拡散方程式に対する θ–法の安定性

拡散方程式

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

を解くための θ–法は

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2}\Big\{&\theta\,(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) \\ &+ (1-\theta)\,(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n)\Big\}, \qquad 0 \le \theta \le 1 \end{aligned} \tag{2}$$

で与えられる。ここで $\theta = 0$ とすると**陽的解法**になり，$\theta > 0$ のときは**陰的解法**になる。特に，$\theta = 1/2$ のときは**クランク・ニコルソン法**と呼ばれている。

ここで θ–法の安定性を解析するために，いつものように $u_j^n = g^n \exp(\mathrm{i}\,\xi\, j\, \Delta x)$ と置く。そうすると

$$u_j^{n+1} = g\, u_j^n, \qquad u_{j\pm1}^n = \exp(\pm\,\mathrm{i}\,\xi\,\Delta x)\, u_j^n$$

であるから，これらを式 (16) に代入すると

$$g\, u_j^n = u_j^n + \rho\,(\theta\, g + (1-\theta))\,\Big\{\exp(\mathrm{i}\,\xi\ \Delta x) - 2 + \exp(-\mathrm{i}\,\xi\,\Delta x)\Big\}\, u_j^n \tag{3}$$

が得られる。ここで $\rho = \Delta t/\Delta x^2$ と置いた。両辺を u_j^n で割って g について解けば

$$g = \frac{1 - 4\,\rho\,(1-\theta)\,\sin^2\left(\frac{\xi\,\Delta x}{2}\right)}{1 + 4\,\rho\,\theta\,\sin^2\left(\frac{\xi\,\Delta x}{2}\right)} \tag{4}$$

を得る。これより，ρ に無関係に

$$1 - g = \frac{4\,\rho\,\sin^2\left(\frac{\xi\,\Delta x}{2}\right)}{1 + 4\,\rho\,\theta\,\sin^2\left(\frac{\xi\,\Delta x}{2}\right)} > 0 \tag{5}$$

が得られる。一方，$1 + g$ を計算すると

$$1 + g = \frac{2\,\left(1 - 2\,\rho\,(1 - 2\,\theta)\,\sin^2\left(\frac{\xi\,\Delta x}{2}\right)\right)}{1 + 4\,\rho\,\theta\,\sin^2\left(\frac{\xi\,\Delta x}{2}\right)} \tag{6}$$

であるから，$1/2 \le \theta$ のときは無条件に $1 + g > 0$ となり，$0 \le \theta < 1/2$ のときは

$$\rho < \frac{1}{2\,(1 - 2\,\theta)}$$

であれば，$1 + g > 0$ となる。

以上をまとめると次のようになる：

- $1/2 \le \theta \le 1$
  この場合，$\rho = \Delta t/\Delta x^2$ の値に無関係に $|g| \le 1$ が成り立ち安定となる。

- $0 \le \theta < 1/2$
  この場合 $\rho < \frac{1}{2\,(1-2\theta)}$ であれば $|g| \le 1$ となり安定となる。

移流方程式 (1 階の波動方程式) のための差分解法とその安定性

方程式

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial t} + c\,\frac{\partial u}{\partial x} &= 0, \qquad c > 0,\\ u(x,0) &= \varphi(x)\end{aligned} \tag{7}$$

のための解法

$$u_j^{n+1} = u_j^n - c\,\frac{\Delta t}{\Delta x}\,(u_{j+1}^n - u_j^n) \tag{8}$$

の安定性について考える。$u_j^n = g^n\,\exp\,(\mathrm{i}\,\xi j\,\Delta x)$ とおくと，$u_j^{n+1} = g\,u_j^n$, $u_{j+1}^n = u_j^n\,\exp\,(\mathrm{i}\,\xi\,\Delta x)$ であるから

$$g = 1 - c\,\frac{\Delta t}{\Delta x}\,(\exp\,(\mathrm{i}\,\xi\,\Delta x) - 1) \tag{9}$$

を得る。ここで，$\rho = c\,\Delta t/\Delta x$，$\theta = \xi\,\Delta x$ と置くと

$$\begin{aligned}|g|^2 &= (1 - \rho\,\cos\theta + \rho)^2 + \rho^2\sin^2\theta\\ &= 2\,(1-\cos\theta)\,\rho^2 + 2\,(1-\cos\theta)\,\rho + 1\end{aligned} \tag{10}$$

となる。これより $1-\cos\theta \ge 0$ であるから，すべての $\rho > 0$ において $|g| > 1$ となる。したがってこの解法は不安定になる。

問題 1 解法 (16) が $\rho\,(= \Delta t/\Delta x^2)$ 一定という条件の下で方程式 (15) に適合していることを示せ。
hint: ２変数の Taylor 展開

$$\begin{aligned}u(x+\Delta x, t{+}\Delta t) = u(x,t) &+ (u_x(x,t)\,\Delta x + u_t(x,t)\,\Delta t)\\ &+ \frac{1}{2}\,(u_{xx}(x,t)\,\Delta x^2 + 2\,u_{xt}(x,t)\,\Delta x\,\Delta t + u_{tt}(x,t)\,\Delta t^2)\\ &+ \frac{1}{3!}\,(u_{xxx}(x,t)\,\Delta x^3 + 3\,u_{xxt}(x,t)\,\Delta x^3\Delta t + 3\,u_{xtt}(x,t)\,\Delta x\Delta t^2 + u_{ttt}(x,t)\,\Delta t^3)\\ &+ \cdots\end{aligned}$$

を用いる。

問題 2 移流方程式

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u}{\partial t} + c\,\dfrac{\partial u}{\partial x} = 0, \qquad t > 0, \quad -\infty < x < +\infty,\\ u(x,0) = \varphi(x), \qquad -\infty < x < +\infty\end{cases} \tag{11}$$

を解くための差分解法として次の三つを考える：

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{c}{2}\,\frac{\Delta t}{\Delta x}\,(u_{j+1}^n - u_{j-1}^n) \tag{12}$$

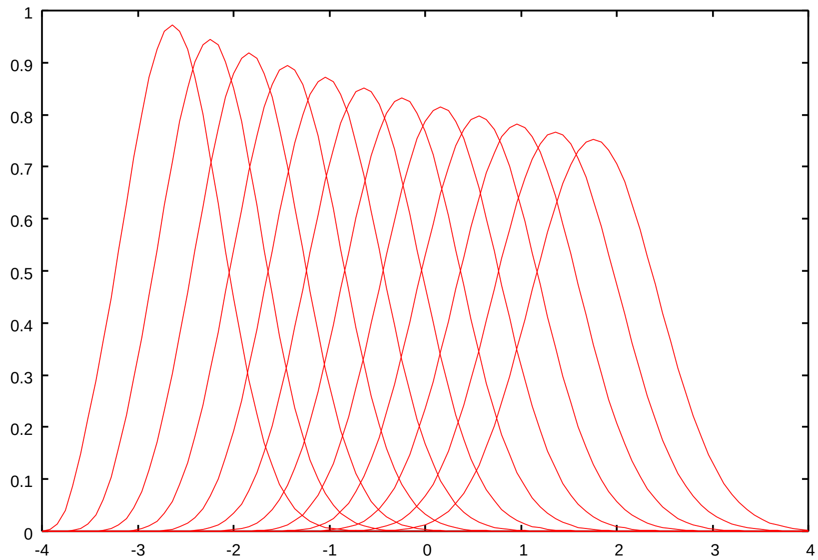
$$u_j^{n+1} = u_j^n - c\,\frac{\Delta t}{\Delta x}\,(u_j^n - u_{j-1}^n) \tag{13}$$

$$u_j^{n+1} = u_j^n - c\,\frac{\Delta t}{\Delta x}\,(u_{j+1}^n - u_j^n) \tag{14}$$

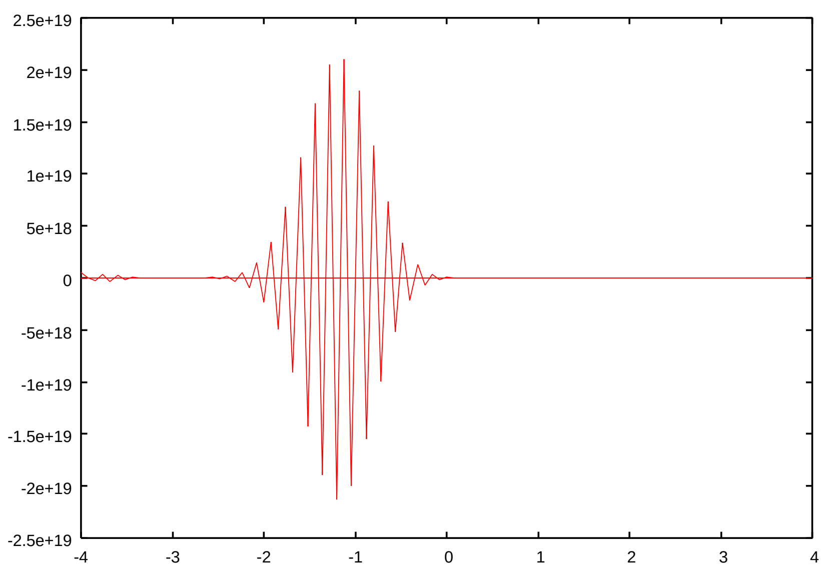
ここで $c = 1$ とし，適当な $\varphi(x)$ を与え，$\Delta t/\Delta x = 1/2$ という条件の下に $\Delta x = 1/2^i\,(i = 1, 2, 3, 4)$ と変化させ，三つの解法で数値解を求め，初期波形 $\varphi(x)$ が時間とともにどのように変化するかを調べよ。

方程式 (11) の数値解の比較

$\varphi(x) = \exp(-2\,(x+3)^2)$ の場合



$$u_j^{n+1} = u_j^n - \rho\,(u_j^n - u_{j-1}^n) \quad \rho = c\,\Delta t/\Delta x\,(\Delta x = 2/25,\ \Delta t = 1/25).$$



$$u_j^{n+1} = u_j^n - \rho\,(u_{j+1}^n - u_j^n), \quad \rho = c\,\Delta t/\Delta x\,(\Delta x = 2/25,\ \Delta t = 1/25).$$

θ–法の解き方

拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t \tag{15}$$

$$u(t,0) = u(t,1) = 0$$

を解くための θ-法の解き方について説明する。

θ–法は

$$\begin{aligned} u_j^{n+1} = u_j^n + \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \Big\{ & \theta \,(u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}) \\ & + (1-\theta)\,(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n) \Big\}, \qquad 0 \le \theta \le 1 \end{aligned} \tag{16}$$

である。まず区間 $x \in [0,1]$ を J 等分する。すなわち $\Delta x = 1/J$ とする。いま，式 (16) において第 n 時間ステップ ($t = n\,\Delta t$) での値 $u_j^n\,(j = 0, 1, \ldots, J)$ は既知とし，次の $n+1$ ステップでの値を求めることを考える。式 (16) において $\rho = \Delta t / \Delta x^2$ と置いて，未知数 $u_j^{n+1}\,(j = 0, 1, \ldots, J)$ を左辺に持ってくると

$$\begin{aligned} &(1-\rho\theta)\,u_{j-1}^{n+1} + 2\,\rho\,\theta\,u_j^{n+1} + (1-\rho\theta)\,u_{j+1}^{n+1} \\ &\qquad = \rho\,(1-\theta)\,u_{j-1}^n + \big(1 - 2\,\rho\,(1-\theta)\big)\,u_j^n + \rho\,(1-\theta)\,u_{j+1}^n, \qquad j = 1, \ldots, J-1 \end{aligned} \tag{17}$$

となる。また境界条件より

$$u_0^n = u_J^n = 0$$

となるので，上式を行列とベクトルを用いて表すと

$$\begin{pmatrix} 2\,\rho\theta & 1-\rho\theta & & & \mathbf{0} & \\ 1-\rho\theta & 2\,\rho\theta & 1-\rho\theta & & & \\ & 1-\rho\theta & 2\,\rho\theta & 1-\rho\theta & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & 1-\rho\theta & 2\,\rho\theta & 1-\rho\theta \\ & \mathbf{0} & & & 1-\rho\theta & 2\,\rho\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1^{n+1} \\ u_2^{n+1} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ u_{J-1}^{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ b_{J-1} \end{pmatrix} \tag{18}$$

を得る。ここで

$$b_i = \begin{cases} (1 - 2\,\rho\,(1-\theta))\,u_1^n + \rho\,(1-\theta)\,u_2^n, & i = 1, \\ \rho\,(1-\theta)\,u_{j-1}^n + (1 - 2\,\rho\,(1-\theta))\,u_j^n + \rho\,(1-\theta)\,u_{j+1}^n, & i = 2, \ldots, J-2, \\ b_{J-1} = \rho\,(1-\theta)\,u_{J-2}^n + (1 - 2\,\rho\,(1-\theta))\,u_{J-1}^n, & i = J-1, \end{cases}$$

と置いた。1 ステップ毎に上の連立一次方程式を解くことによって方程式 (15) の解が求まる。

式 (18) のような **三重対角行列** を係数に持つ連立一次方程式を能率的に解く方法として，以下に示す **Thomas の方法** というアルゴリズムがある。

まず方程式 (18) を一般化し次のように表す：

$$
\begin{pmatrix}
b_1 & -c_1 & & & & \\
-a_2 & b_2 & -c_2 & & \text{\Large 0} & \\
 & -a_3 & b_3 & -c_3 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & \ddots & \ddots & \ddots \\
 & \text{\Large 0} & & -a_{m-1} & b_{m-1} & -c_{m-1} \\
 & & & & -a_m & b_m
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{m-1} \\ x_m \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ d_{m-1} \\ d_m \end{pmatrix}
\tag{19}
$$

この方程式に対する Thomas のアルゴリズムは以下のようになる。

Thomas のアルゴリズム

$e_0 := 0;\ f_0 := 0;$
for $k := 1$ **to** m **do**
  $e_k := c_k/(b_k - a_k\, e_{k-1});$
  $f_k := (d_k + a_k\, f_{k-1})/(b_k - a_k\, e_{k-1});$
end for
$x_m := f_m;$
for $k := m-1$ **downto** 1 **do**
  $x_k := e_k\, x_{k+1} + f_k;$
end for

問題 3 方程式

$$
\begin{cases}
u_t(x,\, t) = u_{xx}(x,\, t), & 0 < x < 1, \quad 0 < t, \\
u(x,\, 0) = \sin \pi x, & u(0,\, t) = u(1,\, t) = 0
\end{cases}
$$

の数値解を θ–法で計算せよ。ここで $\theta = 1/2$ とし，Δt と Δx は，以下の 2 通りの組み合わせを用い，それぞれについて $t = 0,\, 0.2,\, 0,4,\, 0.6,\, 0.8,\, 1.0$ において解を図示すること。

(1) $\Delta t = 1/1000,\ \Delta x = 1/20\,(\rho = 0.4)$

(2) $\Delta t = 1/500,\ \Delta x = 1/20\,(\rho = 0.8)$