

計算機数学II (2018)

6: 偏微分方程式

照井 章 (筑波大学 数理物質系 数学域)

Akira Terui (Institute of Mathematics, University of Tsukuba)

第6章の内容

- 偏微分方程式
- 偏微分方程式の具体例
- 拡散方程式の差分法
- 陰公式
- 波動方程式の差分法
- ラプラス方程式の差分法

6-1 偏微分方程式

偏微分方程式と数値計算

偏微分方程式 (partial differential equation):
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

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

偏微分方程式と数値計算

- ところが、偏微分方程式全般に対する解法を統一的に扱うのは一般に難しい
- 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うことが多い
- 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言える

本授業(教科書)で扱う偏微分方程式

1. 放物型
(拡散方程式) $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$
2. 双曲型
(波動方程式) $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ (6.2)
3. 楕円型
(ラプラス方程式) $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$

偏微分方程式 (6.2) の特徴

- 従属変数が u のみで、 u に関して線形
- 独立変数が (x, t) もしくは (x, y) の2個
- 偏導関数は2階まで
- 偏導関数の係数はすべて定数

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数値解法で解き、解 u を求める

偏微分方程式 (6.2) の数値解法を学ぶ意義

1. 偏微分方程式が関わる問題で、式 (6.2) の3つの方程式のいずれかが関係するものが多い \Rightarrow これらの方程式をよく知ることは重要

偏微分方程式 (6.2) の数値解法を学ぶ意義

2. 式 (6.2) はいずれも線形の偏微分方程式で、多くの場合に微分解を明示的に得られるが...
 - a. 現実の問題には、式 (6.2) の方程式を基本とし、理論的な解析が困難なものも多い⇒数値解法が重要になる
 - b. それらの数値解法が、式 (6.2) の数値解法を基本としている場合が多い
3. ゆえに式 (6.2) の数値解法を学ぶ意義が大きい

偏微分方程式の具体例

1. 棒の温度分布の時間変化(放物型; 拡散方程式)
2. 弦の振動(双曲型; 波動方程式)
3. 板の定常温度分布(楕円型; ラプラス方程式)

(1) 棒の温度分布の時間変化

拡散方程式 (diffusion equation)

熱伝導方程式 (heat conduction equation)

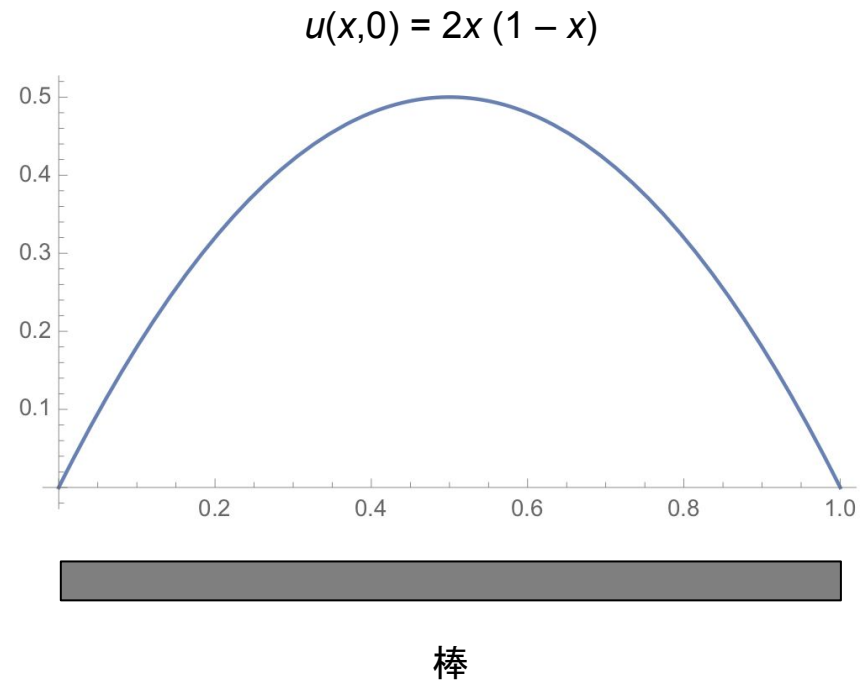
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (0 < x < 1, \quad t > 0) \quad (6.3a)$$

$$u(x, 0) = 2x(1 - x) \quad (0 \leq x \leq 1) \quad (\text{初期条件}) \quad (6.3b)$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0 \quad (t \geq 0) \quad (\text{境界条件}) \quad (6.3c)$$

(1) 棒の温度分布の時間変化

- 細長い均質な棒
左端: $x = 0$, 右端: $x = 1$
- $u(x, t)$: 時刻 t での棒上の位置 x における温度
- 初期時刻 $t = 0$ における温度分布: 式 (6.3b)
- 棒の両端の温度を常に 0 に保つ: 式 (6.3c)
- 両端では熱が自由に出入りできるようにする



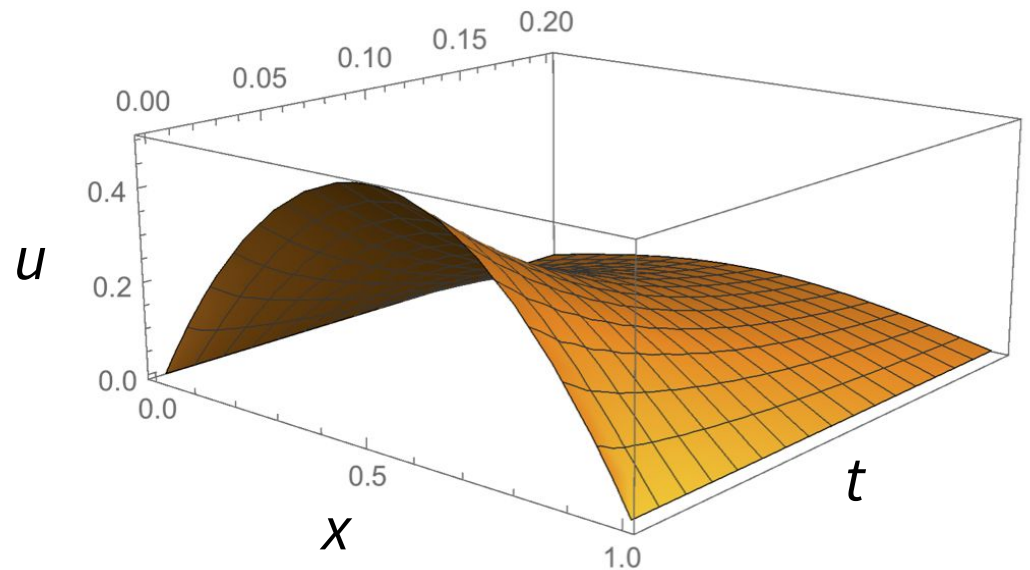
(1) 棒の温度分布の時間変化

微分解:

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

棒の温度分布の
時間変化

(図 6-2 に類似)



(2) 弦の振動

波動方程式 (wave equation)

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

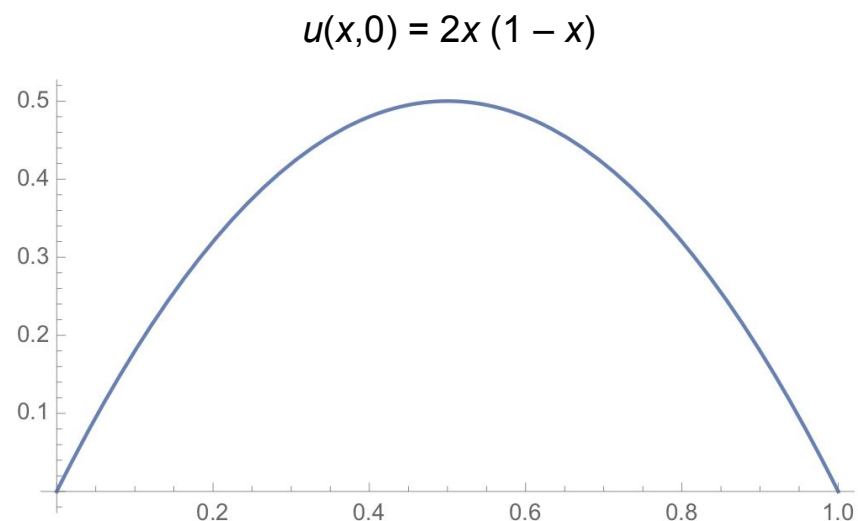
$$u(x, 0) = 2x(1 - x) \quad (0 \leq x \leq 1) \quad (\text{初期条件}) \quad (6.5b)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = 0 \quad (0 \leq x \leq 1) \quad (\text{初期条件}) \quad (6.5c)$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0 \quad (t \geq 0) \quad (\text{境界条件}) \quad (6.5d)$$

(2) 弦の振動

- 弦が張られている
左端: $x = 0$, 右端: $x = 1$
- $u(x, t)$: 時刻 t での弦の位置 x における変位(高さ)
- 初期時刻 $t = 0$ における弦の形: 式 (6.5b)
- 初期時刻 $t = 0$ で弦は静止: 式 (6.5c)
- 弦の両端は常に $u = 0$ に固定: 式 (6.3d)



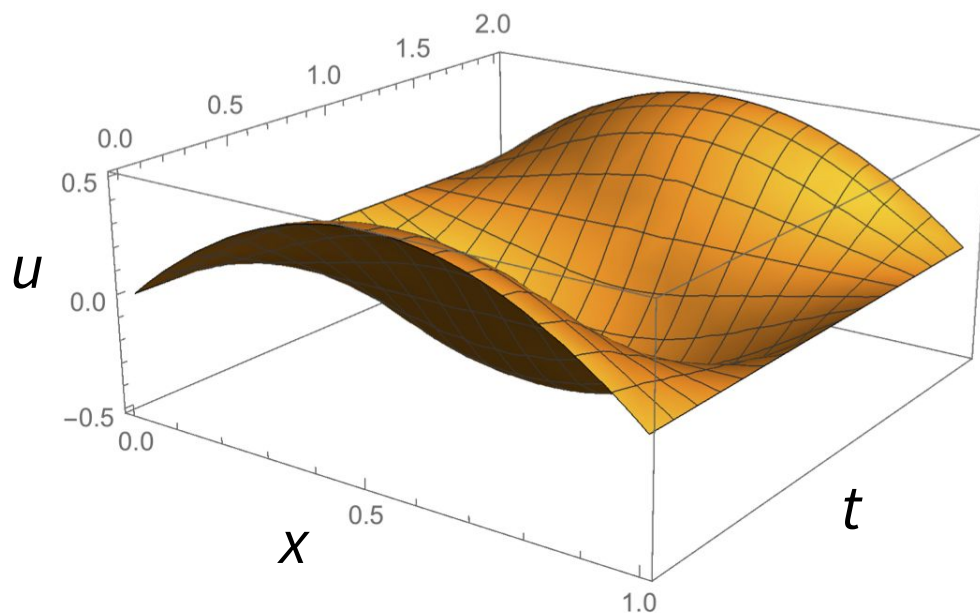
弦の初期変位 ($t = 0$)

弦の振動の微分解と時間変化

微分解:

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

弦の振動の
時間変化
(図 6-4 に類似)



(3) 板の定常温度分布

ラプラス方程式 (Laplace's equation)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (0 < x < 1, 0 < y < 1) \quad (6.7a)$$

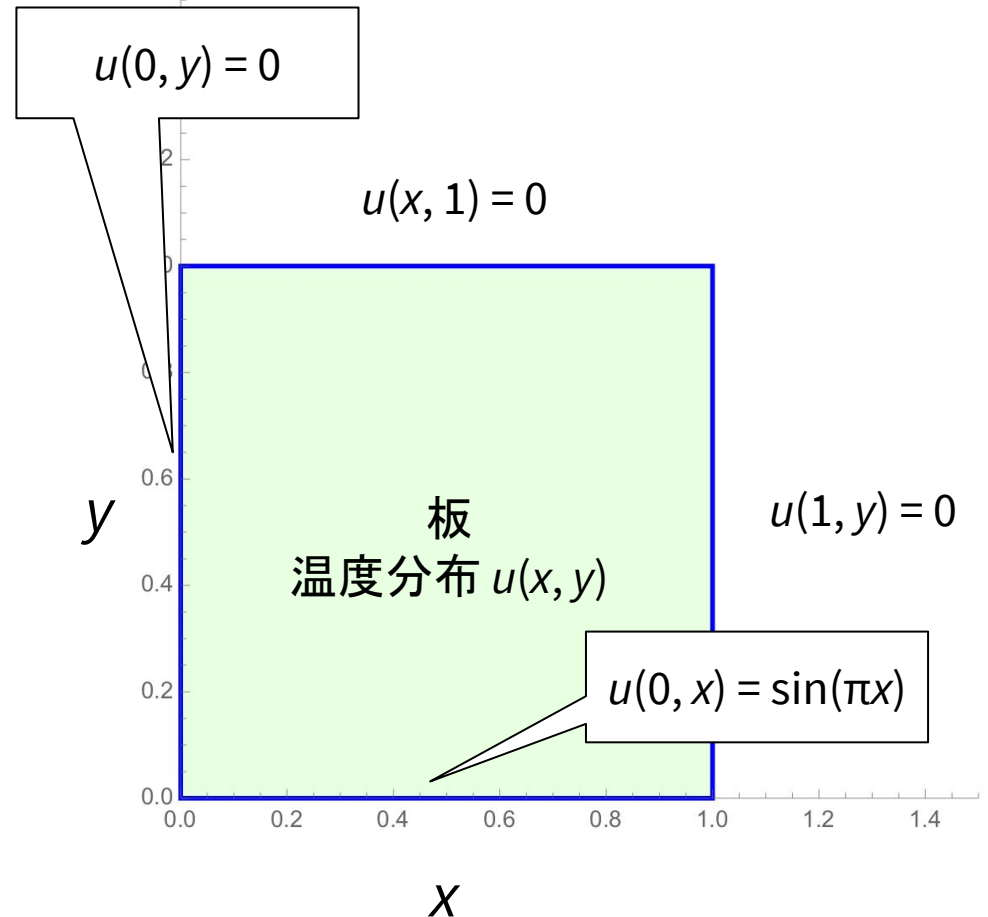
$$u(x, 0) = \sin(\pi x) \quad (0 \leq x \leq 1) \quad (\text{境界条件})$$

$$u(x, 1) = 0 \quad (0 \leq x \leq 1) \quad (\text{境界条件}) \quad (6.7b)$$

$$u(0, y) = u(1, y) = 0 \quad (0 \leq y \leq 1) \quad (\text{境界条件})$$

(3) 板の定常温度分布

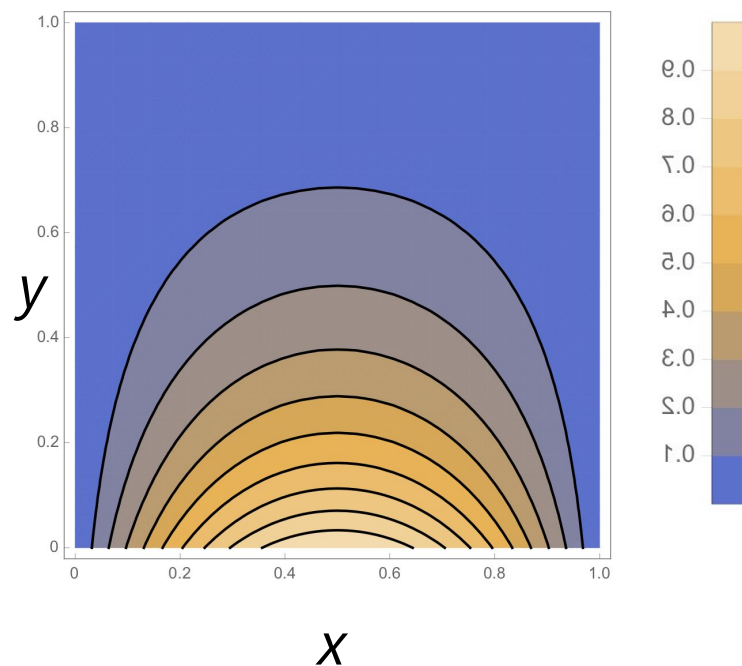
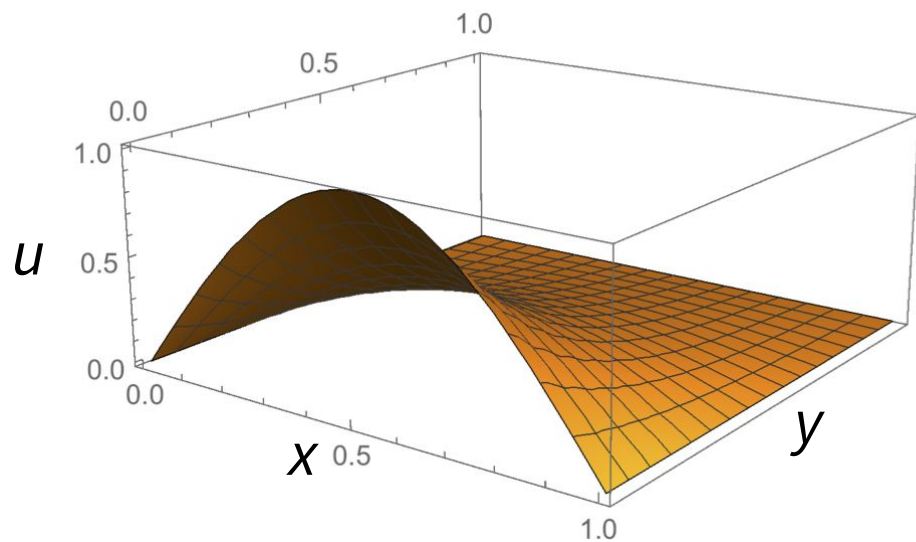
- 正方形の均質な板、1辺の長さが1
- $u(x, y)$: 十分長い時間が経過した後の板の内部の温度分布
- ある時刻での板の周囲の温度分布を固定する: 式 (6.7b)
- 板の周囲では熱が自由に出入りできるものとする



板の定常温度分布の微分解と温度分布

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

温度分布: 3次元グラフ(左) 等高線図(右)



本授業(教科書)で扱う偏微分方程式

1. 放物型
(拡散方程式) $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$
2. 双曲型
(波動方程式) $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ (6.2)
3. 楕円型
(ラプラス方程式) $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$

以下、これら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

式 (6.3) の初期条件をすこし一般化した問題:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (0 < x < 1, \quad t > 0) \quad (6.9a)$$

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

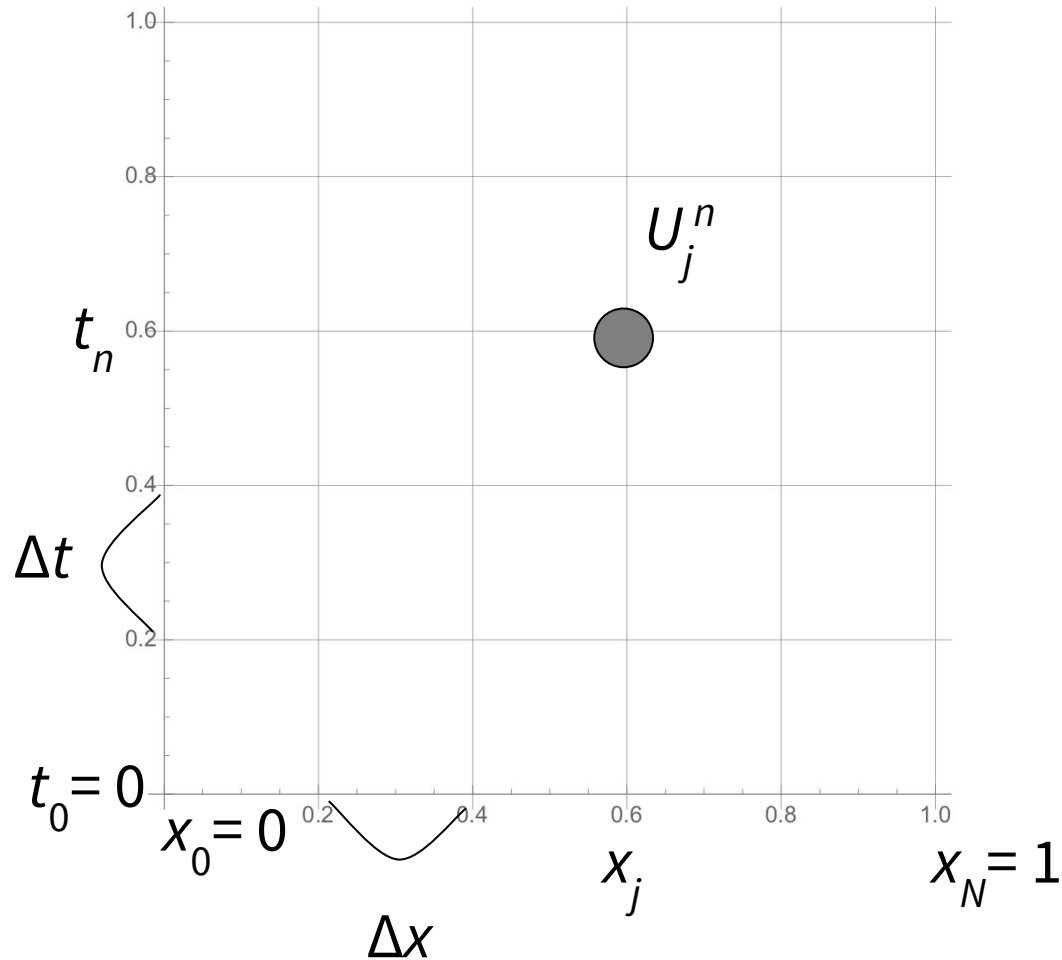
$$u(0, t) = u(1, t) = 0 \quad (t \geq 0) \quad (6.9c)$$

$\phi(x)$ は $\phi(0) = \phi(1) = 0$ を満たす

独立変数に関する格子点の定義

- 空間: x , 時間: t
- $\Delta x, \Delta t$: それぞれ x, t に関する格子点の間隔
- N : x 方向の格子点の個数 ($N \Delta x = 1$)
- $x_j = j \Delta x, t_n = n \Delta t$
- U_j^n : 微分解 $u(x_j, t_n)$ に対応する差分解

独立変数に関する格子点の定義



差分方程式による微分方程式の近似

格子点 (x_j, t_n) における式 (6.9a) の近似

左辺の時間微分の項を前進差分商で近似すると

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

右辺の空間微分の項を式 (5.33c) の2階差分商で近似すると (x に関する対称性を保存する)

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

差分方程式による微分方程式の近似

u を U で置き換えることで得られる差分方程式:

$$\frac{1}{\Delta t}(U_j^{n+1} - U_j^n) = \frac{1}{(\Delta x)^2}(U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n)$$
$$(j = 1, 2, \dots, N-1, n = 0, 1, \dots) \quad (6.12)$$

この式を書き換えると(陽公式)

$$U_j^{n+1} = \alpha U_{j+1}^n + (1 - 2\alpha) U_j^n + \alpha U_{j-1}^n, \quad \alpha = \Delta t / (\Delta x)^2$$
$$(6.13)$$

差分方程式による微分方程式の近似

時刻 t_n での U から次の時刻 t_{n+1} での U を計算:

$$U_j^{n+1} = \alpha U_{j+1}^n + (1 - 2\alpha) U_j^n + \alpha U_{j-1}^n, \quad \alpha = \Delta t / (\Delta x)^2 \quad (6.13)$$

初期条件 (6.9b) \Rightarrow

$$U_j^0 = \phi(x_j) \quad (j = 0, 1, \dots, N) \quad (6.14)$$

境界条件 (6.9c) \Rightarrow

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

拡散方程式のアルゴリズム

- 解を求める時刻の最大値: T
- 解を求める時間の分割数: M
- $\Delta t \leftarrow T/M$

拡散方程式のアルゴリズム

入力: $\phi(x)$ ($0 \leq x \leq 1$): 初期条件,

T : 解を求める時刻, M : 解を求める時間の分割数,

N : 空間 x の区間 $[0, 1]$ の分割数

出力: U_j^T ($j = 0, 2, \dots, N$): $t = T$ における微分方程式
の解 $u(x, t)$ の近似値 (差分方程式 (6.13) の解)

拡散方程式のアルゴリズム (1)

1. $\Delta x \leftarrow 1/N$; $\Delta t \leftarrow T/M$; $\alpha \leftarrow \Delta t/(\Delta x)^2$;
2. for ($j \in [0 .. N]$)
 - a. $U_j^0 \leftarrow \phi(j \Delta x)$;
3. for ($n \in [0 .. M - 1]$)
 - a. for ($j \in [1 .. N - 1]$)
 - i. $U_j^{n+1} \leftarrow \alpha U_{j+1}^n + (1 - 2\alpha) U_j^n + \alpha U_{j-1}^n$
 - b. $U_0^{n+1} \leftarrow 0$; $U_N^{n+1} \leftarrow 0$;
4. return $\{U_0^M, \dots, U_N^M\}$;

拡散方程式のアルゴリズム (1) の改良

- 変数 U_j^{n+1} ($j = 0, 1, \dots, N, n = 0, 1, \dots, M$) をすべて用意している
- ところが、 U_j^{n+1} ($j = 1, 2, \dots, N - 1$) の計算に必要なのは U_j^n ($j = 0, 1, \dots, N$) のみ
- よって、 $n = 0, 1, \dots, M - 1$ に対し、 U_j^n を使い回すことでメモリの使用量を節約する

拡散方程式のアルゴリズム (2)

1. $\Delta x \leftarrow 1/N$; $\Delta t \leftarrow T/M$; $\alpha \leftarrow \Delta t/(\Delta x)^2$;
2. for ($j \in [0 .. N]$)
 - a. $U_j \leftarrow \phi(j \Delta x)$;
3. $\text{new_}U_0 \leftarrow 0$; $\text{new_}U_N \leftarrow 0$;

拡散方程式のアルゴリズム (2)

4. for ($n \in [0 .. M - 1]$)
 - a. for ($j \in [1 .. N - 1]$)
 - i. $\text{new_}U_j \leftarrow \alpha U_{j+1} + (1 - 2\alpha) U_j + \alpha U_{j-1};$
 - b. for ($j \in [0 .. N]$)
 - i. $U_j \leftarrow \text{new_}U_j;$
 5. return $\{U_0, \dots, U_N\};$
- ☞ 陽解法 (explicit method / explicit scheme)

拡散方程式の計算例

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

$$u(x, 0) = 2x(1 - x) \quad (0 \leq x \leq 1) \quad (\text{初期条件}) \quad (6.3b)$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0 \quad (t \geq 0) \quad (\text{境界条件}) \quad (6.3c)$$

拡散方程式の計算例

1. $N = 6$ ($\Delta x = 1/6$), $\Delta t = 1/100$ (図 6-8 (a)):
 - 差分解の振る舞いが微分解に似ている
 - しかし、空間の格子点が粗い
2. $N = 10$ ($\Delta x = 1/10$), $\Delta t = 1/100$ (図 6-8 (b)):
 - 差分解は微分解と異なる挙動を示す

拡散方程式の計算例

1. $N = 10$ ($\Delta x = 1/10$), $\Delta t = 1/500$ (図 6-8 (c)):
 - Δt を小さくした
 - 今度は微分解の振る舞いを正しく反映しているようである

差分方程式の整合性

- Δx と Δt の間に何らかの関係を設けないと、正しい結果が得られないと見られる
- その理由を知るため、差分方程式の導出の段階から点検する

差分方程式の整合性の確認

差分方程式 (6.12) が元の微分方程式 (6.9a) と矛盾しないことを確認する

Taylor の公式を用いて、まず $u(x, t)$ を展開する:

差分方程式の整合性の確認

$$u(x_j, t_n + \Delta t) = u(x_j, t_n) + \Delta t \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) + \frac{(\Delta t)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j, t_n) + O((\Delta t)^3)$$

$$u(x_j \pm \Delta x, t_n) = u(x_j, t_n) \pm \Delta x \frac{\partial u}{\partial x}(x_j, t_n) + \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) + \frac{(\Delta x)^3}{6} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(x_j, t_n) + \frac{(\Delta x)^4}{24} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j, t_n) + \frac{(\Delta x)^5}{120} \frac{\partial^5 u}{\partial x^5}(x_j, t_n) + O((\Delta x)^6) \quad (6.16)$$

差分方程式の整合性の確認

次に、差分方程式 (6.12) の $U_j^n, U_j^{n+1}, U_{j\pm 1}^n$ 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、式 (6.16) を用いて (6.12) の右辺と左辺の差を見積もる:

差分方程式の整合性の確認

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t} \{u(x_j, t_n + \Delta t) - u(x_j, t_n)\} \\ & - \frac{1}{(\Delta x)^2} \{u(x_j + \Delta x, t_n) - 2u(x_j, t_n) + u(x_j - \Delta x, t_n)\} \\ & = \frac{\partial u}{\partial t}(x_j, t_n) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_j, t_n) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x_j, t_n) - \frac{(\Delta x)^2}{2} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(x_j, t_n) \\ & \quad + O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^4) \\ & = \begin{cases} O((\Delta t)) + O((\Delta x)^2) & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \neq 1/6 \\ O((\Delta t)^2) + O((\Delta x)^4) & \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} = 1/6 \end{cases} \end{aligned} \tag{6.17}$$

(u が式 (6.9a) を満たすことを仮定)

差分方程式の整合性の確認

- 式 (6.17) は Δt と $(\Delta x)^2$ を同時に0に近づけると0に収束する
- これだけでは U_j^n が微分解 $u(x_j, t_n)$ に収束することの保証にはならない
- しかし、 $\Delta t, (\Delta x)^2$ を同時に小さくするように格子点を細かくしていけば、式 (6.12) に微分解 u を代入しても近似的に成り立つ。この意味で式 (6.12) は式 (6.9) に矛盾していない

フーリエ分解の方法と安定性の条件

- 図 6-8 (b) のような解の振動や発散を調べるため、フーリエ (Fourier) 分解の方法を差分方程式に適用する
- 式 (6.13) の特殊解として

$$U_j^n = f(n) \exp(i k j \Delta x) \quad (6.18)$$

の形のものを求める (i : 虚数単位、 k : 実数)

フーリエ分解の方法と安定性の条件

式 (6.18) を (6.13) に代入すると

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

$f(0) = 1$ とすると

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

フーリエ分解の方法と安定性の条件

すなわち

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

は、差分方程式式 (6.13) の特殊解

もし、ある k に対して $\left|1 - 4\alpha \sin^2 \frac{k\Delta x}{2}\right| > 1 \quad (6.22)$

であると、時間が進むにつれてその k に対する特殊解の絶対値が指数的に増大 \Rightarrow 発散する

フーリエ分解の方法と安定性の条件

特殊解が発散しないための条件: 任意の k に対し

$$\left| 1 - 4\alpha \sin^2 \frac{k \Delta x}{2} \right| \leq 1 \quad (6.23)$$

これより $\alpha \sin^2(k \Delta x/2) \leq 1/2$

さらに、任意の k に対して (6.23) が成り立つためには

$$\sin^2(k \Delta x/2) \leq 1 \text{ より } \alpha = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2} \quad (6.24)$$

Δx と Δt がこの条件を満たさないと計算が発散

フーリエ分解の方法と安定性の条件

一方で、微分方程式 (6.9a) の特殊解は

$$\exp(-k^2 t + i k x) \quad (k: \text{任意定数})$$

より、時間の経過とともに絶対値は指数的に減少⇒
任意の x で時間の経過とともに解は減衰

よって、条件式 (6.24) が満たされない限り、差分解
は微分解の近似にならなくなる

フーリエ分解の方法と安定性の条件

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

のように、計算が発散しないための Δx や Δt に対する条件は**安定性の条件** (stability condition) と呼ばれる

安定性の条件に関する注意

- 厳密な安定性の条件を導くためには数学的により詳細な議論が必要
- 今回の説明は、フーリエ分解を用いた方法を大まかに示したもの(巻末の参考文献も参照)
- 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が、安定性の条件を導出する方法として、より一般的な他の方法よりも簡単

拡散方程式の差分法のチェックポイント

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 と Δt が安定性の条件を満たしていること

拡散方程式の差分法のチェックポイント: 注意点

- これらのチェックポイントは差分解が微分解の適切な近似になっていることの**必要条件**であり、 $\Delta x, \Delta t \rightarrow 0$ のときに差分解が微分解に収束することの証明にはならない
- しかし、これら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有効

6-3 陰公式

陽公式の問題点

- 陽公式で計算を安定に進めるためには、 Δx と Δt が安全性の条件 (6.24) を満たす必要がある
- しかし、安全性の条件 (6.24) は計算量の点で問題がある

陽公式の問題点: 計算例

- 時刻 0 から 1 まで差分解を計算する
- 時間方向の格子点の総数: $1/\Delta t$
- 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
- 安全性の条件 (6.24) から $\Delta t \simeq \frac{1}{2}(\Delta x)^2$ (6.25) とする

陽公式の問題点: 計算例

- 一方、空間に関する分解能も高めたい
- そこで、 Δx を $1/10$ 倍に小さくしたとする
- すると、 Δt は式 (6.25) より $1/100$ 倍に小さくしなければならない $\Rightarrow t$ の格子点数が 100 倍に増加する
- t の格子点数の増加率が x の格子点数の増加率の 2 乗に比例する

陰公式

差分方程式

$$\frac{1}{\Delta t}(U_j^{n+1} - U_j^n) = \frac{1}{(\Delta x)^2}(U_{j+1}^n - 2U_j^n + U_{j-1}^n)$$
$$(j = 1, 2, \dots, N-1, n = 0, 1, \dots) \quad (6.12)$$

の右辺の n をすべて $n+1$ で置き換えると

$$\frac{1}{\Delta t}(U_j^{n+1} - U_j^n) = \frac{1}{(\Delta x)^2}(U_{j+1}^{n+1} - 2U_j^{n+1} + U_{j-1}^{n+1})$$
$$(j = 1, 2, \dots, N-1, n = 0, 1, \dots) \quad (6.26)$$

陰公式

式 (6.26) を整理すると、 $\alpha = \Delta t / (\Delta x)^2$ として

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

を得る (境界条件より $U_0^n = U_N^n = 0$ ($n = 0, 1, \dots$))

式 (6.27) をある n で各 j について並べると、

$U_1^{n+1}, \dots, U_{N-1}^{n+1}$ に関する連立1次方程式を得る:

陰公式

- 連立1次方程式 (6.28) の係数行列は3重対角行列 ⇨ 計算量: $O(N)$
- 陽公式に比べて計算の手間は増すが、だいたい定数倍の手間

拡散方程式のアルゴリズム (2) 陰公式版

1. $\Delta x \leftarrow 1/N$; $\Delta t \leftarrow T/M$; $\alpha \leftarrow \Delta t/(\Delta x)^2$;
2. for ($j \in [0 .. N]$)
 - a. $U_j \leftarrow \phi(j \Delta x)$;
3. $\text{new}_U_0 \leftarrow 0$; $\text{new}_U_N \leftarrow 0$;

拡散方程式のアルゴリズム (2) 陰公式版

4. for ($n \in [0 .. M - 1]$)

a. 連立1次方程式 (6.28) を解く

b. for ($j \in [0 .. N]$)

i. $U_j \leftarrow \text{new_}U_j$;

5. return $\{U_0, \dots, U_N\}$;

☞ 陰解法 (implicit method / implicit scheme)