Heun 法は Euler 法よりも高次の項を取り込むことで精度を改善していた。偏微分方程式についても同様の考え方に基づいて高精度なスキームを得ることができる。FTCS 法を導出する際に利用した Taylor 展開は

$$u_{j,i+1} = u_{j,i} + h \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{x_j, t_i} + \frac{h^2}{2} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|_{x_j, t_i} + O(h^3) \quad (27)$$

であり、BTCS 法の Taylor 展開は変形すれば

$$\begin{aligned} u_{j,i+1} &= u_{j,i} + h \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{x_j, t_{i+1}} - \frac{h^2}{2} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|_{x_j, t_{i+1}} + O(h^3) \\ &= u_{j,i} + h \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{x_j, t_{i+1}} - \frac{h^2}{2} \left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|_{x_j, t_i} + O(h^3) \end{aligned} \quad (28)$$

と書ける。2 つの展開式を足して平均を取れば $O(h^2)$ の項を消せて、

$$u_{j,i+1} = u_{j,i} + \frac{h}{2} \left[\left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{x_j, t_i} + \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{x_j, t_{i+1}} \right] + O(h^3) \quad (29)$$

とできる。 $O(h^3)$ を無視して空間についての微分を中心差分で近似してやれば、

$$\frac{u_{j,i+1} - u_{j,i}}{h} = \frac{D}{2} \left[\frac{u_{j+1,i} - 2u_{j,i} + u_{j-1,i}}{\Delta^2} + \frac{u_{j+1,i+1} - 2u_{j,i+1} + u_{j-1,i+1}}{\Delta^2} \right] \quad (30)$$

を得る。これはちょうど FTCS 法と BTCS 法を平均化したような形であり、常微分方程式に対する Heun 法の性質を思い出せば精度が高くなっていることがわかるであろう。このスキームは Crank-Nicolson 法と呼ばれる。Crank-Nicolson 法は時間について局所誤差が $O(h^3)$ であり、FTCS 法と BTCS 法より高精度なスキームである。

さて、精度が高いだけでは必ずしもスキームが優れていることにはならない。Crank-Nicolson 法の安定性を解析する。FTCS 法、BTCS 法と同様にして考えれば

$$\frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{h} = -\frac{D}{2} \left[\frac{4 \sin^2(k\Delta/2)}{\Delta^2} \xi_i + \frac{4 \sin^2(k\Delta/2)}{\Delta^2} \xi_{i+1} \right] \quad (31)$$

となる。これを解くと

$$\xi_i = \left[\frac{1 - \frac{2Dh \sin^2(k\Delta/2)}{\Delta^2}}{1 + \frac{2Dh \sin^2(k\Delta/2)}{\Delta^2}} \right]^i \xi_0 \quad (32)$$

が得られる。増幅因子の絶対値は BTCS 法の場合と同じく常に 1 より小さい。従って、Crank-Nicolson 法は精度が高くかつ安定なスキームであることがわかる。

BTCS 法と Crank-Nicolson 法は陰解法であり、FTCS 法と比べて計算機で取り扱う際にはどうしてもプログラムが複雑になってしまう。具体的には、時間を t_i から t_{i+1} に進めるためのステップで毎回境界値問題を解くのも同じようなことをせねばならない²。しかし、Crank-Nicolson 法はその手間に見合うだけの安定性と精度を持つため、拡散方程式の標準的解法として広く使われている。

3 多次元拡散方程式

多次元の拡散方程式の解法は次元の場合とほぼ同様である。これは境界値問題の場合と異なり、次元でも多次元でも時間自体は 1 つしかないためである。常微分方程式のスキームが多変数系に適用できたことと同様と考えればよい。

例として 2 次元空間中の拡散方程式を考える。

$$\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial t} = D \left[\frac{\partial^2 u(x, y, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y, t)}{\partial y^2} \right] \quad (33)$$

境界条件は

$$u(0, y, t) = u(L_x, y, t) = u(x, 0, t) = u(x, L_y, t) = 0 \quad (34)$$

とし、初期条件が

$$u(x, y, t) = w(x, y) \quad (35)$$

のように与えられているものとする。

時間と空間の離散化はこれまでのものとほぼ同じである。すなわち、

$$t_i = hi \quad (i = 0, 1, 2, \dots) \quad (36)$$

$$x_j = \Delta_x j \quad (j = 0, 1, 2, \dots, N_x) \quad (37)$$

$$y_k = \Delta_y j \quad (k = 0, 1, 2, \dots, N_y) \quad (38)$$

とする。境界値問題の場合と同様、空間刻みについては

$$\Delta_x N = L_x, \quad \Delta_y N = L_y \quad (39)$$

となるように決められるものとする。場はそれぞれ

$$u_{j,k,i} = u(x_j, y_k, t_i), \quad w_{j,k} = w(x_j, y_k) \quad (40)$$

²Heun 法のように、 t_{i+1} における値 $u_{j,i+1}$ を直接使う代わりに FTCS 法で時間発展させた値で代用すればいいと思うかもしれないが、そのような陽的スキームでは安定性を良くすることができない。

と離散化でき、境界条件と初期条件は以下のように表現できる。

$$u_{0,k,i} = u_{N_x,k,i} = u_{j,0,i} = u_{j,N_y,i} = 0, \quad u_{j,k,0} = w_{j,k} \quad (41)$$

空間についての偏微分はそれぞれの方向に対して中心差分で近似する。

$$\left. \frac{\partial^2 u(x, y, t)}{\partial x^2} \right|_{x_j, y_k, t_i} \approx \frac{u_{j+1,k,i} - 2u_{j,k,i} + u_{j-1,k,i}}{\Delta_x^2} \quad (42)$$

$$\left. \frac{\partial^2 u(x, y, t)}{\partial y^2} \right|_{x_j, y_k, t_i} \approx \frac{u_{j,k+1,i} - 2u_{j,k,i} + u_{j,k-1,i}}{\Delta_y^2} \quad (43)$$

時間についての Taylor 展開は多次元の場合でもほとんど同様に行える。2次元の場合の FTCS スキームは

$$\frac{u_{j,i+1} - u_{j,i}}{h} = D \left[\frac{u_{j+1,k,i} - 2u_{j,k,i} + u_{j-1,k,i}}{\Delta_x^2} + \frac{u_{j,k+1,i} - 2u_{j,k,i} + u_{j,k-1,i}}{\Delta_y^2} \right] \quad (44)$$

となる。同様に、Crank-Nicolson 法は

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,i+1} - u_{j,i}}{h} = \frac{D}{2} & \left[\frac{u_{j+1,k,i} - 2u_{j,k,i} + u_{j-1,k,i}}{\Delta_x^2} + \frac{u_{j,k+1,i} - 2u_{j,k,i} + u_{j,k-1,i}}{\Delta_y^2} \right. \\ & \left. + \frac{u_{j+1,k,i+1} - 2u_{j,k,i+1} + u_{j-1,k,i+1}}{\Delta_x^2} + \frac{u_{j,k+1,i+1} - 2u_{j,k,i+1} + u_{j,k-1,i+1}}{\Delta_y^2} \right] \end{aligned} \quad (45)$$

となる。項が増えているため見かけは複雑かもしれないが、本質的には 1次元の場合とほとんど変わらないことがわかるであろう³。

2次元系のこれらのスキームに対して安定性解析を行ってみる。 $u(x, y, t)$ を x, y 方向の波数 k_x, k_y を持つ波として仮定する。

$$u(x, y, t) = \xi(t) \exp(\sqrt{-1}k_x x + \sqrt{-1}k_y y) \quad (46)$$

1次元の場合と同様にして FTCS スキームに代入してやれば、

$$\frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{h} = -D \left[\frac{4 \sin^2(k_x \Delta_x / 2)}{\Delta_x^2} + \frac{4 \sin^2(k_y \Delta_y / 2)}{\Delta_y^2} \right] \xi_i \quad (47)$$

となり、以下のような増幅因子を持つ解が得られる。

$$\xi_i = \left[1 - \frac{4Dh \sin^2(k_x \Delta_x / 2)}{\Delta_x^2} - \frac{4Dh \sin^2(k_y \Delta_y / 2)}{\Delta_y^2} \right]^i \xi_0 \quad (48)$$

任意の k_x, k_y に対して安定であるための条件は

$$\frac{2Dh}{\Delta_x^2} + \frac{2Dh}{\Delta_y^2} \leq 1 \quad (49)$$

となる。1次元の FTCS スキームと比べ、条件が厳しくなっていることがわかる。特に、 Δ_x か Δ_y の小さいほうが強く影響する形となってしまっているため、空間刻みが方向によって異なる場合には細かいほうの刻みによって安定な時間刻みの大きさが強く制限されるということになる。すなわち、FTCS スキームは多次元では 1次元の場合よりさらに使いづらいと言える。Crank-Nicolson 法ではどうなるか考えてみると、

$$\frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{h} = -\frac{D}{2} \left[\frac{4 \sin^2(k_x \Delta_x / 2)}{\Delta_x^2} + \frac{4 \sin^2(k_y \Delta_y / 2)}{\Delta_y^2} \right] (\xi_i + \xi_{i+1}) \quad (50)$$

³スキームとしての性質は 1次元でも多次元でも変わらないのだが、陰解法であるために多次元の Crank-Nicolson 法を実装するプログラムはどうしても複雑になってしまう。ほとんどの場合、時間を進めるために反復法を適用することになる。

であるから、以下のような解が得られる。

$$\xi_i = \left[\frac{1 - \frac{2Dh \sin^2(k_x \Delta_x/2)}{\Delta_x^2} - \frac{2Dh \sin^2(k_y \Delta_y/2)}{\Delta_y^2}}{1 + \frac{2Dh \sin^2(k_x \Delta_x/2)}{\Delta_x^2} + \frac{2Dh \sin^2(k_y \Delta_y/2)}{\Delta_y^2}} \right]^i \xi_0 \quad (51)$$

1次元の場合と同様、増幅因子の絶対値は常に1未満であり、Crank-Nicolsonスキームは時間刻み h によらず安定である。このように安定性が保証されたスキームは多次元では特に使いやすい。