第７章　偏微分方程式の解法（I）

２階の偏微分方程式は物理・工学の様々な分野で現れ，応用上重要である。本章では放物型と呼ばれるタイプの方程式のうち，もっとも基本的な熱伝導方程式の数値解法を学ぶ。初めに陽的差分法と呼ばれる方法を紹介した後，解法の安定性について議論し，安定性の面からより優れた解法である陰的差分法，クランク＝ニコルソン法を紹介する。

7.1　偏微分方程式の分類

本章と次章では，２変数の２階偏微分方程式

$$a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2b\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - f\left(x, y, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}\right) = 0 \tag{7.1}$$

の数値解法を扱う。ここで，a，b，c は定数である。この方程式の性質は a，b，c の関係によって大きく異なり，次の３つに分類できる。

(i) $b^2 - ac = 0$ のとき：　放物型偏微分方程式

(ii) $b^2 - ac > 0$ のとき：　双曲型偏微分方程式

(iii) $b^2 - ac < 0$ のとき：　楕円型偏微分方程式

それぞれの例としては，次のような方程式が挙げられる。

(i) 放物型偏微分方程式

- 熱伝導方程式（または拡散方程式）：$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$
- シュレディンガー方程式：$i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x)$
- ナビエ＝ストークス方程式：$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v} = \kappa - \frac{1}{\rho}\nabla p + \nu\nabla^2\mathbf{v}$

(ii) 双曲型偏微分方程式

- 波動方程式（または拡散方程式）：$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$

(iii) 楕円型偏微分方程式

- ポアソン方程式： $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y)$
- ラプラス方程式： $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$

本章ではこのうち，放物型方程式の解法を論じる。なお，上記では２変数の場合のみを述べたが，次のような３変数以上の方程式も同様にして扱うことができる。

- ３次元熱伝導方程式： $\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \nabla^2 u$
- ３次元シュレディンガー方程式： $ih\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{h^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi$
- ３次元ポアソン方程式： $\nabla^2 u = f(x, y)$

ただし，

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{7.2}$$

とする。

なお，数値解法を適用するに当たっては，変数変換などによってパラメータをできるだけ消去し，方程式をなるべく簡単な形に変形しておくと見通しが良い。たとえばシュレディンガー方程式の場合は，まず両辺を $\frac{h^2}{2m}$ で割って

$$i\frac{2m}{h}\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \tilde{V}(x)\psi(x) \quad \text{（ただし}\quad \tilde{V}(x) = \frac{2m}{h^2}V(x)\text{）} \tag{7.3}$$

とし，次に独立変数を t から $\tau = \frac{h}{2m}$ に変換して，

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{d\tau}{dt}\frac{\partial}{\partial \tau} = \frac{h}{2m}\frac{\partial}{\partial \tau} \tag{7.4}$$

の関係を使って

$$i\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \tilde{V}(x)\psi(x) \tag{7.5}$$

という形にしておくとよい。

7.2　陽的差分法

原理　放物型偏微分方程式のうちで，もっとも基本的な熱伝導方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{7.6}$$

の解 $u(x, t)$ を求めることを考える。ただし，時間領域，空間領域をそれぞれ $0 \le t \le T$，$0 \le x \le 1$ とし，初期条件を $u(x, 0) = u_0(x)$，境界条件を $u(0, t) = v_0(t)$，$u(1, t) = v_1(t)$ とする。

数値解を求めるに当たっては，時間方向，空間方向をそれぞれ N 等分，M 等分し，t，x の代わりに次のような離散的な時刻 t_j，空間座標 x_i を考える。

$$t_j = jk \qquad (k = \frac{T}{N}, \quad j = 0, 1, \ldots, N) \tag{7.7}$$

$$x_i = ih \qquad (h = \frac{1}{M}, \quad i = 0, 1, \ldots, M) \tag{7.8}$$

また，格子点 (x_i, t_j) における u の値を u_{ij} と書き，これを用いて熱伝導方程式の両辺を差分近似する。いま，点 (x_i, t_j) における式を考え，時間微分に前進差分，空間微分に中心差分を使うと，差分近似した式は次のようになる。

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = \kappa \frac{u_{i+1,j} - 2\,u_{ij} + u_{i-1,j}}{h^2} \tag{7.9}$$

いま，時刻 t_j においてすべての格子点上での u の値がわかっているとすると，この式を $u_{i,j+1}$ について解いて，

$$\begin{aligned} u_{i,j+1} &= u_{i,j} + \frac{\kappa k}{h^2}(u_{i+1,j} - 2\,u_{ij} + u_{i-1,j}) \\ &= r u_{i+1,j} + (1-2r)u_{i,j} + r u_{i-1,j} \quad (i = 1, \ldots, M-1) \end{aligned} \tag{7.10}$$

ただし，

$$r = \frac{\kappa k}{h^2} \tag{7.11}$$

とする。式 (7.10) を用いると，時刻 t_{j+1} におけるすべての格子点上での u の値を計算できる。こうして 1 時間ステップごとに解を求めてゆく方法を**陽的差分法**と呼ぶ。

打切り誤差　上で導いた陽的差分法の公式は，元の偏微分方程式をどの程度忠実に近似しているだろうか。これを見るため，真の解 u を陽的差分法の公式 (7.10) の (左辺) − (右辺) に代入し，残余 E を計算する。E をこの公式の**打切り誤差**と呼ぶ。本来知りたいのは，陽的差分法で求めた近似解がどのくらい正確に元の偏微分方程式を満たすかであるが，近似解は格子点でのみ定義されるため，これは不可能である。そのため，ここで述べたような定義を採用する。

公式 (7.10) に出てくる量を $u_{i,j}$ の周りでテイラー展開すると，

$$u_{i\pm 1,j} = u_{i,j} \pm h u_x + \frac{h^2}{2} u_{xx} \pm \frac{h^3}{3!} u_{xxx} + \frac{h^4}{4!} u_{xxxx} + \cdots \tag{7.12}$$

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + k u_t + \frac{k^2}{2} u_{tt} + \frac{k^3}{3!} u_{ttt} + \cdots \tag{7.13}$$

ただし，下付き添字は x または t による微分を表す。これらを使って，打切り誤差 E は次のように計算できる。

$$E = \frac{1}{k}\left\{ k u_t + \frac{k^2}{2} u_{tt} + \frac{k^3}{3!} u_{ttt} + \cdots \right\}$$

$$
\begin{aligned}
& -\frac{\kappa}{h^2}\left\{h^2 u_{xx} + \frac{2h^4}{4!}u_{xxxx} + \cdots\right\} \\
= & \quad (u_t - \kappa u_{xx}) + \frac{k}{2}u_{tt} - \frac{1}{12}\kappa h^2 u_{xxxx} + \cdots \\
= & \quad \frac{k}{2}u_{tt} - \frac{1}{12}\kappa h^2 u_{xxxx} + \cdots \\
= & \quad O(k) + O(h^2)
\end{aligned}
\tag{7.14}
$$

ここで，u が真の解であることより $u_t - \kappa u_{xx} = 0$ を用いた。これより，陽的差分法の打切り誤差は $O(k) + O(h^2)$ であると言える。

また，$h \to 0$，$k \to 0$ のとき，打切り誤差は 0 に近づくこともわかる。この性質を満たす公式を，**元の偏微分方程式に適合する公式**であると言う。

数値例　$\kappa = 1$ の熱伝導方程式 $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ を，時間刻み幅を $k = 0.01$ に固定し，空間刻み幅を $h = 1,\ 0.5,\ 0.2,\ 0.1$ と変えて解いてみる。すると，$h = 0.2$ までは徐々に数値解が真の解に近くなっていく様子が見られるが，$h = 0.1$ では時間が進むにつれて数値解に空間方向の大きな振動が生じ，真の解から全くかけ離れてしまう現象が見られる。

陽的差分法の安定性　空間方向の刻み幅を小さくしたとき，振動が生じて解がめちゃくちゃになってしまうのはなぜだろうか。この現象を解析するため，陽的差分法の公式 (7.10) を行列形式で書いてみると次のようになる。

$$
\begin{pmatrix} u_{1,j+1} \\ u_{2,j+1} \\ \vdots \\ u_{M-2,j+1} \\ u_{M-1,j+1} \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
1-2r & r & & & \\
r & 1-2r & r & & \\
& \ddots & \ddots & \ddots & \\
& & r & 1-2r & r \\
& & & r & 1-2r
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ \vdots \\ u_{M-2,j} \\ u_{M-1,j} \end{pmatrix}
+ r \begin{pmatrix} u_{0,j} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ u_{M,j} \end{pmatrix}
\tag{7.15}
$$

ここで，境界条件より，右辺第 2 項の列ベクトルにおいて $u_{0,j} = v_0(t_j)$，$u_{M,j} = v_1(t_j)$ であることに注意する。上式を

$$
\mathbf{u}_{j+1} = A\mathbf{u}_j + \mathbf{b}_j \tag{7.16}
$$

と書くと，

$$
\mathbf{u}_j \quad = \quad A\mathbf{u}_{j-1} + \mathbf{b}_{j-1}
$$

$$
\begin{aligned}
&= A(A\mathbf{u}_{j-2} + \mathbf{b}_{j-2}) + \mathbf{b}_{j-1} \\
&= \cdots = A^j\mathbf{u}_0 + (A^{j-1}\mathbf{b}_0 + A^{j-2}\mathbf{b}_1 + \cdots + \mathbf{b}_{j-1}) \qquad (7.17)
\end{aligned}
$$

いま，行列 A の固有値を $\{\lambda_l\}$，対応する固有ベクトルを $\{\mathbf{v}_l\}$ $(l = 1, 2, \ldots, M-1)$ とし，初期ベクトル $\mathbf{u}_0$ を

$$
\mathbf{u}_0 = \sum_{l=1}^{M-1} c_l \mathbf{v}_l \qquad (7.18)
$$

と展開すると，(7.17) 式中の $A^j\mathbf{u}_0$ の項は

$$
A^j\mathbf{u}_0 = \sum_{l=1}^{M-1} c_l A^j \mathbf{v}_l = \sum_{l=1}^{M-1} c_l \lambda_l^j \mathbf{v}_l \qquad (7.19)
$$

と書ける。これより，もし初期ベクトル $\mathbf{u}_0$ 中に誤差が含まれていた場合，

- すべての l に対して $|\lambda_l| \leq 1$ ならば，初期誤差は拡大しない
- ある l に対して $|\lambda_l| > 1$ ならば，初期誤差は j につれて限りなく拡大する

ということがわかる。前者の場合，公式は**安定**，後者の場合，**不安定**であると言う。

それでは，陽的差分法の公式はどのような場合に不安定になるのだろうか。実は，行列 A の固有値は解析的に

$$
\lambda_l = 1^4 r \sin^2 \frac{l\pi}{2M} \qquad (l = 1, \ldots, M-1) \qquad (7.20)
$$

と書けることが知られている（レポート課題参照）。この固有値はすべて 1 以下だから，安定であるためには，最小の固有値が -1 以上であればよい。最小固有値は $1 - 4r\sin^2\frac{(M-1)\pi}{2M}$ であるから，これを $1-4r$ と近似すると，

- $1 - 4r \geq -1$，すなわち $r = \frac{\kappa k}{h^2} \leq \frac{1}{2}$ のとき，公式は安定
- $1 - 4r < -1$，すなわち $r = \frac{\kappa k}{h^2} > \frac{1}{2}$ のとき，公式は不安定

ということになる。

前記の数値例では，$h \geq 0.2$ のときは $r \leq \frac{1}{2}$ という条件が満たされているが，$h = 0.1$ のときは $r = \frac{1 \times 0.01}{0.1^2} = 1$ となり，条件が満たされなくなることがわかる。これが，振動が生じて解がめちゃくちゃになってしまった理由である。一般に陽的差分法では，安定性の条件を満たすように h と k を取らなければならない。

陽的差分法の計算量と精度　陽的差分方が安定になるのは $k \leq \frac{h^2}{\kappa}$ のときであるから，時間方向の刻み幅 k は最大限 $\frac{h^2}{\kappa}$ に取れる。いま，空間方向の刻み幅を $h' = \frac{h}{2}$ と $\frac{1}{2}$ にすると，時間方向の刻み幅は

$$k' = \frac{h'^2}{\kappa} = \frac{1}{4}\frac{h^2}{\kappa} = \frac{k}{4} \tag{7.21}$$

より $\frac{1}{4}$ にしなくてはならない。そのため，全計算量は 8 倍になる。このように，陽的差分法はアルゴリズムは簡単であるが，刻み幅を小さくして精度を上げようとすると計算量が膨大になるという欠点がある。

7.3　陰的差分法

原理　この欠点を克服できる解法が**陰的差分法**である。陰的差分法では，点 (x_i, t_{j+1}) における式を考え時間微分に後退差分，空間微分に中心差分を使って偏微分方程式を次のように差分近似する。

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} = \kappa \frac{u_{i+1,j+1} - 2\,u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{h^2} \tag{7.22}$$

陽的差分法と比べると，左辺は同じだが，右辺がすべて時刻 t_{j+1} での値で書かれているところが相違点である。時刻 t_{j+1} での量をすべて左辺に集め，(7.11) 式の r を使って上式を書き直すと次のようになる。

$$-ru_{i+1,j+1} + (1+2r)u_{i,j+1} - ru_{i-1,j+1} = u_{i,j} \quad (i = 1, \ldots, M-1) \tag{7.23}$$

これは未知の量 $u_{i,j+1}$（$i = 1, \ldots, M-1$）についての連立一次方程式になっているから，時間ステップを 1 つ進めるにはこの方程式を解く必要がある。連立一次方程式を行列形式で書くと，

$$\begin{pmatrix} 1+2r & -r & & & \\ -r & 1+2r & -r & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -r & 1+2r & -r \\ & & & -r & 1+2r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{1,j+1} \\ u_{2,j+1} \\ \vdots \\ u_{M-2,j+1} \\ u_{M-1,j+1} \end{pmatrix} - r \begin{pmatrix} u_{0,j+1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ u_{M,j+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{1,j} \\ u_{2,j} \\ \vdots \\ u_{M-2,j} \\ u_{M-1,j} \end{pmatrix} \tag{7.24}$$

さらに，(7.16) 式の記法を使って書くと次のようになる。

$$B\mathbf{u}_{j+1} - \mathbf{b}_{j+1} = \mathbf{u}_j \tag{7.25}$$

ただし，

$$B = -A + 2I \qquad (I：\text{単位行列}) \tag{7.26}$$

とする。$\mathbf{b}_{j+1}$ が境界条件から定まる定数ベクトルであることに注意し，これを $\mathbf{u}_{j+1}$ について解くと，

$$\mathbf{u}_{j+1} = B^{-1}(\mathbf{u}_j + \mathbf{b}_{j+1}) \tag{7.27}$$

となる。右辺の B^{-1} による乗算が，連立一次方程式を解く操作に相当する。これを実際に行うアルゴリズムについては，第 9 章で学ぶ。

陰的差分法の安定性　$\mathbf{u}_j$ に対して (7.27) 式を繰り返し適用すると，

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_j &= B^{-1}(\mathbf{u}_{j-1} + \mathbf{b}_j) \\ &= B^{-1}(B^{-1}(\mathbf{u}_{j-2} + \mathbf{b}_{j-1}) + \mathbf{b}_j) \\ &= \cdots = B^{-j}\mathbf{u}_0 + (B^{-j}\mathbf{b}_1 + B^{-j+1}\mathbf{b}_2 + \cdots + B^{-1}\mathbf{b}_j) \end{aligned} \tag{7.28}$$

したがって，陰的差分法の安定性を解析するには，行列 B^{-1} の固有値 μ_l を調べればよい。$B = -A + 2I$ であるから，(7.20) 式より，

$$\mu_l = \frac{1}{2 - \lambda_l} = \frac{1}{1 + 4r\sin^2\frac{l\pi}{2M}} \qquad (l = 1, \ldots, M-1) \tag{7.29}$$

これより，刻み幅 h，k にかかわらず，$|\mu_l| \leq 1$（$l = 1, \ldots, M-1$）であることがわかる。これを，陰的差分法は**無条件安定**であると言う。陰的差分法では，１時間ステップごとに連立一次方程式を解く必要があるが，無条件安定であるために h，k を自由に設定できることが大きな利点である。なお，陰的差分法の打ち切り誤差は，陽的差分法と同じ $O(k) + O(h^2)$ である。

7.4　クランク＝ニコルソン法

原理　陽的差分法，陰的差分法では，時間方向の打切り誤差が $O(k)$ と空間方向の打切り誤差 $O(h^2)$ に比べて大きい。これに対し，時間方向の打切り誤差も $O(k^2)$ にするために考えられた解法がクランク＝ニコルソン法である。

時間方向の打切り誤差が $O(k)$ であった原因は，時間方向の微分を１次の精度しかない前進差分あるいは後退差分で近似したことにあると考えられる。そこでクランク＝ニコルソン法では，時間方向の差分にも２次の精度を持つ中心差分を使う。そのため，$(x_i, t_{j+\frac{1}{2}})$ における式を考え，時間微分を刻み幅 $k/2$ の中心差分で近似する。一方，空間方向の差分は時刻 $t_{j+\frac{1}{2}}$ での値を使って計算すべきであるが，この時刻には格子点は存在しないので，時刻 t_j と t_{j+1} での値の平均を使って計算する。その結果，差分式は次のようになる。

$$\begin{aligned} &\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{k} \\ &= \frac{\kappa}{2}\left\{\frac{u_{i+1,j} - 2\,u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i+1,j+1} - 2\,u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}}{h^2}\right\} \end{aligned} \tag{7.30}$$

左辺に時刻 t_{j+1} での値，右辺に時刻 t_j での値を持ってきて整理すると，

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{2}ru_{i+1,j+1} + (1+r)u_{i,j+1} - \frac{1}{2}ru_{i-1,j+1} \\ &= \frac{1}{2}ru_{i+1,j} + (1-r)u_{i,j} + \frac{1}{2}ru_{i-1,j} \end{aligned} \tag{7.31}$$

行列形式で書くと次のようになる。

$$\left(-\frac{1}{2}A + \frac{3}{2}I\right)\mathbf{u}_{j+1} - \mathbf{b}_{j+1} = \left(\frac{1}{2}A + \frac{1}{2}I\right)\mathbf{u}_j + \mathbf{b}_j \tag{7.32}$$

したがって，

$$\mathbf{u}_{j+1} = (3I - A)^{-1}\{(I+A)\mathbf{u}_j + (\mathbf{b}_j + \mathbf{b}_{j+1})\} \tag{7.33}$$

となり，クランク＝ニコルソン法でも時間ステップを 1 つ進めるのに連立一次方程式を解く必要があることがわかる。

クランク＝ニコルソン法の安定性　(7.33) 式より，クランク＝ニコルソン法の安定性を解析するには，行列 $(3I-A)^{-1}(I+A)$ の固有値 ν_l を調べればよい。これは (7.20) 式より，

$$\nu_l = \frac{1+\lambda_l}{3-\lambda_l} = \frac{1-2r\sin^2\frac{l\pi}{2M}}{1+2r\sin^2\frac{l\pi}{2M}} \qquad (l = 1, \ldots, M-1) \tag{7.34}$$

と書くことができ，任意の $r>0$ に対して $|\nu_l| \le 1$ であることが容易にわかる。したがって，クランク＝ニコルソン法も無条件安定である。

打切り誤差　クランク＝ニコルソン法の公式 (7.30) に出てくる量 $u_{i\pm1,j+1}$ を，次のように (x_i, t_j) の周りでテイラー展開する。

$$\begin{aligned} u_{i\pm1,j+1} &= u_{i,j} \pm hu_x + ku_t + \frac{h^2}{2}u_{xx} + hku_{xt} + \frac{k^2}{2}u_{tt} \\ &= \pm\frac{h^3}{3!}u_{xxx} + \frac{h^2k}{2}u_{xxt} + \frac{hk^2}{2}u_{xtt} + \frac{k^3}{3!}u_{ttt} + \cdots \end{aligned} \tag{7.35}$$

(7.35) 式を，(7.12) 式，(7.13) 式とともに (7.30) 式の (左辺) − (右辺) に代入し，残余 E を計算して整理すると，

$$\begin{aligned} E &= (u_t - \kappa u_{xx}) + \frac{k}{2}(u_{tt} - \kappa u_{xxt}) + \frac{1}{12}\kappa h^2 u_{xxxx} \\ &\quad + \frac{k^2}{6}(u_{ttt} - \frac{3}{2}\kappa u_{xxtt}) + \cdots \\ &= \frac{1}{12}\kappa h^2 u_{xxxx} + \frac{k^2}{6}(u_{ttt} - \frac{3}{2}\kappa u_{xxtt}) + \cdots \\ &= O(k^2) + O(h^2) \end{aligned} \tag{7.36}$$

ただし，u が熱伝導方程式の真の解であることより $u_t - \kappa u_{xx} = 0$，$u_{tt} - \kappa u_{xxt} = 0$ であることを用いた。これより，クランク＝ニコルソン法の打切り誤差は予想通り $O(k^2)+O(h^2)$ であり，陽的差分法，陰的差分法より高い精度を達成できることがわかる。