

方程式 $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \alpha u$ に対する 局所 Crank - Nicolson 法の適用

岡山理科大学大学院理学研究科

阿不都外里 阿不都熱西堤 (Abdurishit Abuduwali)

榊原 道夫 (Michio Sakakihara)

仁木 滉 (Hiroshi Niki)

1 まえがき

筆者らは熱方程式に対する新たな陽解法として局所 Crank - Nicolson 法を提案した^{(1),(2)}。この解法は陽解法の 1 種であるにもかかわらず無条件安定である。定式化は行列指数関数の積表現 (Trotter 積) の応用より導出される。先ず発展方程式にたいして空間変数に関して中心差分近似を適用して得られる半離散系を導く。その方程式は差分格子点上の近似関数値を未知ベクトルとする線形常微分方程式である。そのためシステム行列が時間に依存しない場合その解は初期値およびシステム行列の指数関数で時間をパラメータに持つものにより表すことができる。この問題に対する数値解法として種々の方法が提案されているが、それらは何れもシステム行列の指数関数をいかに近似するかという視点よりまとめることができる。我々が局所 Crank - Nicolson 法と呼ぶ解法はシステム行列を小ブロック行列の和に分解し、各小行列に対する指数関数を Crank - Nicolson 法に対応する近似法を適用することにより得られる解法を指す。この方法による熱方程式の解法を理論的及び数値的観点より考察してきた。特にこの方法は初期条件が階段関数で与えられている場合及び初期関数が適合性を持たない場合 (初期関数が境界条件を満足しない場合) に対して従来の Crank - Nicolson 法 (古典的 Crank - Nicolson 法) より優れていることを示した。本論文では表題に示した方程式に対して古典的 Crank - Nicolson 法と局所 Crank - Nicolson 法の適用を試みる。次にこれら Crank - Nicolson 法の安定条件を考察し、数値例から古典的 Crank - Nicolson 法は無条件安定でないことを示す。また熱方程式の場合と同様に適合性を持たない初期関数に対して本解法が有効であることを数値例で示す。

2 古典的 Crank - Nicolson 法とその安定性

初期値 - 境界値問題

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \alpha u \quad \text{in } \Omega \times (0, T], \quad (1)$$

$$u(x, 0) = f(x) \quad \text{on } \Omega, \quad (2)$$

$$u(x, t) = 0 \quad \text{on } \partial\Omega \quad (3)$$

を考察する．ここで α は定数， $f(x)$ は既知の関数， $\Omega = (0, 1)$ である．この問題を古典的 Crank - Nicolson 法の手法を適用することにより，次に示す近似式が得られる：

$$\frac{\partial u}{\partial t} \approx \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{k}, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \alpha u \approx & \frac{1}{2} \left[\frac{v_{i-1,j+1} - 2v_{i,j+1} + v_{i+1,j+1}}{h^2} + \alpha v_{i,j+1} \right. \\ & \left. + \frac{v_{i-1,j} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j}}{h^2} + \alpha v_{i,j} \right]. \end{aligned} \quad (5)$$

ここで $v_{i,j}$ は点 (x_i, t_j) における $u_{i,j}$ の近似解， $x_i = ih$ ($i=1, \dots, N-1$), $h = 1/N$, $t_j = jk$ ($j=1, \dots, M-1$), $k = 1/M$ である． h は空間刻み幅， k は時間刻み幅である．差分近似式 (4) と (5) を (1) に代入すると

$$-\frac{1}{2}rv_{i-1,j+1} + (1+r - \frac{1}{2}\alpha k)v_{i,j+1} - \frac{1}{2}rv_{i+1,j+1}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2}rv_{i-1,j+1} + (1+r-\frac{1}{2}\alpha k)v_{i,j+1} - \frac{1}{2}rv_{i+1,j+1} \\
& = \frac{1}{2}rv_{i-1,j} + (1-r+\frac{1}{2}\alpha k)v_{i,j} + \frac{1}{2}rv_{i+1,j}
\end{aligned} \tag{6}$$

となる．ここで $r = k/h^2$ である．この場合の打ち切り誤差は $O(k^2 + h^2)$ である．差分スキーム (6) は $\alpha \leq 0$ の場合無条件安定である． $\alpha > 0$ の場合は次の安定条件

$$h \leq 2\sqrt{\frac{1}{\alpha}\sin^2\frac{i\pi}{2(N+1)}}$$

が存在する．

3 局所 Crank – Nicolson 法

本節でこの問題に対する局所 Crank – Nicolson 法の定式化を行うことにする．偏微分方程式 (1) の空間微分項を中心差分で置き換えると，半離散系

$$\frac{\partial v_{i,j}}{\partial t} = \frac{v_{i-1,j} - 2v_{i,j} + v_{i+1,j}}{h^2} + \alpha v_{i,j} \tag{7}$$

が得られる．これを整理して行列表現すると

$$\frac{dV(t)}{dt} = \frac{1}{h^2}AV(t) \tag{8}$$

となる．ここで $V(t) = [v(x_1, t), v(x_2, t), \dots, v(x_{N-1}, t)]^T$ であり，行列 A は三重対角行列

$$A = \begin{bmatrix} \alpha h^2 - 2 & 1 & & & 0 \\ & 1 & \alpha h^2 - 2 & 1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & & & & 1 & \alpha h^2 - 2 \end{bmatrix} \quad (9)$$

である。半離散系 (8) の初期ベクトル $V(0) = [u(x_1, 0), u(x_2, 0), \dots, u(x_{N-1}, 0)]^T$ に対する解は

$$V(t) = \exp\left(\frac{t}{h^2} A\right) V(0) \quad (10)$$

である。刻み幅 k に対して (10) 式は

$$V(t_{j+1}) = \exp\left(\frac{k}{h^2} A\right) V(t_j) \quad (11)$$

となる。

次に (11) 式の係数行列 $\exp(\frac{k}{h^2} A)$ の新たな近似式を導出するため次の補題を与える。

補題 1 行列 A は $A = \sum_{i=1}^S A_i$ の形に表現可能と仮定する。そのとき

$$\exp\left(\frac{k}{h^2} A\right) = \lim_{\sigma \rightarrow \infty} \left[\prod_{i=1}^S \exp\left(\frac{k}{\sigma h^2} A_i\right) \right]^\sigma \quad (12)$$

が成り立つ。ここで S と σ は正整数である。

補題 1 より、任意の $\sigma = \xi$ に対して、(12) 式を次式のように近似する。

$$\exp\left(\frac{k}{h^2} A\right) \approx \left\{ \prod_{i=1}^S \exp\left(\frac{k}{\xi h^2} A_i\right) \right\}^\xi \quad (13)$$

$$A_1 = \begin{bmatrix} (\alpha h^2 - 2) & 1 & 0 & & & 0 \\ 1 & (\alpha h^2 - 2)/2 & 0 & & & \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & \ddots & \ddots & 0 \\ & & & & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$A_i = \begin{bmatrix} 0 & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & (\alpha h^2 - 2)/2 & 1 & \\ & & 1 & (\alpha h^2 - 2)/2 & \\ & & & & \ddots \\ 0 & & & & & 0 \end{bmatrix}, \quad (2 \leq i \leq N-2) \quad (14)$$

$$A_{N-1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ & & & 0 & (\alpha h^2 - 2)/2 & 1 \\ 0 & & & 0 & 1 & (\alpha h^2 - 2) \end{bmatrix}.$$

ここで各 A_i は半定値行列である．各々の i に対して

$$\exp\left(\frac{k}{\xi h^2} A_i\right) \approx \left(I - \frac{k}{2\xi h^2} A_i\right)^{-1} \left(I + \frac{k}{2\xi h^2} A_i\right) \quad (15)$$

と近似すると時間に対する打ち切り誤差は $O(k^3)$ となる．(15) 式を (13) 式に代入すると次式が得られる：

と近似すると時間に対する打ち切り誤差は $O(k^3)$ となる. (15) 式を (13) 式に代入すると次式が得られる:

$$\exp\left(\frac{k}{h^2}A\right) \approx \left\{ \prod_{i=1}^{N-1} \left[\left(I - \frac{k}{2\xi h^2}A_i\right)^{-1} \left(I + \frac{k}{2\xi h^2}A_i\right) \right] \right\}^\xi. \quad (16)$$

ここで $u(x_i, t_j)$ の近似式を (11) 式と (16) 式から次のようなアルゴリズムで表すことができる:

$$V_1(t_{j+1}) = \left\{ \prod_{i=1}^{N-1} \left[\left(I - \frac{k}{2\xi h^2}A_i\right)^{-1} \left(I + \frac{k}{2\xi h^2}A_i\right) \right] \right\}^\xi V(t_j), \quad (17)$$

$$V_2(t_{j+1}) = \left\{ \prod_{i=1}^{N-1} \left[\left(I - \frac{k}{2\xi h^2}B_i\right)^{-1} \left(I + \frac{k}{2\xi h^2}B_i\right) \right] \right\}^\xi V(t_j), \quad (18)$$

$$\tilde{V}(t_{j+1}) = \frac{1}{2}[V_1(t_{j+1}) + V_2(t_{j+1})]. \quad (19)$$

ここで $B_i = A_{N-i}$ である. 1次元の熱問題と同様に局所 Crank - Nicolson 法はこの問題に対しても二次の精度を持ち, かつ無条件安定な陽的近似法である. 行列 $[I - (k/(2\xi h^2))A_i]$ は次式のように簡単に表すことができる:

$$[I - (k/(2\xi h^2))A_i] = \begin{bmatrix} I_{i-1} & & \\ & R_i & \\ & & I_{N-2-i} \end{bmatrix}. \quad (20)$$

ここで I_i は i 次の単位行列, R_i は

$$R_i = I_2 - \frac{r}{2\xi} \begin{bmatrix} (\alpha h^2 - 2)/2 & 1 \\ 1 & (\alpha h^2 - 2)/2 \end{bmatrix} \quad (21)$$

である。従って、 R_i の逆行列は

$$R_i^{-1} = \eta I_2 + \eta \frac{r}{2\xi} \begin{bmatrix} -(\alpha h^2 - 2)/2 & 1 \\ 1 & -(\alpha h^2 - 2)/2 \end{bmatrix}, \quad (22)$$

となる。ここで $\eta = 1/[(1 - (r/4\xi)(\alpha h^2 - 2))^2 - (r^2/4\xi^2)]$ である。従って、行列 $[I - (k/(2\xi h^2))A_i]$ の逆行列を次のように表すことができる：

$$[I - (k/(2\xi h^2))A_i]^{-1} = \begin{bmatrix} I_{i-1} & & \\ & R_i^{-1} & \\ & & I_{N-2-i} \end{bmatrix}. \quad (22)$$

差分スキーム (19) を上式のように陽的に表すことができ、大型行列を係数とする線形連立方程式を直接に解くことが不必要となる。これは計算上非常に重要なことである。次に数値例を示す。

4 数値例

偏微分方程式 (1) を初期条件

$$f(x) = 1.0 \quad \text{for } x \in (0, 1),$$

と境界条件 (3) を与えて解く。ここで $\alpha = 1$ と置く。この場合の理論解は

$$E(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} [1 - (-1)^n] \frac{2}{n\pi} \sin(n\pi x) \exp((1 - n^2\pi^2)t)$$

である. $N = 40, k = 0.1, t = 0.5$ の場合における結果を Fig. 1 に示す. また Table 1 にこのときの相対誤差を示す. Fig. 2 に $N = 40, k = 0.01, t = 0.5$ のときにおける振る舞いを示し, Table 2 に相対誤差を示す.

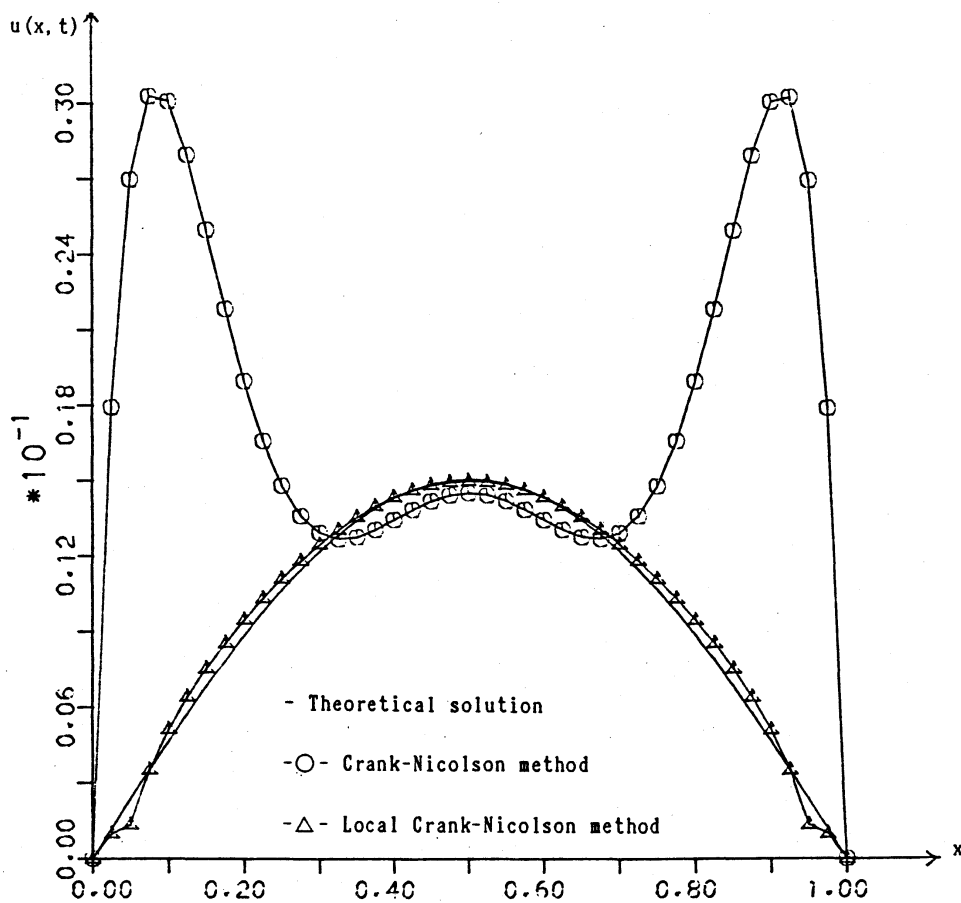


Fig. 1. $N=40, k=0.1, \xi = 40, t=0.5$

	$x_{20} = 0.5, t = 0.5$	Error
Theoretical solution	0.0150973	
Crank - Nicolson method	0.0145413	0.0368297
Local Crank - Nicolson method	0.0150239	0.0048609

Table 1. The comparison of the theoretical solution and numerical solutions with $N=40, k=0.1, \xi = 40$.

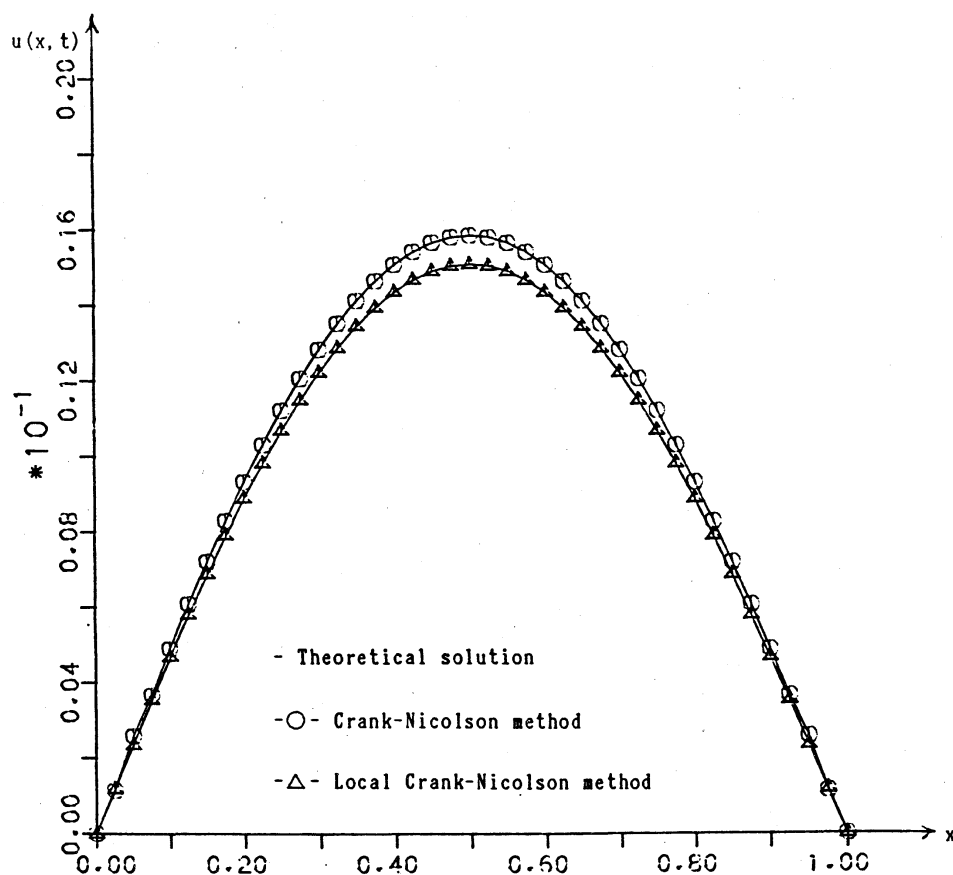


Fig. 2. $N=40$, $k=0.01$, $\xi = 40$, $t=0.5$

	$x_{20} = 0.5, \quad t = 0.5$	Error
Theoretical solution	0.0150973	
Crank – Nicolson method	0.0158624	0.0506736
Local Crank – Nicolson method	0.0150983	0.0000627

Table 2. The comparison of the theoretical solution and numerical solutions with $N=40$, $k=0.01$, $\xi = 40$.

Fig. 1 と Fig. 2 を比較すると古典的 Crank - Nicolson 法は Fig. 1 では解が大きく振動している。この原因は k を h より大きな値を与えたためである。Table 1 と Table 2 から区間 $(0,1)$ の中間点における相対誤差は古典的 Crank - Nicolson 法は 4% から 5% に変わるが全体的には k が h より小さいとき安定な解が得られる。しかし、局所 Crank-Nicolson 法の場合、Fig. 1, 2 から k と h の値の変化に無関係に安定な解が得られている。さらに、相対誤差は局所 Crank - Nicolson 法の場合 0.5% から 0.006% と改善されている。次に Fig. 3 と Fig. 4 に同じ刻み幅に対して、 $t=0.5$ と $t=1.0$ における近似解の振る舞いを示す。また、Table 3 と Table 4 に Fig. 3,4 に対応する相対誤差を示す。

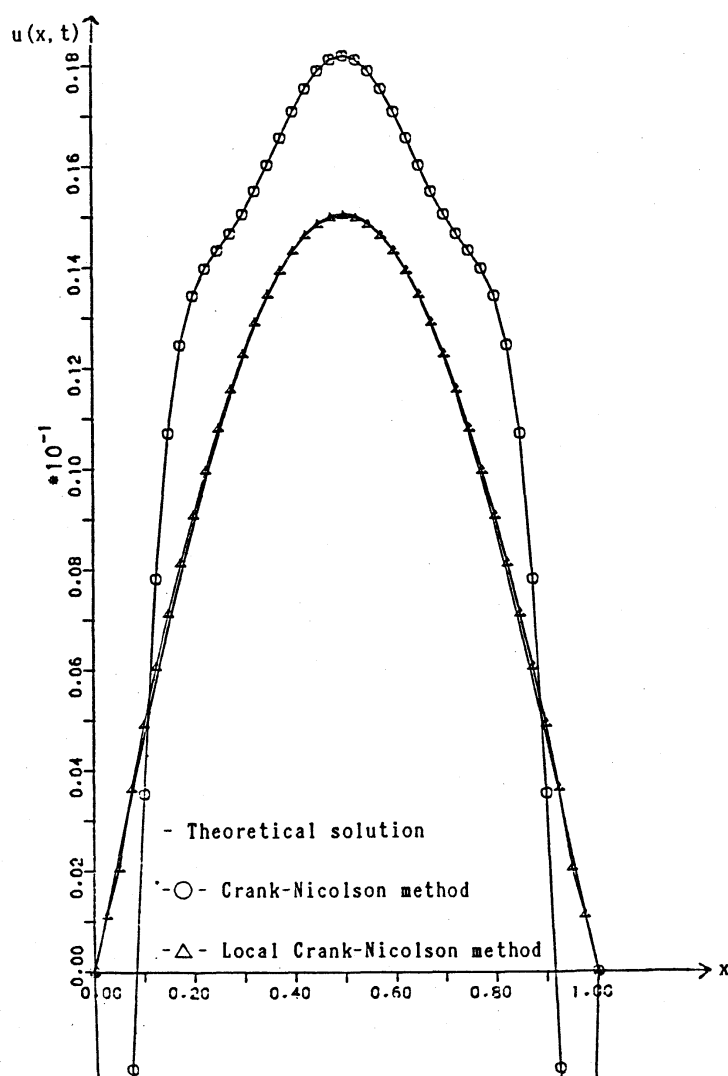


Fig. 3. $N=40$, $k=0.05$, $\xi=40$, $t=0.5$

	$x_{20} = 0.5, \quad t = 0.5$	Error
Theoretical solution	0.0150973	
Crank – Nicolson method	0.0182291	0.2074396
Local Crank – Nicolson method	0.0150506	0.0030975

Table 3. The comparison of the theoretical solution and numerical solutions with $N=40$, $k=0.05$, $\xi = 40$.

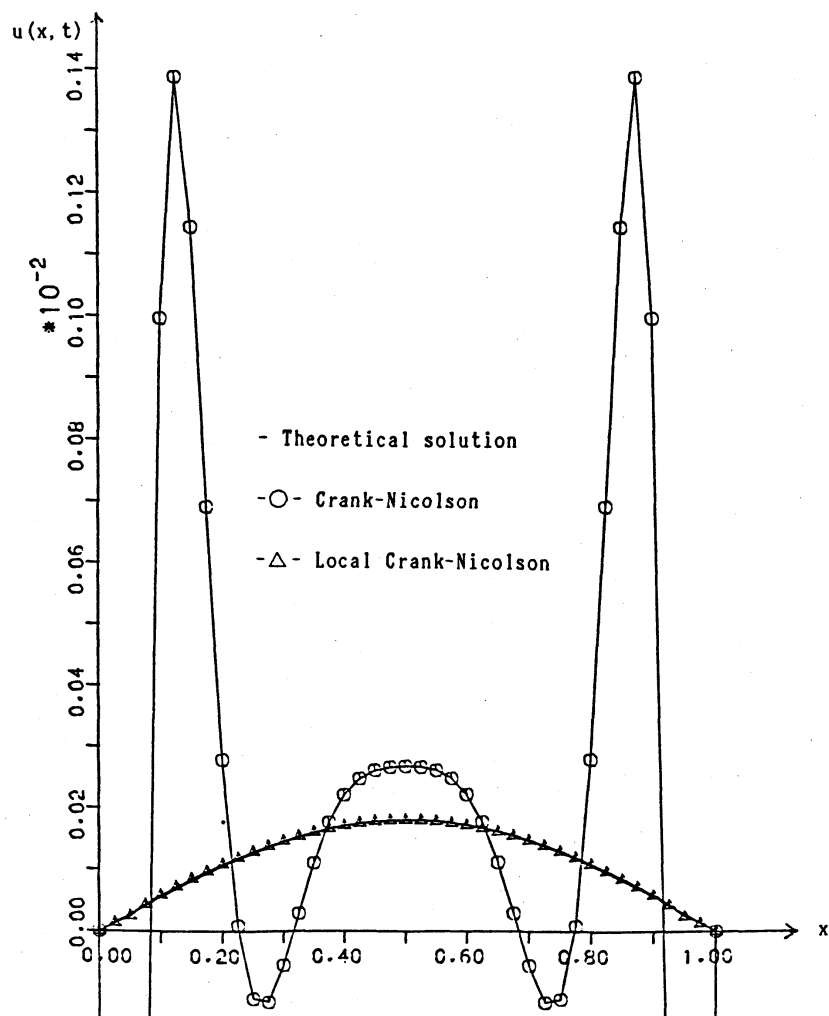


Fig. 4. $N=40$, $k=0.05$, $\xi = 40$, $t=1.0$

	$x_{20} = 0.5, \quad t = 1.0$	Error
Theoretical solution	0.0001790	
Crank – Nicolson method	0.0002665	0.4887137
Local Crank – Nicolson method	0.0001792	0.0009258

Table 4. The comparison of the theoretical solution and numerical solutions with $N=40$, $k=0.05$, $\xi = 40$.

以上の数値例から局所 Crank – Nicolson 法はここで取り上げた問題に対しても良い近似解が得られることから，熱問題以外の線形問題に対しても局所 Crank – Nicolson 法の適用が可能であると言える．また我々が取り扱った問題に対して，Crank – Nicolson 法は無条件安定でない．そのために安定性を保証するため， α に対する空間刻み幅の満足すべき条件を導出した．安定条件は局所 Crank – Nicolson 法に対しても同様である．しかし局所 Crank-Nicolson 法は適合条件を持たない初期関数に対しても高精度の解を与える．今後非線形問題に局所 Crank-Nicolson 法の適用を試みる予定である．

参考文献

- [1] Abdurishit, A., Sakakihara, M., and Niki, H., A Local Crank-Nicolson Method for solving the Heat Equation, Hiroshima Mathematical J.(To appear).
- [2] 阿不都外里 阿不都熱西堤, 榊原 道夫, 仁木 滉, 二次元熱方程式に対する局所 Crank-Nicolson 法, 日本応用数学会論文誌 (掲載確定) .