拡散方程式の数値積分 [改訂版]
—陽公式、陰公式—

1 拡散方程式

微分方程式の一つである**拡散（熱伝導）方程式 (diffusion equation)**

$$\frac{\partial y}{\partial t} = f(x,y)\frac{\partial^2 y}{\partial x^2}$$

の数値積分の例として、最も簡単な拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{1}$$

を適当な初期条件の許で積分して、関数 $u(x,t)$ を求めることを考える。ここで、時間 t も空間 x も適当に無次元化されているものとする。

空間の積分領域は x について

$$0 \le x \le 1 \tag{2}$$

とし、初期条件は適当な関数 $\Phi(x)$ を用いて v

$$u(x, t=0) = \Phi(x) \tag{3}$$

で与えられるものとする。境界条件として任意の時刻 t で

$$u(x=0,t) = u(x=1,t) = 0 \tag{4}$$

が成り立っているものとする。

2 陰公式 (implicit formula)

数値積分を実行する為に拡散方程式を差分化する必要がある。差分化にはいろいろな方法があるが、ここでは数値的な安定性を考えて、**陰公式 (implicit formula)** を用いることにする。空間座標 x について J 等分する。従って、隣り合う二点間の間隔は $\Delta x = 1/J$ で与えられる。積分するときの時間間隔を Δt として、時刻 $t^n = t^0 + n\Delta t$ に於ける場所 $x_j = x_0 + j\Delta x$ での解を

$$U_j^n = u\left(x_j = x_0 + j\Delta x, t^n = t^0 + n\Delta t\right) \tag{5}$$

と表すことにする。ここでは $x_0 = 0\, t^0 = 0$ とする。(1) の差分化の一案として

$$\begin{aligned}\frac{U_j^{n+1}-U_j^n}{\Delta t} &= p\frac{1}{\Delta x}\left(\frac{U_{j+1}^{n+1}-U_j^{n+1}}{\Delta x}-\frac{U_j^{n+1}-U_{j-1}^{n+1}}{\Delta x}\right)+(1-p)\frac{1}{\Delta x}\left(\frac{U_{j+1}^{n}-U_j^{n}}{\Delta x}-\frac{U_j^{n}-U_{j-1}^{n}}{\Delta x}\right)\\ &= p\frac{U_{j+1}^{n+1}-2U_j^{n+1}+U_{j-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2}+(1-p)\frac{U_{j+1}^{n}-2U_j^{n}+U_{j-1}^{n}}{(\Delta x)^2}\end{aligned} \tag{6}$$

と書く。ここで $0 \le p \le 1$ とする。(6) は

$$\alpha = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \tag{7}$$

を用いて、

$$-\alpha p U_{j+1}^{n+1} + (1+2\alpha p)U_j^{n+1} - \alpha p U_{j-1}^{n+1} = V_j^n \equiv \alpha q U_{j+1}^n + (1-2\alpha q)U_j^n + \alpha q U_{j-1}^n \tag{8}$$

と変形できる。ここで $q = 1 - p$ である。これを連立一次方程式と考えて、大きな行列を使って表せば、(8) の左辺は

$$\begin{pmatrix} 1+2\alpha p & -\alpha p & & & & 0 \\ -\alpha p & 1+2\alpha p & -\alpha p & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -\alpha p & 1+2\alpha p & -\alpha p \\ 0 & & & & -\alpha p & 1+2\alpha p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ U_{J-2}^{n+1} \\ U_{J-1}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_1^n \\ V_2^n \\ \vdots \\ \vdots \\ V_{J-2}^n \\ V_{J-1}^n \end{pmatrix} \tag{9}$$

となり、右辺は

$$\begin{pmatrix} V_1^n \\ V_2^n \\ \vdots \\ \vdots \\ V_{J-2}^n \\ V_{J-1}^n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-2\alpha q & \alpha q & & & & 0 \\ \alpha p & 1-2\alpha q & \alpha q & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \alpha q & 1-2\alpha q & \alpha q \\ 0 & & & & \alpha q & 1-2\alpha q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1^n \\ U_2^n \\ \vdots \\ \vdots \\ U_{J-2}^n \\ U_{J-1}^n \end{pmatrix} \tag{10}$$

と書くことができる。V_j^n は U_j^n が与えられれば簡単に計算できる。(9) と (10) は、形式的に $A\vec{U}^{n+1} = \vec{V}^n$ と $\vec{V}^n = B\vec{U}^n$ と書くことができる。$\vec{V}^n$ は $\vec{U}^n$ が与えられれば簡単に求められるので、原理的には連立一次方程式 $A\vec{U}^{n+1} = \vec{V}^n$ を、行列 A の逆行列を用いて $\vec{U}^{n+1} = A^{-1}\vec{V}^n = A^{-1}B\vec{U}^n$ として解けばよいことになる。これはつまり初期条件 $\vec{U}^n$ が与えられれば $\vec{U}^{n+1}$ が求められることを意味している。

3 陰公式の具体例

3.1 p=1 の場合

陰公式で最も扱いやすいのは $p = 1$ としたときで、(8) は

$$-\alpha U_{j-1}^{n+1} + (1+2\alpha)U_j^{n+1} - \alpha U_{j+1}^{n+1} = U_j^n \tag{11}$$

と書き換えることができ、(9) と (10) は

$$\begin{pmatrix} 1+2\alpha & -\alpha & & & & 0 \\ -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -\alpha & 1+2\alpha & -\alpha \\ 0 & & & & -\alpha & 1+2\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ U_{J-2}^{n+1} \\ U_{J-1}^{n+1} \end{pmatrix} \equiv C \begin{pmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ U_{J-2}^{n+1} \\ U_{J-1}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_1^n \\ U_2^n \\ \vdots \\ \vdots \\ U_{J-2}^n \\ U_{J-1}^n \end{pmatrix} \tag{12}$$

と書けるので、時刻 t^n での U_j^n が $j=1$ から $j=J-1$ まで与えられたとすれば、(12) の両辺に大きな行列 C の逆行列を掛けてやれば、時刻 t^{n+1} での U_j^{n+1} が求められることになる。ここで、境界条件 (4) は $U_0^n=0$、$U_J^n=0$ として表している。

大きな行列の逆行列を求めるのは一般には必ずしも容易ではないし、行列 C の様に帯対角成分以外は零であるような行列をそのままひっくり返すのは、経済的にも余り良い方法であるとは言えない。ここでは行列 C が三重対角行列となっているので、漸化式 (11) を用いて解くことを考える。

(11) は形式的に

$$P_jU_{j-1}^{n+1}+Q_jU_j^{n+1}+R_jU_{j+1}^{n+1}=U_j^n \tag{13}$$

と書ける。ここで

$$P_j=-\alpha,\quad Q_j=1+2\alpha,\quad R_j=-\alpha \tag{14}$$

であり、

$$P_1=0,\quad R_{J-1}=0 \tag{15}$$

とした。(13) に於いて、 $j=1$ と $j=2$ とした二つの式を使って U_1^{n+1} を消去すれば、

$$\left(Q_2-\frac{P_2R_1}{Q_1}\right)U_2^{n+1}+R_2U_3^{n+1}=U_2^n-\frac{P_2U_1^n}{Q_1} \tag{16}$$

となり、または

$$\tilde{Q}_2U_2^{n+1}+R_2U_3^{n+1}=\tilde{U}_2^n \tag{17}$$

を得る。ここで

$$\tilde{Q}_2=Q_2-\frac{P_2R_1}{Q_1},\quad \tilde{U}_2^n=U_2^n-\frac{P_2U_1^n}{Q_1} \tag{18}$$

である。これと、(13) の $j=3$ とした式とを使って今度は U_2^{n+1} を消去すれば

$$\tilde{Q}_3U_3^{n+1}+R_3U_4^{n+1}=\tilde{U}_3^n \tag{19}$$

を得る。ここで

$$\tilde{Q}_3=Q_3-\frac{P_3R_2}{\tilde{Q}_2},\quad \tilde{U}_3^n=U_3^n-\frac{P_3\tilde{U}_1^2}{\tilde{Q}_2} \tag{20}$$

である。同様の操作を繰り返せば

$$\tilde{Q}_jU_j^{n+1}+R_jU_{j+1}^{n+1}=\tilde{U}_j^n \tag{21}$$

$$\tilde{Q}_j=Q_j-\frac{P_jR_{j-1}}{\tilde{Q}_{j-1}},\quad \tilde{U}_j^n=U_j^n-\frac{P_j\tilde{U}_{j-1}^n}{\tilde{Q}_{j-1}} \tag{22}$$

を得る。これを $j=J-2$ まで繰り返せば

$$\tilde{Q}_{J-2}U_{J-2}^{n+1}+R_{J-2}U_{J-1}^{n+1}=\tilde{U}_{J-2}^n \tag{23}$$

となるが、これと (13) で $j=J-1$ とした式

$$P_{J-1}U_{J-2}^{n+1}+Q_{J-1}U_{J-1}^{n+1}=U_{J-1}^n \tag{24}$$

とを連立させて解けば、

$$\tilde{Q}_{J-1}U_{J-1}^{n+1}=\tilde{U}_{J-1}^n\quad \therefore\ U_{J-1}^{n+1}=\frac{\tilde{U}_{J-1}^n}{\tilde{Q}_{J-1}} \tag{25}$$

を得る。このように求められた U_{J-1}^{n+1} と漸化式 (21) とを使えば、

$$U_j^{n+1}=\frac{\tilde{U}_j^n-R_jU_{j+1}^{n+1}}{\tilde{Q}_j} \tag{26}$$

より、 $j=J-2$ **から** $j=1$ **までの** U_j^{n+1} を求めることができる。

3.2　p=0.5 の場合 (Crank-Nicolson の公式)

$p = 0.5$ としてもやはり陰公式を与える。これは **Crank-Nicolson の公式**として知られている。$p = 0.5$ としたとき、(8) は

$$-0.5\alpha U_{j-1}^{n+1} + (1+\alpha)U_j^{n+1} - 0.5\alpha U_{j+1}^{n+1} = V_j^n = 0.5\alpha U_{j-1}^n + (1-\alpha)U_j^n + 0.5\alpha U_{j+1}^n \tag{27}$$

と書き換えることができ、(9) と (10) は

$$\begin{pmatrix} 1+\alpha & -\alpha/2 & & & & 0 \\ -\alpha/2 & 1+\alpha & -\alpha/2 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -\alpha/2 & 1+\alpha & -\alpha/2 \\ 0 & & & & -\alpha/2 & 1+\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ U_{J-2}^{n+1} \\ U_{J-1}^{n+1} \end{pmatrix} \equiv C' \begin{pmatrix} U_1^{n+1} \\ U_2^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ U_{J-2}^{n+1} \\ U_{J-1}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} V_1^n \\ V_2^n \\ \vdots \\ \vdots \\ V_{J-2}^n \\ V_{J-1}^n \end{pmatrix} \tag{28}$$

と書けるので、時刻 t^n での V_j^n が $j = 1$ から $j = J-1$ まで与えられたとすれば、(28) の両辺に大きな行列 C' の逆行列を掛けてやれば、時刻 t^{n+1} での U_j^{n+1} が求められることになる。$p = 1$ のときと同様に (27) は形式的に

$$P'_j U_{j-1}^{n+1} + Q'_j U_j^{n+1} + R'_j U_{j+1}^{n+1} = V_j^n \tag{29}$$

と書ける。ここで

$$P'_j = -\frac{\alpha}{2}, \quad Q'_j = 1+\alpha, \quad R'_j = -\frac{\alpha}{2} \tag{30}$$

であり、

$$P'_1 = 0, \quad R'_{J-1} = 0 \tag{31}$$

とした。以下も同様な議論により

$$\tilde{Q}'_j U_j^{n+1} + R'_j U_{j+1}^{n+1} = \tilde{V}_j^n \tag{32}$$

$$\tilde{Q}'_j = Q'_j - \frac{P'_j R'_{j-1}}{\tilde{Q}'_{j-1}}, \quad \tilde{V}_j^n = V_j^n - \frac{P'_j \tilde{V}_{j-1}^n}{\tilde{Q}'_{j-1}} \tag{33}$$

$$\tilde{Q}'_{J-1} U_{J-1}^{n+1} = \tilde{V}_{J-1}^n \quad \therefore\ U_{J-1}^{n+1} = \frac{\tilde{V}_{J-1}^n}{\tilde{Q}'_{J-1}} \tag{34}$$

を得る。このように求められた U_{J-1}^{n+1} と漸化式 (32) とを使えば、

$$U_j^{n+1} = \frac{\tilde{V}_j^n - R'_j U_{j+1}^{n+1}}{\tilde{Q}'_j} \tag{35}$$

より、 $j = J-2$ **から** $j = 1$ **までの** U_j^{n+1} を求めることができる。尚、V_j^n は (27) 右辺より

$$V_j^n = 0.5\alpha U_{j+1}^n + (1-\alpha)U_j^n + 0.5\alpha U_{j-1}^n \tag{36}$$

で与えられる。

4　陽公式 (explicit formula)

陰公式で $p = 0$ とすれば**陽公式 (explicit formula)** が得られる。このとき、新しい時刻に於ける量を求めるのに連立一次方程式を解く必要が無く、より簡単である。しかしながら、安定な解を求めるための条件が

きつくなり、一般に

$$\alpha = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \le \frac{1}{2} \tag{37}$$

を満たすように、Δt と Δx とを選ぶ必要がある。

5 陰公式、陽公式のの安定性

$p = 0$ の場合 (37) を満たすように、Δt と Δx とを選ぶ必要があるが、$p = 1, 0.5$ の場合はその必要はない。この性質を無条件安定という。この場合には、安定性ではなくて計算精度の観点から Δt を決められることになる。

陰解法は無条件安定であるが、時間刻みを大きくとれるとなると、今度は計算精度のが問題となってくる。$p = 1$ のとき空間方向の微分は二次精度で、テイラー展開の二次の項までが正しく入っているのに対し、時間微分は一次精度にしかなっていない。

この時間に対する精度をあげる一つの方法が Crank-Nicolson 法である。これは時間方向に対称な形になっている為、時間方向も二次精度にすることができる。

6 拡散方程式の解析解

偏微分方程式 (1) は解析的に容易に解くことができる。解を境界条件を考慮して

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n(t) \sin(n\pi x) \tag{38}$$

とフーリエ級数展開した表すことができる。これを (1) に代入すれば

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{dA_n(t)}{dt} \sin(n\pi x) = -\sum_{n=1}^{\infty} (n\pi)^2 A_n \sin(n\pi x)$$

となり、

$$\frac{dA_n(t)}{dt} = -(n\pi)^2 A_n \tag{39}$$

を得る。これは簡単に積分できて

$$A_n(t) = A_n^0 \exp\left[-(n\pi)^2 t\right] \tag{40}$$

が得られる。ここで $A_n^0 = A_n(t = 0)$ は初期条件によって決まる量である。従って、(40) を (38) に代入して、解は形式的に

$$u(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n^0 \exp\left[-(n\pi)^2 t\right] \sin(n\pi x) \tag{41}$$

で与えられることになる。また初期条件

$$u(x, t = 0) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n^0 \sin(n\pi x) = \Phi(x) \tag{42}$$

より、係数 S_n^0 は、

$$A_n^0 = 2 \int_0^1 \Phi(x) \sin(n\pi x)\, dx \tag{43}$$

で与えられる。

6.1　例壱（p=1.0）

初期条件が $\Phi(x) = \sin(\pi x)$ のときの解析解

$$u(x,t) = \exp\left[-\pi^2 t\right]\sin(\pi x)$$

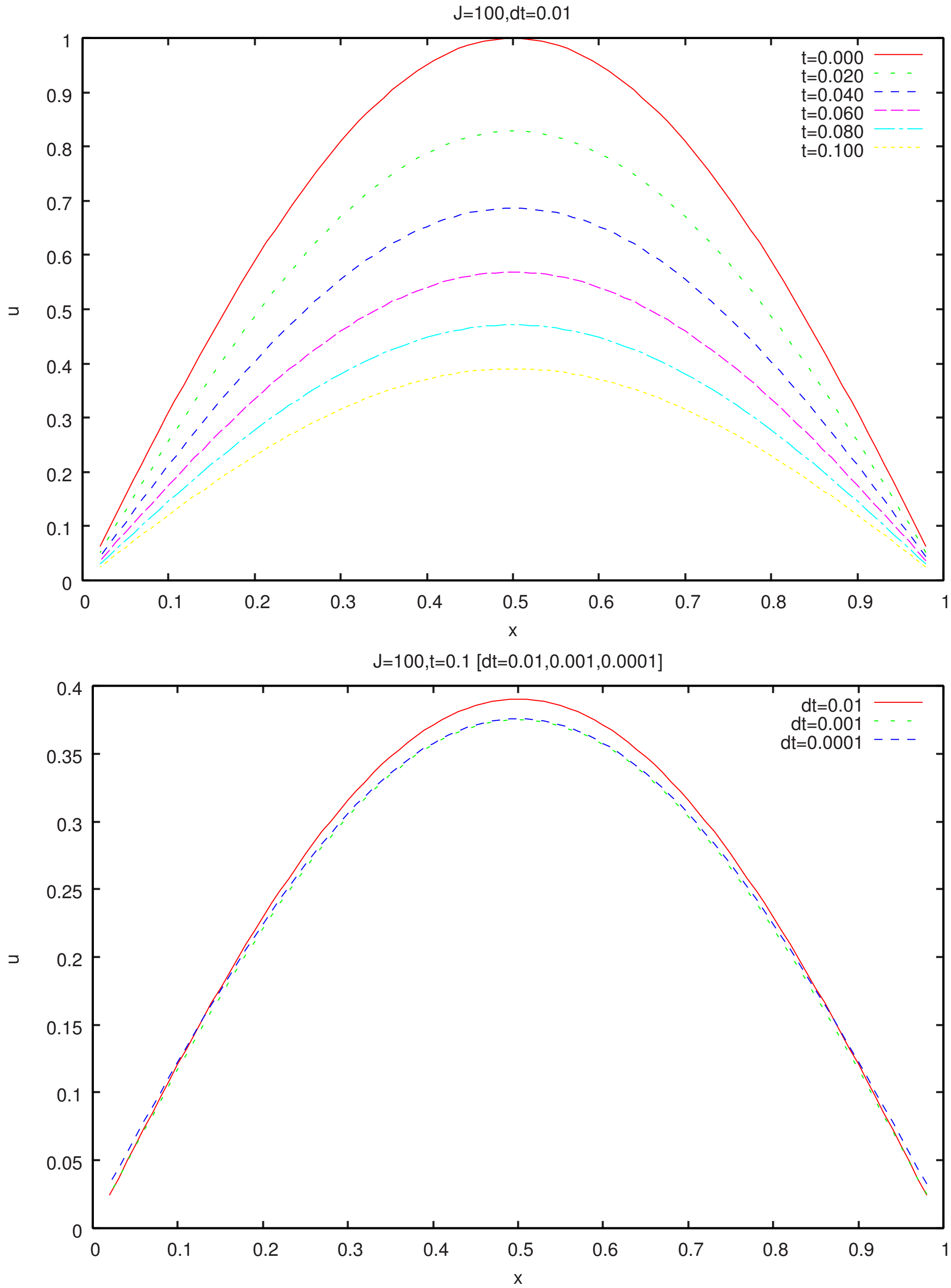

図 1　$\Phi(x) = \sin(\pi x)$, $J = 100, t = 0.1, p = 1.0$

6.2　例式（p=0.5、Crank-Nicolson の公式）

初期条件が $\Phi(x) = \sin(\pi x)$ のときの解析解

$$u(x,t) = \exp\left[-\pi^2 t\right]\sin(\pi x)$$

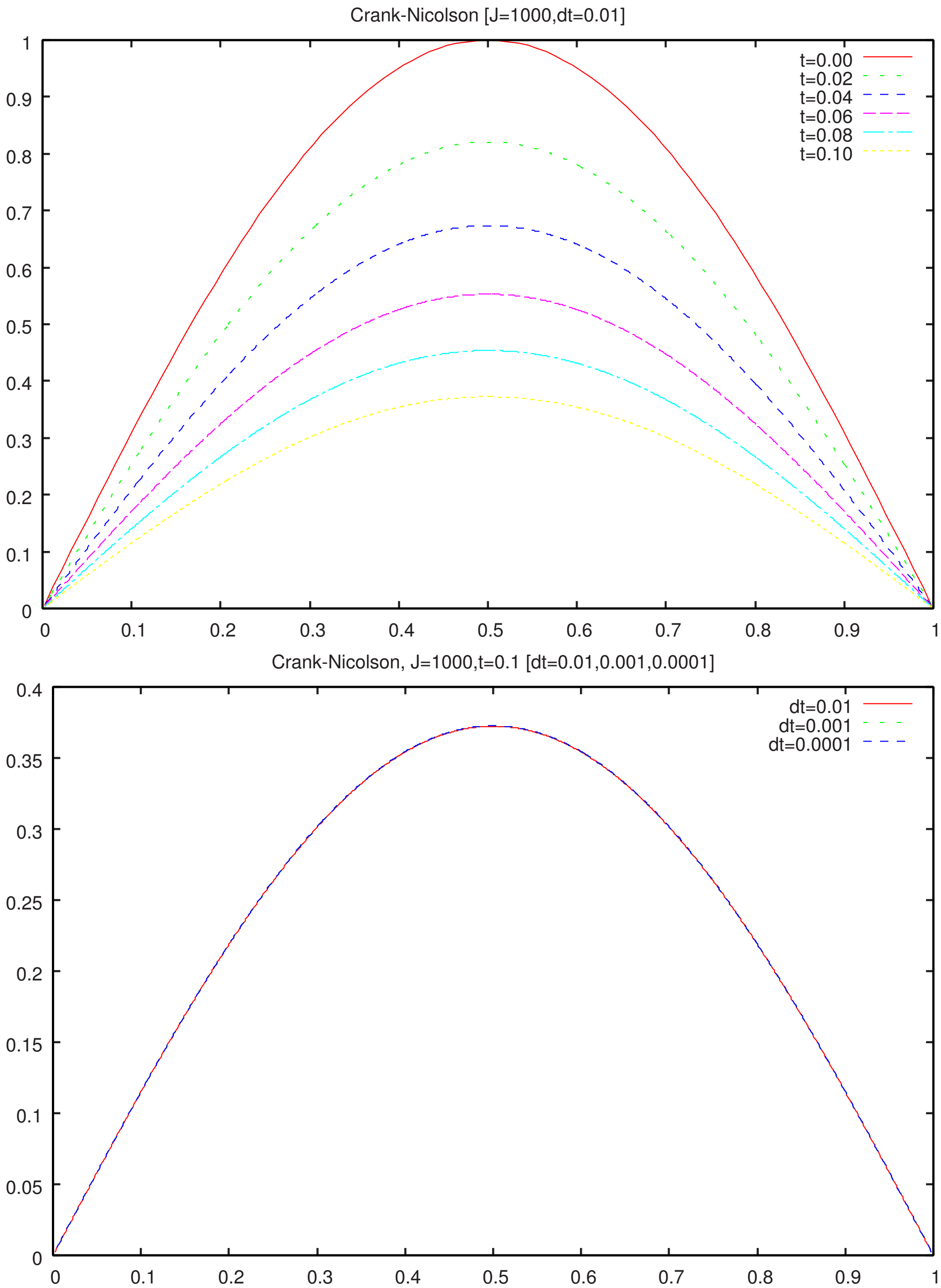

図 2　$\Phi(x) = \sin(\pi x)$, $J = 100, t = 0.1, p = 0.5$

7 解析解と数値解の比較

初期条件が $\Phi(x) = \sin(\pi x)$ のときの解析解

$$u(x,t) = \exp\left[-\pi^2 t\right]\sin(\pi x)$$

と、数値解 (Crank-Nicolson の公式使用) との比較を以下に載せる。

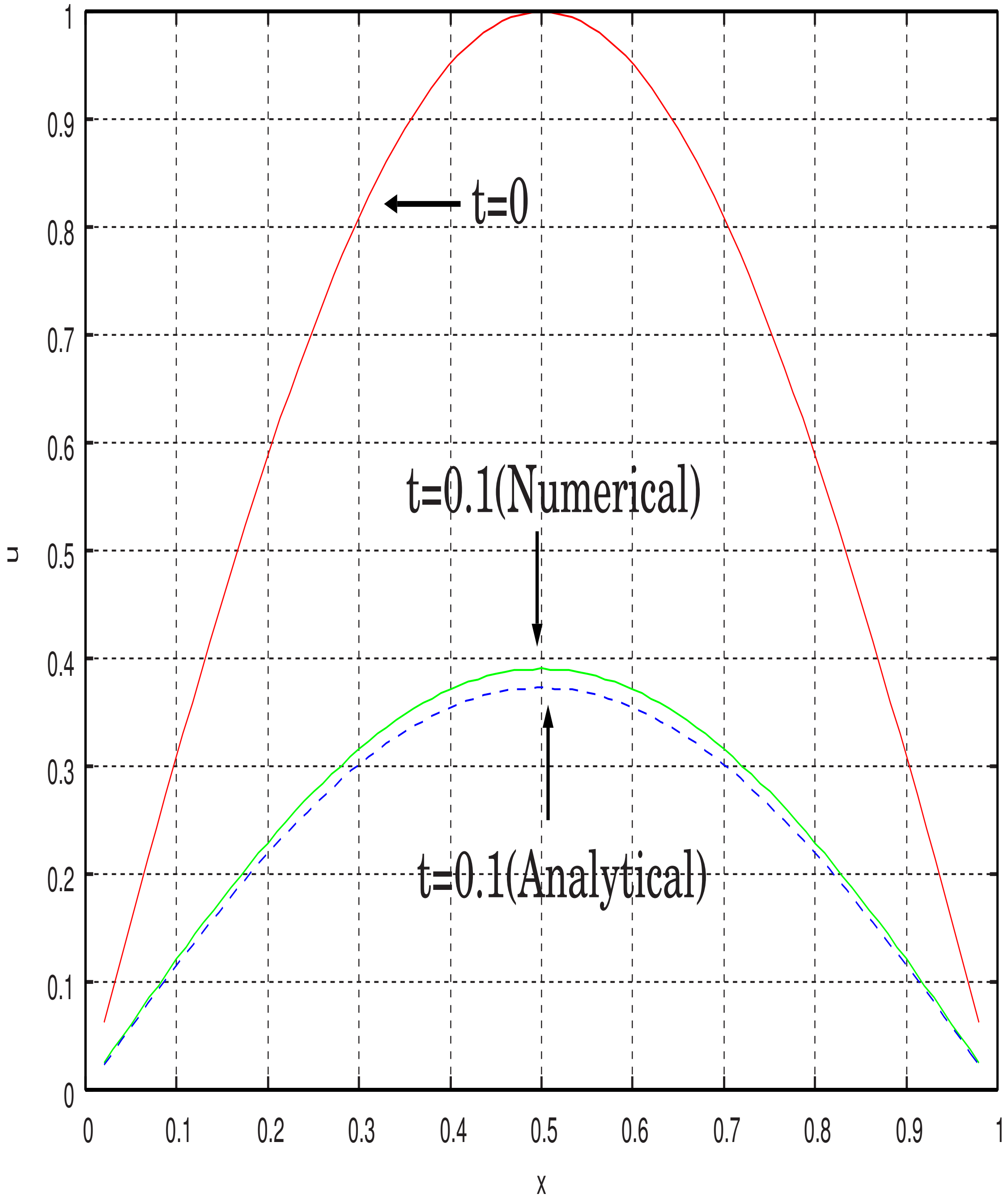

図 3　$\Phi(x) = \sin(\pi x)$, $\Delta t = 0.01$, $\Delta x = 0.01$, $\alpha = 10^2$