数値解析（松尾）　資料　　2012年1月25日

1　問題の定義

１階の波動方程式（移流方程式）の初期値境界値問題：

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial u}{\partial x}, & 0 < x < L, \\ u(x,0) = u_0(x), & 0 \le x < L, \\ u(0,t) = u(L,t), & t > 0 \end{cases} \tag{P}$$

を考えよう．この種の境界条件を「周期的境界条件」と呼び，区間 $[0, L]$ の解が，実軸全体で繰り返し現れることを意味する．この解析解は，$u((x+t) - [(x+t)/L]L) = u_0(x)$．ただし $[\cdot]$ は Gauss の記号で，整数部分の打ち切りを表す．$(x+t) - [(x+t)/L]L$ は，$x+t$ を，周期性を考えて区間 $[0, L)$ に丸めたものになっていることに注意.

2　差分スキームの導出

講義で説明した「線の方法」で，この差分スキームを導出してみよう．まず

$$\frac{\partial u}{\partial x} \simeq \frac{u(x+\Delta x) - u(x)}{\Delta x}$$

と近似すると，問題 (P) は常微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}u_k}{\mathrm{d}t} = \frac{u_{k+1}(t) - u_k(t)}{\Delta x}, \qquad k = 0, \ldots, N-1,\ t > 0 \tag{O}$$

になる．ただし $\Delta x = L/N$（N は空間離散化点数）を空間刻み幅とし，解を $u(t, k\Delta x) \simeq u_k(t)$ $(k = 0, \ldots, N)$ と近似した．このとき周期的境界条件は

$$u_0(t) = u_N(t), \qquad t > 0, \tag{BC}$$

つまり実質的未知数は $k = 0, \ldots, N-1$ であることに注意しよう．

次に，ODE (O) を時間方向にも離散化する．たとえば陽的 Euler 法を採用すると，スキーム：

$$\frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} = \frac{U_{k+1}^{(m)} - U_k^{(m)}}{\Delta x}, \qquad k = 0, \ldots, N-1,\ m = 0, 1, \ldots \tag{EE}$$

を得る．ただし $u(m\Delta t, k\Delta x) \simeq U_k^{(m)}$ とおいた．解ベクトル $\boldsymbol{U}^{(m)} = (U_0^{(m)}, \ldots, U_{N-1}^{(m)})^{\mathrm{T}}$ を用いて (EE) を行列ベクトル表現に直すと,

$$\boldsymbol{U}^{(m+1)} = (I + rF)\boldsymbol{U}^{(m)}, \qquad m = 0, 1, 2, \ldots. \tag{EE'}$$

ただし

$$F = \begin{pmatrix} -1 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 1 \\ 1 & & & -1 \end{pmatrix}$$

は，１階の（前進）差分作用素に対応する，微分を表す N 次行列であり，$r = \Delta t/\Delta x$ とおいた.

3　陽的 Euler スキームの安定性

行列 $(I + rF)$ の固有値は明示的に求められ，

$$\lambda_j = 1 - r + r \exp\left(\left(\frac{2\pi \mathrm{i}(N-1)}{N}\right) j\right), \qquad j = 0, \dots, N-1.$$

差分スキーム (EE') の安定性を考えは，この大きさで決まる．次の補題は証明は容易である．

補題 1 $r > 0$ とする．このとき

$$\text{任意の } z \in \{z \,|\, |z| = 1\} \text{ に対して } |1 + r(z-1)| \leq 1 \quad \Leftrightarrow \quad r \leq 1.$$

したがって，スキーム (EE') が安定になるための十分条件は $r = \Delta t/\Delta x \leq 1$．実はこれは必要条件でもある．この条件は波動型方程式の陽的解法でよく現れる安定性条件で，発見者の名前をとって CFL 条件（Courant–Friedrichs–Lewy 条件）と呼ばれる．

4　数値例

スキーム (EE) の数値例を示す．パラメータとして $L = 2, N = 50, T = 4$ を固定し，$M = 100, 80$ （それぞれ $r = \Delta t/\Delta x = 1.0, 1.25$）の場合の図を下に示す．

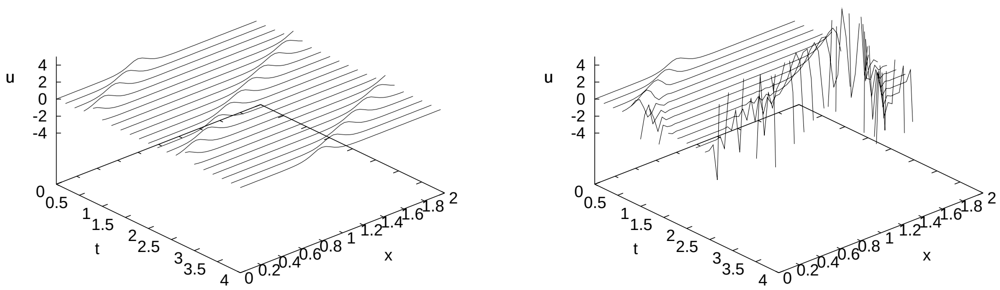

図 1: 陽的スキームの計算例：(左）$r = 1.0$, (右）$r = 1.25$

図 1 の左側の図は $r = 1$ の場合で，安定に計算できている．冒頭に述べたとおり，これは波動が形を保ったまま伝播していく方程式であり，実際に図でも波が一方向に進み，周期的境界条件によりぐるぐると回っている．しかしひとたび r が 1 を超えると，スキームはたちまち不安定になってしまう（図 1 の右図を参照）．ある程度は波の伝播が見られるが，途中から不安定性により解は壊れて，発散してしまう．ただし，いまは u 軸を $[-5, 5]$ で打ち切って描画しており，その範囲外に出た部分は表示されていない．

5　その他のスキームの例

他にもスキームとしては色々なものが考えられる．たとえば陰的 Euler スキーム：

$$\frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} = \frac{U_{k+1}^{(m+1)} - U_k^{(m+1)}}{\Delta x}, \qquad k = 0, \dots, N-1,\ m = 0, 1, \dots, \tag{IE}$$

および，陽的だが空間微分の処理を少し変えた

$$\frac{U_k^{(m+1)} - U_k^{(m)}}{\Delta t} = \frac{U_k^{(m)} - U_{k-1}^{(m)}}{\Delta x}, \qquad k = 0, \dots, N-1,\ m = 0, 1, \dots \tag{EE2}$$

など．それぞれベクトル表示は

$$(I - rF)\boldsymbol{U}^{(m+1)} = \boldsymbol{U}^{(m)}, \qquad m = 0, 1, 2, \ldots, \tag{IE'}$$

および

$$\boldsymbol{U}^{(m+1)} = (I + r\tilde{F})\boldsymbol{U}^{(m)}, \qquad m = 0, 1, 2, \ldots, \tag{EE2'}$$

ただし

$$\tilde{F} = \begin{pmatrix} 1 & & & -1 \\ -1 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

は (EE2) の差分作用素（後退差分作用素）に対応する行列である．(IE') は，$(I - rF)$ を係数行列とする連立一次方程式を解かなければならない点に注意しよう．(EE2') は陽的であり方程式を解く必要はない．

安定性を考えよう．(IE') に現れる係数行列 $(I - rF)$ の固有値は

$$\lambda_j = 1 + r - r\exp\left(\left(\frac{2\pi\mathrm{i}(N-1)}{N}\right)j\right), \qquad j = 0, \ldots, N-1.$$

任意の z $(|z| = 1)$ に対して，$r > 0$ の値によらず常に $|1 + r(1 - z)| \geq 1$ であるから，$(I - rF)^{-1}$ の絶対値最大固有値は 1 を超えない．したがって，(IE) は $r = \Delta t/\Delta x$ の値によらず安定である．一方，(EE2') に現れる行列 $(I + r\tilde{F})$ の固有値も上と同じである．ゆえに (EE2) は r によらず常に不安定である．

数値例を示す．まず図 2 は，(IE) による計算例で，それぞれ $M = 100, 60$（$r = 1.0, 1.67$ に相当）としたもの．このスキームは非常に安定性が強いが，反面，解をおさえこむ作用が強すぎて，解はつぶれていなくなってしまう．しかし陽的スキームの安定性限界 $r = 1.0$ を超えても不安定性は起こらない．このように一般に陰的スキームは非常に安定であるが，連立方程式を解く手間が増えるほか，強い安定性により解がつぶされる現象もまま見られるため，一長一短がある．次に図 3 に，(EE2) による計算結果を示す．それぞれ $M = 100, 1000$（$r = 1.0, 0.1$ に相当）ととった．理論的に予測されるように，これは非常に不安定であり使い物にならない．(EE) の安定性限界である $r = 1.0$ よりもはるかに小さな r を選んでいるが，それでもあっという間に解は発散して壊れてしまう．

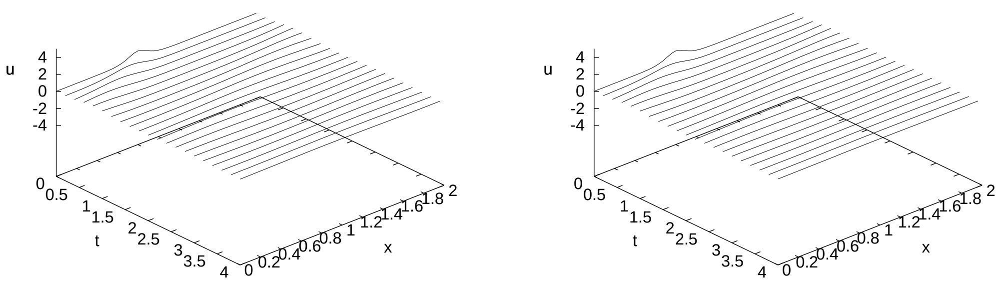

図 2: 陰的スキームの計算例：（左）$r = 1.0$,（右）$r = 1.67$

6　おわりに

以上，簡単な移流方程式 (P) を例題に，いくつかの差分スキームの性質を理論的・数値的に見てきた．ここで示したスキームはどれもよく似ており，$\Delta t, \Delta x \to 0$ でもとの微分方程式に収束するが，離散系での振

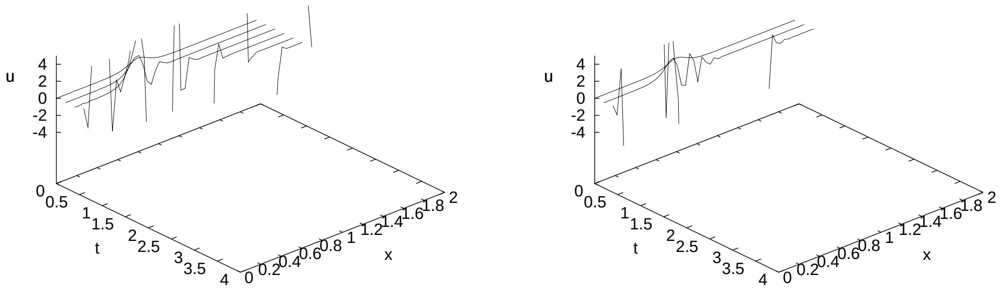

図 3: (EE2) の計算例: （左）$r = 1.0$,（右）$r = 0.1$

る舞いは大きく異なる．差分法は，微分を差分で置き換えるだけで計算公式（スキーム）が得られるため，数値計算の初心者にも簡便な方法であるが，わずかなスキーム形の違いがこのような重大な差異を生むため，実際の計算は想像以上にむつかしい．現在は，解こうとする方程式の型（楕円，放物，双曲）ごとに基本的なテクニックの蓄積が知られているため，初心者が数値計算を行うときは，そういったテクニックを本で参照した上で，それでもなお困った点は数値計算の専門家に相談するのが良い．