数理解析研究所講究録
190巻 1973年 129-136

ある種の拡散方程式系に対する差分解法について

甲南大，理， 三村昌泰

1. 最近，我国では光化学スモッグによる被害が各地に続出しており，その対策，研究に多大な努力がなされている．米国では，ロスアンゼルスにおける光化学スモッグが古くから（といっても1960年度後半からであろう）研究されてきている． A. Q. Eschenroeder と J. R. Martinez は自動車の排気ガスによって光化学スモッグが起るとし，その反応機構を簡単な化学反応式で表わした.[1] その数学モデルは次のような半線型拡散方程式系で表わされる．

$$\frac{\partial}{\partial t} u = \frac{\partial}{\partial x}\left(d(x) \frac{\partial}{\partial x} u\right) + C \cdot R(u) \qquad (1-1)$$

$$(\, d(x) > 0 \,)$$

ここで $u = (u_1, u_2, \cdots, u_7)^t$ は反応に参加する各成分の濃度（ppm）を表わす，例えば，u_1 は NO_2 の濃度，u_2 は NO の濃度を意味する．t は時間（hour），x は地面からの高さ（meter）を表わしている．

化学量行列 C は

$$C = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2 & -1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1/2 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

であり $R(u) = (k_1u_1,\ k_2u_2,\ k_3u_2u_4,\ k_4u_3u_5,\ k_5u_5u_7,\ k_6u_2u_6,\ k_7u_1u_6,\ k_8u_2u_7,\ k_9u_1u_7,\ k_{10}u_4u_5,\ k_{11}u_1u_2)^t$ とする．（反応定数はすべて正とする．）

(1-1)に対する附加条件としては，

初期条件：

$$u(0,x) = u_0(x) \qquad 0 \le x \le L \qquad (1-2)$$

境界条件：

$$\frac{\partial}{\partial x}u(t,0) = -a(t) \qquad 0 \le t \le T \qquad (1-3)$$

$$\frac{\partial}{\partial x}u(t,L) = 0 \qquad 0 \le t \le T \qquad (1-4)$$

を与え，方程式系(1-1)を領域$\{0<t<T,\ 0<x<L\}$において考

える．　ここで　$u_0(x)$, $\alpha(t)$ は共に非負の函数とする．

混合問題(1-1)～(1-4)に対して興味ある事は解の存在を保証した上で，解の挙動を調べる事であるが，ここでは，十分大きい時刻に対して解の挙動（漸近挙動）を調べるのに有効な差分解法を紹介(注)し，その解の安定性を論ずる．

2．　適当な人工項をもつ差分方程式系

混合問題(1-1)～(1-4)に対して次のような差分化された混合問題を考える．

$$u^{n,j} = u(n\Delta t, j\Delta x),$$

$$D_t u^{n,j} = E(\Delta x)\cdot u^{n,j} + C\cdot R(u^{n,j}) - \alpha(u^{n,j})(u^{n+1,j} - u^{n,j}) \qquad (2\text{-}1)$$

$$n \in \{0, 1, \cdots, N = [T/\Delta t]\} \equiv \langle 0, N \rangle$$

$$j \in \langle 1, J = [L/\Delta x] - 1 \rangle$$

(注) ここで取り扱っている問題は[2]で紹介した"confinement system を非線形項にもつ拡散方程式系~~の差分解法~~"の一例であるから詳しくは[2]を参照．

$$u^{0,j} = u_0(j\Delta x) \qquad j \in \langle 0, J\rangle \qquad (2\text{-}2)$$

$$u^{n,0} = u^{n,1} + \Delta x\, a(n\Delta t) \qquad n \in \langle 0, N\rangle \qquad (2\text{-}3)$$

$$u^{n,J} = u^{n,J-1} \qquad n \in \langle 0, N\rangle\,, \qquad (2\text{-}4)$$

ここで $D_t\cdot$ は t 方向への前進差分，$E(\Delta x)$ は $\frac{\partial}{\partial x}(d(x)\frac{\partial}{\partial x}\cdot)$ と order $(\Delta x)^2$ で consistent な差分作用素で，かつ，$1+\Delta t E(\Delta x)$ は positive で contractive type であるとする．人工項 $\alpha(u)$ はスカラー函数であり，後で決定する．

$u^{n,j}$ は物質の濃度を表わすので，値は非負である事が望ましいからその性質をもつように次の lemma をあげておく．

Lemma 1 (non-negativity)

人工項 $\alpha(u)$ を適当に大きく（例えば，$\alpha(u)=\sum_{i,j} k_i u_j$）とれば，混合問題 (2-1) ～ (2-4) の解 $u^{n,j}$ は $^\forall n\in\langle 1,N\rangle$，$^\forall j\in\langle 1,J\rangle$ に対して非負である．

proof. 系 (2-1) を $u^{n+1,j}$ に関して解けば，

$$u^{n+1,j} = \frac{(1+\Delta t E(\Delta x))u^{n,j} + \Delta t\left\{C\cdot R(u^{n,j}) + \alpha(u^{n,j})\,u^{n,j}\right\}}{1 + \Delta t\,\alpha(u^{n,j})} \qquad (2-5)$$

となる. そこで $E(\Delta x)$ の仮定と $\alpha(u)=\sum_i^{11}\sum_j^{7} k_i u_j$ を使えば、容易に次の性質が成り立つ;

$$u^{n+1,j} \geqq 0 \qquad \text{for} \quad u^{n,j} \geqq 0.$$

かくして $u_0(j\Delta x) \geqq 0$ から Lemma が証明できる.

次に $u^{n,j}$ の一様有界性（差分方程式論では安定性）を示そう. そのために, ベクトル $V=(6,4,2,2,4,3,2)$ を (2-1) の左から掛けると次式を得る.

$$D_t w^{n,j} = E(\Delta x)w^{n,j} + V\cdot C\cdot R(u^{n,j}) - \alpha(u^{n,j})_x\,(w^{n+1,j} - w^{n,j}) \qquad (2-6)$$

ここで $w^{n,j} = V\cdot u^{n,j}$ とする. 同様に (2-2)～(2-4) から

$$w^{0,j} = w_0(j\Delta x) \qquad (2-7)$$

$$w^{n,0} = w^{n,1} + \Delta x\, a(n\Delta t) \qquad (2-8)$$

$$w^{n,J} = w^{n,J-1} \tag{2-9}$$

ただし　$w_0 = V \cdot u_0$　，　$a = V \cdot a$ ．　混合問題 (2-6)〜(2-9) における $w^{n,j}$ を

$$w^{n,j} = u^{n,j} - \frac{2L-(j+1)\Delta x}{2(L-\Delta x)} \cdot j\Delta x \cdot a(n\Delta t)$$

と変換すれば，同次境界条件をもつ次のような混合問題が得られる．

$$D_t u^{n,j} = E(\Delta x) u^{n,j} + V \cdot C \cdot R(u^{n,j}) - \alpha(u^{n,j}) \times (u^{n+1,j} - u^{n,j}) + f^{n,j} \tag{2-10}$$

$$u^{0,j} = w^{0,j} + \frac{2L-(j+1)\Delta x}{2(L-\Delta x)} j\Delta x \cdot a(0) \tag{2-11}$$

$$u^{n,0} = u^{n,1} \tag{2-12}$$

$$u^{n,J} = u^{n,J-1} \tag{2-13}$$

ただし

$$f^{n,j} = \left\{ E(\Delta x) - D_t(1-\alpha(u^{n,j})) \right\} \cdot \frac{2L-(j+1)\Delta x}{2(L-\Delta x)} \cdot j\Delta x \cdot a(n\Delta t)$$

混合問題 (2-10)〜(2-13) に対して は次の Lemma が得られる.

Lemma 2. (a priori estimate)

混合問題 (2-10)〜(2-13) の解 $u^{n \cdot j}$ は上から次式で評価できる.

$$u^{n \cdot j} \leq \max_{j} u^{0 \cdot j} + T \cdot \max_{j \cdot n} f^{n \cdot j}$$

for $n \in < 0, N >$, $j \in < 0, J >$.

proof. $u \geq 0$ の時, $V \cdot C \cdot R(u) \leq 0$ である事に注意すれば証明は容易である.

この Lemma より次の定理が得られる.

Theorem 1.

混合問題 (2-1)〜(2-4) の解 $u^{n \cdot j}$ は次の意味で安定である.

$$0 \leq u_i^{n \cdot j} \leq \frac{1}{2}\Big\{ \max_{j} V \cdot (u_0(j\Delta x) + \frac{1}{2} L a(0)) +$$

$$T \cdot \max_{j \cdot n} f^{n \cdot j} \Big\} \qquad \text{for } n \in <1, N>, \ j \in <1, J-1>.$$

ただし $i \in <1, 7>$.

かくして混合問題(2-1)〜(2-4)の解 $u^{n,j}$ の安定性が証明できる.

収束性の証明は,混合問題(1-1)〜(1-4)の解に適当な滑らかさがあれば,容易にできる.

注意

1°) Lemma 1 の必要性は もしも $u^{n,j}$ の要素のうちいずれかが負になると,解が有限時間で無限大になる(爆発する)可能性があるからである.

2°) 上の結果は D_t と $E(\Delta x)$ における仮定だけで成立し,非線型項の影響はない.云い換えれば,もしも implicit scheme とすれば,$\Delta x, \Delta t$ に制限がなくなるから,この意味において,解の漸近挙動を知るのに有効な差分式であると云える.

3°) しかしながら,人工項 $\alpha(u)$ が導入されているため,実際計算するには,$\alpha(u)$ は Lemma 1 が成りたつ範囲内において小さくする必要がある.

参考文献

[1] Eschenroeder, A. Q. and J. R. Martinez : Further Development of the Photochemical Smog Model for the Los Angeles Basin, Final Report, CR-1-191, G. R. C. (1971)

[2] Mimura. M ; confinement system を非線型項にもつ拡散方程式,数理解析研.講究録 (to appear)