計算物理学および演習

偏微分方程式の数値解法 4

畝山多加志

1　1 次元波動方程式と移流方程式

前回説明したように、偏微分方程式の性質は微分の階数に依存しており、初期値問題の解法は対象とする偏微分方程式のタイプに応じてそれぞれ適切なものを用いる必要がある。ここでは 1 次元の波動方程式と移流方程式について考える。1 次元波動方程式は

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

という形をしており、時間微分は 2 階である。ただしここで $v > 0$ は定数である。適切な無次元化を行えば $v = 1$ とできるのだが、拡散方程式の場合と同様に物理的意味を明らかにするために v のまま残しておくことにする。波動方程式を変形すれば

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - v^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) u(x,t) = 0 \tag{2}$$

であり、微分演算子を因数分解すれば

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - v \frac{\partial}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial}{\partial t} + v \frac{\partial}{\partial x} \right) u(x,t) = 0 \tag{3}$$

である。ここで、微分演算子 $\partial/\partial t \pm v\partial/\partial x$ は可換であるから、どちらかの演算子を作用させてゼロとなるような $u(x,t)$ は波動方程式の解となる [1]。波動方程式は時間と空間についてともに 1 階の偏微分方程式が基本となっていると解釈できる。

従って、波動方程式のような偏微分方程式を取り扱うに際して、まずは以下のようなより単純な偏微分方程式を考える。

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = -v \frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \tag{4}$$

この偏微分方程式は移流方程式と呼ばれ、その名前の通り一定の速度 v を持って流れていくような場を表す。特に、境界条件を課さずに無限区間を考えた場合、一般解は任意の関数 $f(x)$ に対して

$$u(x,t) = f(x - vt) \tag{5}$$

である。(移流方程式に代入すれば解であることは容易に確かめられる。) ここでは与えられた初期条件と境界条件のもとでの解を考える。具体的に以下の初期条件と境界条件を考えることにする。

$$u(0,t) = u(L,t) = 0, \qquad u(x,0) = w(x) \tag{6}$$

計算機で移流方程式を扱うための方法を考える。まず、拡散方程式の場合と同様に空間と時間の離散化を行う。

$$t_i = hi \qquad (i = 0, 1, 2, \dots) \tag{7}$$

$$x_j = \Delta j \qquad (j = 0, 1, 2, \dots, N) \tag{8}$$

[1] このあとに出てくる移流方程式の解がそのような解に相当する。他に、時間依存しない解、すなわち Laplace 方程式の解も波動方程式の解である。

ただし、空間刻みについては次式を満たすものとする。

$$x_N = \Delta N = L \tag{9}$$

$u(x,t), w(x)$ も離散化してやると

$$u_{j,i} = u(x_j, t_i), \qquad w_j = w(x_j) \tag{10}$$

となる。

2　1 次元移流方程式の数値解法

2.1　風上差分法

拡散方程式では空間についての微分は 2 階であり、微分を離散化するために中心差分を用いた。ところが、移流方程式の場合には空間についての微分は 1 階であり、Poisson 方程式や拡散方程式の場合と同様に考えることはできない。差分化にはいくつかの方法があるが、最も簡単な考えかたとして、空間微分を

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_j,t_i} \approx \frac{u_{j,i} - u_{j-1,i}}{\Delta} \tag{11}$$

と近似してやるというものがある。Poisson 方程式の数値解法を考える際に説明したように、この差分は対称性が悪く物理的にはあまり好ましくない。ところが、移流方程式の解は時間経過とともに速度 v で x 軸に沿って流れるので、物理的にはそもそも空間について対称ではない。そのため解が流れてくる方向を使うという意味で片側に偏った差分を使うことが正当化できる。

時間微分については最も単純な前進差分を考えるとしてやれば、

$$\left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|_{x_j,t_i} \approx \frac{u_{j,i+1} - u_{j,i}}{h} \tag{12}$$

である。これと空間についての差分を組み合わせれば、最も単純な以下のような数値スキームが得られる。

$$\frac{u_{j,i+1} - u_{j,i}}{h} = -v\frac{u_{j,i} - u_{j-1,i}}{\Delta} \tag{13}$$

このスキームは解が流れてくる上流で微分を取っていることから風上差分法と呼ばれる。

風上差分法は単純ではあるが残念ながら精度・安定性ともによくない。安定性について考えるため、von Neumann 型の安定性解析を行ってみる。まず、以下のような形の解を仮定する。

$$u(x,t) = \xi(t)e^{\sqrt{-1}kx} \tag{14}$$

ここで k は任意の波数である [2]。前回行った安定性解析と同様に、上記の $u(x,t)$ を離散化して風上差分スキームに代入する。風上差分スキームの左辺と右辺はそれぞれ以下のようになる。

$$\frac{u_{j,i+1} - u_{j,i}}{h} = \frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{h}e^{\sqrt{-1}kx_j} \tag{15}$$

$$-v\frac{u_{j,i} - u_{j-1,i}}{\Delta} = -v\frac{1 - e^{-\sqrt{-1}k\Delta}}{\Delta}\xi_i e^{\sqrt{-1}kx_j} \tag{16}$$

従って風上差分スキームは

$$\frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{h} = -v\frac{1 - e^{-\sqrt{-1}k\Delta}}{\Delta}\xi_i \tag{17}$$

[2] 移流方程式の一般解の性質を考えると、厳密解に対しては $\xi(t)$ は $\xi(t) = \xi(0)e^{-\sqrt{-1}kvt}$ となる。これは増幅因子の絶対値が波数によらず常に 1 となることに相当し、移流方程式に対しては波は減衰も増幅もしないことに対応する。拡散方程式の場合は波数 $k = 0$ の場合以外は減衰するのと対照的である ($k = 0$ の場合は保存則に相当するので減衰も増幅もしない)。

となる。この解は

$$\xi_i = \left[1 - \frac{vh}{\Delta}(1 - e^{-\sqrt{-1}k\Delta})\right]^i \xi_0 \tag{18}$$

である。増幅因子は複素数であるから、増幅因子の絶対値そのものより絶対値の 2 乗を考える方が都合がよい。

$$\begin{aligned} \left|1 - \frac{vh}{\Delta}(1 - e^{-\sqrt{-1}k\Delta})\right|^2 &= \left|1 - C(1 - \cos(k\Delta) + \sqrt{-1}\sin(k\Delta))\right|^2 \\ &= 1 - 2C\,(1 - C)\,(1 - \cos(k\Delta)) \end{aligned} \tag{19}$$

となる。ただしここで $C = vh/\Delta$ とした。少しまぎらわしい形だが、$0 \le 1 - \cos(k\Delta) \le 2$ を用いてやれば安定性条件を解析できる。$C = vh/\Delta \le 1$ のとき増幅因子の絶対値は 1 以下であり風上差分法は安定である。逆に $C = vh/\Delta > 1$ のとき風上差分法は不安定となる。物理的には、移流速度 v による時間刻み h あたりの移動量 vh が空間刻み Δ より大きくなると不安定になるとみなせる。$C = vh/\Delta$ は Cournat 数と呼ばれる。また、安定性の基準 $C \le 1$ は Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) 安定性条件あるは Courant 条件などと呼ばれる。

2.2 FTCS 法

風上差分法よりも空間についての微分の精度を上げる方法として、1 階微分の中心差分近似というものがある。

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_j,t_i} \approx \frac{u_{j+1,i} - u_{j-1,i}}{2\Delta} \tag{20}$$

これは考える点の両隣を対称な形で使っており、風上差分法で用いた差分より良さそうに思える。時間微分については前進差分を用いるとすれば、前進時間中心空間 (FTCS) 法が得られる。

$$\frac{u_{j,i+1} - u_{j,i}}{h} = -v\frac{u_{j+1,i} - u_{j-1,i}}{2\Delta} \tag{21}$$

拡散方程式については FTCS 法は h が小さく、拡散距離が空間刻みより小さなときにのみ安定であった。風上差分法と同様に FTCS 法の von Neumann 安定性解析をしてみると、

$$\frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{h} = -v\frac{e^{\sqrt{-1}k\Delta} - e^{-\sqrt{-1}k\Delta}}{2\Delta}\xi_i = -v\frac{\sqrt{-1}\sin(k\Delta)}{\Delta}\xi_i \tag{22}$$

となるから、解として次式が得られる。

$$\xi_i = \left[1 - \sqrt{-1}C\sin(k\Delta)\right]^i \xi_0 \tag{23}$$

増幅因子の絶対値は

$$\left|1 - \sqrt{-1}C\sin(k\Delta)\right|^2 = 1 + C^2\sin^2(k\Delta) > 1 \tag{24}$$

となり、これは FTCS 法が無条件に不安定であることを意味する。従って、時間刻みと空間刻みをどのように取ろうとも、FTCS 法ではほとんどまともに計算が行えない。FTCS 法は対称性がよいように見えても、物理的な意味を考えると風上差分法のほうが妥当な近似になっているのである。

2.3 Lax-Friedrichs 法

以上で示されたように FTCS 法は不安定であるが、やはり空間について対称性の高い差分は捨てがたい。Lax-Friedrichs 法は FTCS 法に単純な変更を導入することで安定化するスキームである。Lax-Friedrichs 法では時間微分を

$$\left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|_{x_j,t_i} \approx \frac{u_{j,i+1} - \dfrac{u_{j+1,i} + u_{j-1,i}}{2}}{h} \tag{25}$$

と近似する。これはあまり意味のはっきりしない差分化に思えるかもしれないが、FTCS 法が不安定なのは時間微分に表れる $u_{j,i}$ の項が原因であると考えれば、安定化のために時間微分の差分化を変更するのは一つの方法であると理解できる。さて、上記の差分を使い、空間については中心差分を使うとすると Lax-Friedrichs 法が得られる。

$$\frac{u_{j,i+1} - \dfrac{u_{j+1,i} + u_{j+1,i}}{2}}{h} = -v\frac{u_{j+1,i} - u_{j-1,i}}{2\Delta} \tag{26}$$

これでは見づらいので変形して

$$u_{j,i+1} = \frac{u_{j+1,i} + u_{j+1,i}}{2} - vh\frac{u_{j+1,i} - u_{j-1,i}}{2\Delta} \tag{27}$$

と表現することが多い。

Lax-Friedrichs 法に対して von Neumann 安定性解析を行う。項が多くて少し紛らわしいが、大部分は FTCS 法と同様であり、

$$\frac{\xi_{i+1} - \cos(k\Delta)\xi_i}{h} = -v\frac{\sqrt{-1}\sin(k\Delta)}{\Delta}\xi_i \tag{28}$$

となる。これを解くと解は

$$\xi_i = \left[\cos(k\Delta) - \sqrt{-1}C\sin(k\Delta)\right]^i \xi_0 \tag{29}$$

である。増幅因子の絶対値は

$$\begin{aligned} \left|\cos(k\Delta) - \sqrt{-1}C\sin(k\Delta)\right|^2 &= \cos^2(k\Delta) + C^2\sin^2(k\Delta) \\ &= 1 + (C^2 - 1)\sin^2(k\Delta) \end{aligned} \tag{30}$$

あまり単純な形ではないが、風上差分スキームと同様、$C \leq 1$ のとき安定、$C > 1$ のとき不安定である。

Lax-Friedrichs 法は時間微分の近似の差分を変化したものとして導出したが、別の形で解釈することもできる。左辺が FTCS 法と同じ形になるように Lax-Friedrichs 法を変形してやれば

$$\begin{aligned} \frac{u_{j,i+1} - u_{j,i}}{h} &= -v\frac{u_{j+1,i} - u_{j-1,i}}{2\Delta} - \frac{u_{j,i} - \dfrac{u_{j+1,i} + u_{j+1,i}}{2}}{h} \\ &= -v\frac{u_{j+1,i} - u_{j-1,i}}{2\Delta} + \frac{\Delta^2}{2h}\frac{u_{j+1,i} - 2u_{j,i} + u_{j+1,i}}{\Delta^2} \end{aligned} \tag{31}$$

とできる。FTCS 法と比べると、右辺に余計な項が付いた形となっている。この余計な項は拡散方程式に表れる項と同じ形であるから、Lax-Friedrichs 法は FTCS 法に拡散係数 $D = \Delta^2/2h$ を持つ拡散型の項を追加したものとみなすことができる。このように考えると、物理的には Lax-Friedrichs 法は FTCS 法で不安定化してしまう波を拡散によって無理やり押さえ込んでいるものと解釈できる。本来方程式に含まれていなかった拡散型の項を付け加えているので、Lax-Friedrichs 法は拡散によるエネルギー散逸が強く表れることが知られている。

2.4 Lax-Wendroff 法

ここまでに示したスキームはどれも経験的に差分を近似したようなものとなっていた。特に、Lax-Friedrichs 法では時間微分の差分近似は自然とは言えない形で導入されていた。微分を取り扱うためのより適切な方法としては、これまでに何度も用いてきた Taylor 展開を使う方法が考えられる。ここでは移流方程式に対して Taylor 展開を適用してスキームを導出してみる。まず、$u_{j,i+1}$ を $t = t_i$ のまわりで Taylor 展開を行うと

$$u_{j,i+1} = u_{j,i} + h\left.\frac{\partial u}{\partial t}\right|_{x_j,t_i} + \frac{h^2}{2}\left.\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right|_{x_j,t_i} + O(h^3) \tag{32}$$

となる。これに移流方程式を代入すれば

$$u_{j,i+1} = u_{j,i} - vh \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x_j,t_i} + \frac{v^2h^2}{2} \left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{x_j,t_i} + O(h^3) \tag{33}$$

とできる。$O(h^3)$ の項を無視して、空間についての微分を中心差分で近似することにすれば

$$u_{j,i+1} \approx u_{j,i} - vh\frac{u_{j+1,i} - u_{j-1,i}}{2\Delta} + \frac{v^2h^2}{2}\frac{u_{j+1,i} - 2u_{j,i} + u_{j-1,i}}{\Delta^2} \tag{34}$$

となる。項を整理してやれば

$$\frac{u_{j,i+1} - u_{j,i}}{h} = -v\frac{u_{j+1,i} - u_{j-1,i}}{2\Delta} + \frac{v^2h}{2}\frac{u_{j+1,i} - 2u_{j,i} + u_{j-1,i}}{\Delta^2} \tag{35}$$

が得られる。これは Lax-Wendroff 法と呼ばれるスキームであり、Lax-Friedrichs 法と同様に拡散型の項が含まれるスキームとなっている。ただし、拡散係数は $D = v^2h/2$ となり、Lax-Friedrichs 法のものとは異なる [3]。また、Lax-Friedrichs 法と異なり、Lax-Wendroff 法では Taylor 展開の高次項まで取り込んでいるので、時間について高精度なスキームとなっている (局所誤差 $O(h^3)$)。

Lax-Wendroff 法の安定性について考える。これまでと同様に von Neumann 安定性解析を行えば

$$\frac{\xi_{i+1} - \xi_i}{h} = -v\frac{\sqrt{-1}\sin(k\Delta)}{\Delta}\xi_i + \frac{v^2h(\cos(k\Delta) - 1)}{\Delta^2}\xi_i \tag{36}$$

となるので、次式の解が得られる。

$$\xi_i = \left[1 - \sqrt{-1}C\sin(k\Delta) + C^2(\cos(k\Delta) - 1)\right]^i \xi_0 \tag{37}$$

増幅因子の絶対値を考えれば

$$\begin{aligned}
&\left|1 - \sqrt{-1}C\sin(k\Delta) + C^2(\cos(k\Delta) - 1)\right|^2 \\
&= 1 + C^2(2\cos(k\Delta) - 2 + \sin^2(k\Delta)) + C^4(\cos(k\Delta) - 1)^2 \\
&= 1 - C^2(1 - C^2)(\cos(k\Delta) - 1)^2
\end{aligned} \tag{38}$$

少々複雑な形だが、結局、Lax-Wendroff 法も風上差分法や Lax-Friedrichs 法と同じく、$C \le 1$ のとき安定、$C > 1$ のとき不安定となる。

Lax-Wendroff 法は精度が高く比較的安定なスキームであり、現在でも用いられることが多い。近年では移流方程式の性質に基づいた物理的により適切なスキームが開発されている。残念ながら複雑な形となるものが多いのでここでは省略する [4]。

3　1 次元波動方程式の数値解法

最初に説明した通り、波動方程式は移流方程式に分解できるため、波動方程式を解くために前節で示した移流方程式の数値スキームを使うことができる。例えば、新しい場 $s(x,t) = \partial u(x,t)/\partial t - v\partial u(x,t)/\partial x$ を導入して

$$\frac{\partial s(x,t)}{\partial t} = -v\frac{\partial s(x,t)}{\partial x}, \qquad \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = v\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} + s(x,t) \tag{39}$$

のようにしてやれば、波動方程式は 2 つの移流型方程式の組に分解される。あるいは、$\partial u(x,t)/\partial t = v\partial r(x,t)/\partial x$ を満たす場 $r(x,t)$ を用いて

$$\frac{\partial[u(x,t) + r(x,t)]}{\partial t} = v\frac{\partial[u(x,t) + r(x,t)]}{\partial x}, \qquad \frac{\partial[u(x,t) - r(x,t)]}{\partial t} = -v\frac{\partial[u(x,t) - r(x,t)]}{\partial x} \tag{40}$$

[3] Courant 数が 1 のときに両者は一致する。

[4] CIP 法と呼ばれる比較的新しいスキームを使うと移流方程式を安定して解くことがが知られている。CIP 法は比較的単純な形でありながら Lax-Wendroff 法等ではうまく扱えないような形の関数 (矩形波など) の移流でも長時間にわたって安定に解くことができる。

と分解することもできる。いずれにせよ、分解後は移流方程式の解法を適用すれば数値的に解くことができる。

他にも、直接波動方程式を離散化する方法も考えられる。波動方程式は時間についても空間についても 2 階の微分になっているので、空間微分を中心差分で近似したように、時間微分も中心差分で近似することを考える。

$$\left.\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right|_{x_j,t_i} \approx \frac{u_{j,i+1} - 2u_{j,i} + u_{j,i-1}}{h^2} \tag{41}$$

空間微分についての中心差分と組み合わせてもとの波動方程式に代入すれば

$$\frac{u_{j,i+1} - 2u_{j,i} + u_{j,i-1}}{h^2} = v^2 \frac{u_{j+1,i} - 2u_{j,i} + u_{j-1,i}}{\Delta^2} \tag{42}$$

というスキームが得られる。これは中心時間中心空間 (CTCS) 法と呼ばれることがある。

安定性を考えてみる。von Neumann 安定性解析を行えば、ξ_i に対する式として

$$\frac{\xi_{i+1} - 2\xi_i + \xi_{i-1}}{h^2} = -\frac{4v^2 \sin^2(k\Delta)}{\Delta^2}\xi_i \tag{43}$$

が得られる。このままでは解けないので [5]、ここでさらに ξ_i の形として $\xi_i = g^i \xi_0$ という形を仮定してやる。(g が増幅因子に相当する。) g について整理してやれば

$$g^2 - 2\beta g + 1 = 0 \tag{44}$$

$$\beta = 1 - \frac{2h^2 v^2 \sin^2(k\Delta)}{\Delta^2} = 1 - 2C^2 \sin^2(k\Delta) \tag{45}$$

($C = vh/\Delta$) となり、これを解くと

$$g = \beta \pm \sqrt{\beta^2 - 1} \tag{46}$$

が解である。まだ見通しが悪いが、$|\beta| > 1$ であれば 2 つの解のうち片方の $|g|$ が 1 を越えるので不安定である。$|\beta| < 1$ のとき、ルートの中身が負になることに注意すれば

$$|g| = \beta^2 + (1 - \beta^2) = 1 \tag{47}$$

となり安定である。従って $-1 \leq \beta \leq 1$ が安定性条件であり、k が任意であることを使えば結局 $C \leq 1$ となる。CTCS 法を使ってもやはり安定性は CFL 条件で決まるということである。

4　スペクトル法

ここまでに示したように、移流方程式や波動方程式を数値的に解くのは CFL 条件を課されるためなかなかに難しい。また、拡散方程式を FTCS 法のような陽解法で数値的に解くと時間刻みをあまり大きくできない。陰解法は安定するのだがプログラムの手間を考えると(特に多次元では) 大変である。

これまでに示した数値解法とは少し別の方法としてスペクトル法を紹介する。スペクトル法は既に偏微分方程式の境界値問題の解法として導入した。固有関数展開を使うことで偏微分方程式を代数方程式に変換するというものであった。1 次元拡散方程式を例として固有関数展開によるスペクトル法を考えてみる。拡散方程式と境界条件、初期条件としては以下のものを考えることにする。

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} \tag{48}$$

[5] 一応、2 階の漸化式なので解析解は存在する。ここで求めている g についての 2 次方程式の解を $g_\pm$ とすれば、$\xi_i = \dfrac{g_+^{i+1}(\xi_0 - g_-\xi_{-1}) - g_-^{i+1}(\xi_0 - g_+\xi_{-1})}{g_+ - g_-}$ が解である。個々の項が発散しないための条件は $|g_+| \leq 1$ および $|g_-| \leq 1$ であるから、真面目に計算しても結局は同じ条件を考えることになる。得られる安定性には違いはないので、ここでは解の形を仮定して計算を進める。

$$u(0,t) = u(L,t) = 0, \quad u(x,t) = w(x) \tag{49}$$

まず、$u(x,t)$ を Fourier 級数展開してやる。

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{u}_n(t) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \tag{50}$$

ただし、

$$\tilde{u}_n(t) = \frac{2}{L} \int_0^L dx\, u(x,t) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \tag{51}$$

である。拡散方程式は展開係数を使って

$$\frac{d\tilde{u}_n(t)}{dt} = -\frac{\pi^2 D n^2}{L^2} \tilde{u}_n(t), \quad \tilde{u}_n(0) = \tilde{w}_n \tag{52}$$

と表現できる ($\tilde{w}_n$ は $w(x)$ の Fourier 展開係数)。これは時間についての常微分方程式である。時間についてのみ離散化すると、$t_i = ih$ $(i = 0, 1, 2, \dots)$ として

$$\tilde{u}_{n,i} = \tilde{u}_n(t_i) \tag{53}$$

とすればよい。あとは Euler 法なり Heun 法なりを適用すればよい。Euler 法を使えば

$$\tilde{u}_{n,i+1} = \tilde{u}_{n,i} - \frac{\pi^2 D n^2 h}{L^2} \tilde{u}_{n,i} \tag{54}$$

となる。また、Euler 法等を用いず、解析解

$$\tilde{u}_{n,i+1} = \exp\left(-\frac{\pi^2 D n^2 h}{L^2}\right) \tilde{u}_{n,i} \tag{55}$$

を使うこともできる [6]。

全ての展開係数を使うわけにはいかないので、$n = 1, 2, \dots, N$ のみ扱うことにして、必要な全ての n に対して常微分方程式を解いたら、展開係数から $u(x, t_j)$ を構成してやればよい。

$$u(x, t_i) = \sum_{n=1}^{N} \tilde{u}_{n,i} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \tag{56}$$

境界値問題のスペクトル法と同様、展開係数の計算等の計算が大変になるのだが、高速 Fourier 変換 (FFT) 等が使えれば効率的に計算が行える。

[6] 正直なところ、ここまでするとほとんど数値スキームを使う意味が無くなってしまう。方程式が線形なので解析解は簡単に得られるはずだと言えばそれまでなのだが。