

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, 我口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. 米口では, 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.

$$\frac{\partial}{\partial t} u = \frac{\partial}{\partial x} (d(x) \frac{\partial}{\partial x} u) + C \cdot R(u) \quad (1-1)$$
$$(d(x) > 0)$$

ここに $u = (u_1, u_2, \dots, u_7)^t$ 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 $R(u) = (k_1 u_1, k_2 u_2, k_3 u_2 u_4, k_4 u_3 u_5, k_5 u_5 u_7, k_6 u_2 u_6, k_7 u_1 u_6, k_8 u_2 u_7, k_9 u_1 u_7, k_{10} u_4 u_5, k_{11} u_1 u_2)^T$ 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:

$$u(0, x) = u_0(x) \quad 0 \leq x \leq L \quad (1-2)$$

境界条件:

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, 0) = -u(t) \quad 0 \leq t \leq T' \quad (1-3)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}(t, L) = 0 \quad 0 \leq t \leq T' \quad (1-4)$$

とすると、方程式系(1-1)と領域 $\{0 \leq t \leq T', 0 \leq x \leq L\}$ において

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し^(注), 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も考える.

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

$$\begin{aligned} D_t u^{n,j} &= E(\Delta x) \cdot u^{n,j} + C \cdot R(u^{n,j}) \\ &\quad - \alpha(u^{n,j}) (u^{n+1,j} - u^{n,j}), \end{aligned} \quad (2-1)$$

$$n \in \{0, 1, \dots, N = \lceil T/\Delta t \rceil\} \equiv \langle 0, N \rangle$$

$$j \in \langle 1, J = \lceil L/\Delta x \rceil - 1 \rangle$$

^(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 ~~“差分解法”~~ の一例であるから詳しくは [2] を参照.

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

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

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

ここで D_t は t 方向への前進差分, $E(\Delta x)$ は $\frac{\partial}{\partial x}(d(x)\frac{\partial}{\partial x})$ 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, $\alpha(u) = \sum_{i,j} k_{ij} u_{ij}$) とせば, 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,

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

となる。そこで $E(\Delta x)$ の仮定と $\alpha(u) = \sum_{i=1}^{11} \sum_{j=1}^7 k_{ij} u_j$ を使えば、容易に次の性質が成り立つ；

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

かくして $u_0(j\Delta x) \geq 0$ 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。

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

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

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

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

$$w^{n,J} = w^{n,J-1} \quad (2-9)$$

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 $w^{n,j}$ は

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

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.

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

$$(u^{n+1,j} - u^{n,j}) + f^{n,j} \quad (2-10)$$

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

$$u^{n,0} = u^{n,1} \quad (2-12)$$

$$u^{n,J} = u^{n,J-1} \quad (2-13)$$

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 $u^{n,j}$ は上から次式で評価できる。

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

for $n \in \langle 0, N \rangle$, $j \in \langle 0, J \rangle$.

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 $u^{n,j}$ は次の意味で安定である。

$$0 \leq u_i^{n,j} \leq \frac{1}{2} \left\{ \max_j V \cdot (u_0(j, \Delta x)) + \frac{1}{2} L Q(0) \right\} + T \cdot \max_{j,n} f^{n,j} \quad \text{for } n \in \langle 1, N \rangle, j \in \langle 1, J-1 \rangle.$$

ただし $i \in \langle 1, I \rangle$.

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) の解に適切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。言い換えれば、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、解の軌道挙動を知るのに有効な差分式があると云える。

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 の仮定が成り立つ範囲内において小さくする必要がある。
お

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, C R-1-191, G. R. C. (1971)
- [2] Mimura, M.: confinement system と非線型項にもつ拡散方程式, 数理解析研. 講演録 (to appear)