

分数階拡散方程式の数値解法について

A numerical method for fractional diffusion equations

小藤 俊幸 TOSHIYUKI KOTO

名古屋大学大学院情報科学研究科

Graduate School of Information Science, Nagoya University

e-mail : koto@is.nagoya-u.ac.jp

1. はじめに

通常の拡散では、平均二乗変位が

$$\langle x^2(t) \rangle \sim \mathcal{O}(t) \quad (1.1)$$

のように、時間 t に関して線形に増大する。これに対して、平均二乗変位が、

$$\langle x^2(t) \rangle \sim \mathcal{O}(t^\alpha) \quad (\alpha \neq 1) \quad (1.2)$$

のような挙動を示す現象も知られていて、異常拡散 (anomalous diffusion) と呼ばれている。特に、 $0 < \alpha < 1$ の場合を、劣拡散 (subdiffusion)、 $\alpha > 1$ の場合を、優拡散 (superdiffusion) と呼んで区別することもある。ここでは、前者、すなわち、劣拡散について考察する。現象の実例としては、アモルファス (非晶体) 半導体や有機 EL 素材における電荷移動、軽石やスポンジなどの多孔性物質における拡散、あるいは、高分子の緩和現象などが知られている ([8] の参考文献参照)。また、空間 1 次元の場合の数値モデルとして、

$$u(t, x) = \varphi(x) + I^\alpha \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\cdot, x) \right](t) \quad (t > 0) \quad (1.3)$$

の積分微分方程式が提案されている [10, 11]。ここで、 $\varphi(x)$ は既知関数、 I^α は t 変数に関する α 階積分

$$I^\alpha[f](t) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t \frac{f(\sigma)}{(t-\sigma)^{1-\alpha}} d\sigma \quad (1.4)$$

を表す。また、 $1-\alpha$ 階微分を

$$D^{1-\alpha}[f](t) = \frac{d}{dt} I^\alpha[f](t) \quad (1.5)$$

のように定義すると (リーマン・リウヴィルの分数階微分と呼ばれる)、(1.3) は

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = D^{1-\alpha} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\cdot, x) \right](t) & (t > 0) \\ \lim_{t \downarrow 0} u(t, x) = \varphi(x) \end{cases} \quad (1.6)$$

の形に書き直すことができる。近年、こうした方程式はさまざまな分野で注目され、数値解法の研究 [1, 5, 13, 14] も行われるようになってきた。ただし、解法の特性に関する研究、とりわけ、スキームの収束性に関する数学的な考察は、十分になされているとは言い難い状況である。ここでは、ひとつの基本的な数値スキームを取り上げ、その特性の解析を試みる。

2. 分数階拡散方程式の解析解

変数 x の範囲を $0 < x < 1$ に限定し、境界条件として、斉次ディリクレ条件を付加した

$$\begin{cases} u(t, x) = \varphi(x) + I^\alpha \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\cdot, x) \right](t) & (t > 0, 0 < x < 1) \\ u(t, 0) = u(t, 1) = 0 & (t > 0) \end{cases} \quad (2.1)$$

の初期値・境界値問題を考える。関数 $\varphi(x)$ が適当な条件をみたすとき、この問題はいわゆるフーリエの方法で解くことができ、解を三角関数とミッタグ・レフラー (Mittag-Leffler) 関数 (例えば, [3], Chapter XVIII や [2], 6.1.1 参照) と呼ばれる関数を用いて表すことができる。

ミッタグ・レフラー関数は

$$E_\alpha(z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{z^j}{\Gamma(\alpha j + 1)} \quad (2.2)$$

で定義される整関数である。指数関数のある種の一般化と考えられ、 λ を実数、 t を $t \geq 0$ の実数とすると、 $v(t) = E_\alpha(\lambda t^\alpha)$ は

$$v(t) = 1 + \lambda I^\alpha[v](t) \quad (2.3)$$

をみたすことが、分数階積分の基本的な関係式

$$I^\alpha[\phi_\beta](t) = \frac{\Gamma(\beta + 1)}{\Gamma(\alpha + \beta + 1)} t^{\alpha + \beta} \quad (\phi_\beta(t) = t^\beta, \beta > -1) \quad (2.4)$$

から示される。また、ミッタグ・レフラー関数は、例えば、

$$E_\alpha(z) = \frac{1}{2\alpha\pi i} \int_{\gamma(\epsilon, \mu)} \frac{\exp(\zeta^{1/\alpha})}{\zeta - z} d\zeta \quad (z \in G^-(\epsilon, \mu)) \quad (2.5)$$

のように表されることが知られている ([9], 30 頁, Theorem 1.1)。ここで、 ϵ は任意の正数、 μ は $\pi\alpha/2 < \mu < \pi\alpha$ の範囲の実数であって、 $\gamma(\epsilon, \mu)$ は、

$$1) \arg \zeta = -\mu, |\zeta| \geq \epsilon \quad 2) -\mu \leq \arg \zeta \leq \mu, |\zeta| = \epsilon$$

$$3) \arg \zeta = \mu, |\zeta| \geq \epsilon$$

の3つの部分からなる積分路 (図1 参照) である. 条件 $\pi\alpha/2 < \mu < \pi\alpha$ により, $\zeta \in \gamma(\varepsilon, \mu)$, $|\zeta| \geq \varepsilon$ のとき, $\operatorname{Re} \zeta^{1/\alpha} = -\nu|\zeta|^{1/\alpha}$ ($\nu = -\cos(\mu/\alpha) > 0$) が成り立つ. また, $G^-(\varepsilon, \mu)$ は $\gamma(\varepsilon, \mu)$ の左側の領域を表す. 特に, (2.5) から, j 階導関数について,

$$E_\alpha^{(j)}(z) = \frac{j!}{2\alpha\pi i} \int_{\gamma(\varepsilon, \mu)} \frac{\exp(\zeta^{1/\alpha})}{(\zeta - z)^{j+1}} d\zeta \quad (z \in G^-(\varepsilon, \mu)) \quad (2.6)$$

のような表示が得られ, 0 以下の実数に関して,

$$|E_\alpha^{(j)}(x)| \leq \frac{j! C_\alpha}{(1 + |x|)^{j+1}} \quad (x \leq 0) \quad (2.7)$$

が成り立つ. ここで, C_α は x, j には依存しない定数である.

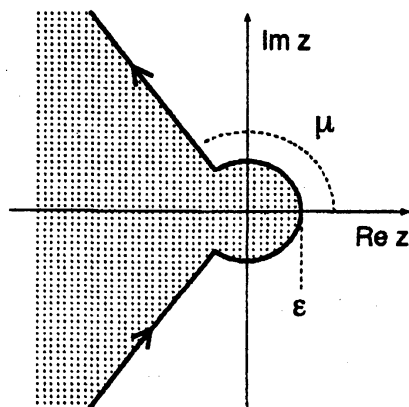


図1 積分表示 (2.5) の積分路

定理1 関数 $\varphi(x)$ のフーリエ正弦展開は絶対収束するものとする. すなわち,

$$\hat{\varphi}_k = 2 \int_0^1 \varphi(x) \sin(kx) dx \quad (k = 1, 2, \dots)$$

について

$$\varphi(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \hat{\varphi}_k \sin(kx), \quad \sum_{k=1}^{\infty} |\hat{\varphi}_k| < \infty \quad (2.8)$$

を仮定する. そのとき,

$$u(t, x) = \sum_{k=1}^{\infty} \hat{\varphi}_k E_\alpha(-k^2 \pi^2 t^\alpha) \sin(k\pi x) \quad (2.9)$$

は (絶対収束して) 初期値・境界値問題 (2.1) の解を与える.

証明 仮定 (2.8) と $j = 0$ に対する評価 (2.7) により, (2.9) は $\{t \geq 0, 0 \leq x \leq 1\}$ において一様収束して, $u(t, 0) = u(t, 1) = 0$ をみたす連続関数を定める. また, (2.9)

の両辺を x で 2 回微分すると

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(t, x) &= \sum_{k=1}^{\infty} \hat{\varphi}_k E_{\alpha}(-k^2 \pi^2 t^{\alpha}) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sin(k\pi x) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \hat{\varphi}_k \cdot (-k^2 \pi^2) E_{\alpha}(-k^2 \pi^2 t^{\alpha}) \sin(k\pi x)\end{aligned}\quad (2.10)$$

が得られる。実際, $j = 0$ に対する (2.7) から

$$\left| k^2 \pi^2 E_{\alpha}(-k^2 \pi^2 t^{\alpha}) \right| \leq \frac{C_{\alpha} k^2 \pi^2}{1 + k^2 \pi^2 t^{\alpha}} < C_{\alpha} t^{-\alpha} \quad (2.11)$$

が成り立ち, この評価と (2.8) を合わせると, (2.10) の級数は $t > 0$ において広義一様収束することが示される。

さらに, (2.11) と $t^{-\alpha}$ の可積分性, および, (2.8) を用いると, ルベークの収束定理により,

$$\begin{aligned}& I^{\alpha} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\cdot, x) \right](t) \\ &= \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t \frac{1}{(t-\sigma)^{1-\alpha}} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \hat{\varphi}_k \cdot (-k^2 \pi^2) E_{\alpha}(-k^2 \pi^2 \sigma^{\alpha}) \sin(k\pi x) \right) d\sigma \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} \hat{\varphi}_k \cdot (-k^2 \pi^2) \left(\frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_0^t \frac{E_{\alpha}(-k^2 \pi^2 \sigma^{\alpha})}{(t-\sigma)^{1-\alpha}} d\sigma \right) \sin(k\pi x)\end{aligned}$$

が示される。この式を (2.3) を用いて変形すると,

$$\begin{aligned}I^{\alpha} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\cdot, x) \right](t) &= \sum_{k=1}^{\infty} \hat{\varphi}_k (E_{\alpha}(-k^2 \pi^2 t^{\alpha}) - 1) \sin(k\pi x) \\ &= u(t, x) - \varphi(x)\end{aligned}$$

となって, (2.1) の第 1 式が得られる。(証明終)

解の一意性は, 以下のような評価式 (通常の放物型方程式の場合のエネルギー不等式の類似物) を用いて示される。以下, T を正数とし, $D_T = [0, T] \times [0, 1]$ とおく。

定理 2 $u(t, x)$ を D_T 上で定義された連続関数とし, x に関しては C^2 級 (u_x, u_{xx} が D_T 上の連続関数) であって, D_T 上の連続関数 $F(t, x)$ について

$$\begin{cases} u(t, x) = I^{\alpha} \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\cdot, x) \right](t) + F(t, x) & (0 \leq t \leq T, 0 < x < 1) \\ u(t, 0) = u(t, 1) = 0 & (0 \leq t \leq T) \end{cases} \quad (2.12)$$

をみたすものとする。そのとき,

$$\int_0^T \int_0^1 |u(t, x)|^2 dx dt \leq \int_0^T \int_0^1 |F(t, x)|^2 dx dt \quad (2.13)$$

が成り立つ。

証明 関数 $u(t, x)$ は $u(t, 0) = u(t, 1) = 0$ をみたすことから, (2.12) の第1式の両辺に $u(t, x)$ をかけて D_T 上で積分し, x について部分積分して変形すると,

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_0^1 |u(t, x)|^2 dx dt &= \int_0^T \int_0^1 u(t, x) I^\alpha \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\cdot, x) \right] (t) dx \\ &\quad + \int_0^T \int_0^1 u(t, x) F(t, x) dx dt \\ &= - \int_0^T \int_0^1 \frac{\partial u}{\partial x}(t, x) I^\alpha \left[\frac{\partial u}{\partial x}(\cdot, x) \right] (t) dx dt \\ &\quad + \int_0^T \int_0^1 u(t, x) F(t, x) dx dt \end{aligned} \quad (2.14)$$

のようになる。

一方, α 階積分 (1.4) を定める積分核 $t^{\alpha-1}/\Gamma(\alpha)$ のラプラス変換は $\lambda^{-\alpha}$ となつて, $\operatorname{Re} \lambda^{-\alpha} > 0$ ($\operatorname{Re} \lambda > 0$) をみたす。すなわち, 正型 (positive type) の核となり, $[0, T]$ 上の連続関数 $f(t)$ について

$$\int_0^T f(t) I^\alpha[f](t) dt \geq 0 \quad (2.15)$$

が成り立つ (例えば, [4], Chapter 16 参照)。したがって, (2.14) から

$$\int_0^T \int_0^1 |u(t, x)|^2 dx dt \leq \int_0^T \int_0^1 u(t, x) F(t, x) dx dt \quad (2.16)$$

が得られ, シュワルツの不等式を使って変形すると, (2.13) が得られる。(証明終)

注意 1 定理 1, 定理 2 は, 境界条件がノイマン条件の場合にも, ほぼ同じ形で (定理 1 では $\sin$ を $\cos$ におきかえる) 成立する。また, 通常の拡散方程式と同様 (例えば, [12], 第 II 部, 第 2 章, § 3), 定理 1 のような方法で非斉次項を含む方程式の解を構成することもできる。

3. 分数型台形則による半離散近似

初期値・境界値問題 (2.1) を若干一般化した

$$\begin{cases} u(t, x) = \varphi(x) + I^\alpha \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\cdot, x) \right] (t) + F(t, x) & (0 \leq t \leq T, 0 < x < 1) \\ u(t, 0) = g_0(t), u(t, 1) = g_1(t) & (0 \leq t \leq T) \end{cases} \quad (3.1)$$

の形の問題を対象として数値解法を述べる。ここで、 $F(t, x)$, $g_0(t)$, $g_1(t)$ は、いずれも与えられた連続関数とする。

通常の拡散方程式の場合から推測して、方程式 (3.1) の空間変数に関する離散化は、ある種のステイッフな方程式になると思われる。したがって、(3.1) の解を数値計算で求めようとする場合、 t に関する近似は優れた数値的安定性をもつことが望ましい。ここでは、1980 年代中頃に Ch. Lubich によって提案された分数型台形則 [6, 7] を用いることを考える。

自然数 N に対して、 $\Delta t = T/N$ とおき、区間 $[0, T]$ の

$$t_n = n\Delta t \quad (n = 0, 1, \dots, N)$$

のような分割（ステップ点）を考える。このとき、分数型台形則は、

$$\left(\frac{1+z}{1-z}\right)^\alpha = \sum_{k=0}^{\infty} \beta_k z^k \quad (3.2)$$

により定まる数列 β_k ($k = 0, 1, \dots$) を用いて、 α 階積分を

$$I^\alpha[f](t_n) \approx \Omega_{\Delta t}^\alpha[f](t_n) = \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^\alpha \sum_{k=0}^n \beta_{n-k} f(t_k) \quad (3.3)$$

のように近似する。2項展開の公式から、 β_k は

$$\beta_k = \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{-\alpha}{j} \binom{\alpha}{k-j} \quad (3.4)$$

と表すことができる。

分数型台形則の誤差を

$$\mathcal{E}_{\Delta t}^\alpha[f](t) = I^\alpha[f](t) - \Omega_{\Delta t}^\alpha[f](t) \quad (3.5)$$

のように表すとき、分数型多段階法の一般論 ([7], 特に, 707 頁の (2.4) 式, 709 頁の (3.3) 式) から、べき乗の関数 $\psi_\beta(t) = t^\beta$ ($\beta > -1$) については

$$\mathcal{E}_{\Delta t}^\alpha[\psi_\beta](t_n) = \mathcal{O}(t_n^{\alpha-1} \Delta t^q) \quad (q = \min\{\beta + 1, 2\}) \quad (3.6)$$

の評価が成り立つ。また、 $\Omega_{\Delta t}^\alpha$ を

$$\Omega_{\Delta t}^\alpha[f](t) = \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^\alpha \sum_{0 \leq k\Delta t \leq t} \beta_k f(t - k\Delta t) \quad (3.7)$$

のようにして $t \geq 0$ 全体に拡張すると、畳み込み

$$f * g(t) = \int_0^t f(t - \sigma)g(\sigma)d\sigma$$

に関する分数階積分の基本的な性質

$$I^\alpha[f * g] = I^\alpha[f] * g \quad (3.8)$$

に対応して,

$$\Omega_{\Delta t}^\alpha[f * g] = \Omega_{\Delta t}^\alpha[f] * g \quad (3.9)$$

の関係が成り立つ [7]. 特に, (3.8) と (3.9) の差を考えると

$$\mathcal{E}_{\Delta t}^\alpha[f * g] = \mathcal{E}_{\Delta t}^\alpha[f] * g \quad (3.10)$$

となる.

分数型台形則を用いて (3.1) の t 変数の離散化を行うと, 半離散スキーム

$$\begin{cases} u^n(x) = \varphi(x) + \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^\alpha \sum_{k=0}^n \beta_{n-k} \frac{d^2 u^k}{dx^2} + F^n(x) \\ u^n(0) = g_0(t_n), u^n(1) = g_1(t_n) \end{cases} \quad (n=1, 2, \dots, N) \quad (3.11)$$

が得られる. ここで, $u^n(x)$ は $u(t_n, x)$ の近似関数, $F^n(x) = F(t_n, x)$ である. 近似関数 $u^n(x)$ は, $u^0(x) = \varphi(x)$ とし, 2点境界値問題をつぎつぎに解いていくことにより, 順次決定される. このとき, 定理 2 の離散版として, 次の不等式が成り立つ.

定理 3 $u^n(x)$ ($n=1, 2, \dots, N$) は $[0, 1]$ 上の C^2 級関数であって, $[0, 1]$ 上の連続関数 $F^n(x)$ ($n=1, 2, \dots, N$) について

$$\begin{cases} u^n(x) = \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^\alpha \sum_{k=1}^n \beta_{n-k} \frac{d^2 u^k}{dx^2} + F^n(x) \\ u^n(0) = u^n(1) = 0 \end{cases} \quad (n=1, 2, \dots, N) \quad (3.12)$$

をみたすものとする. そのとき,

$$\sum_{n=1}^N \int_0^1 |u^n(x)|^2 dx \leq \sum_{n=1}^N \int_0^1 |F^n(x)|^2 dx \quad (3.13)$$

が成り立つ.

定理の証明のため, 補題をひとつ用意する.

補題 4 ζ_k ($k=0, 1, \dots$) を複素数とするとき, 任意の自然数 N に対して,

$$\operatorname{Re} \sum_{n=0}^N \left(\bar{\zeta}_n \sum_{k=0}^n \beta_{n-k} \zeta_k \right) \geq 0 \quad (3.14)$$

が成り立つ.

証明 z を複素数とし, $\rho_N(z) = \sum_{n=0}^N \zeta_n z^n$ とおく. $\left(\frac{1+z}{1-z}\right)^\alpha \rho_N(z)$ は単位円内部 $|z| < 1$ で正則で, べき級数展開したときの z^n の係数は, (3.2) により, $n \leq N$ については, $\sum_{k=0}^n \beta_{n-k} \zeta_k$ で与えられる. したがって, 直交関係

$$\int_0^{2\pi} e^{i(m-n)\theta} d\theta = \begin{cases} 2\pi & (m=n) \\ 0 & (m \neq n) \end{cases}$$

から, $0 \leq r < 1$ について

$$\int_0^{2\pi} \frac{1}{\rho_N(re^{i\theta})} \left(\frac{1+re^{i\theta}}{1-e^{i\theta}}\right)^\alpha \rho_N(re^{i\theta}) d\theta = 2\pi \sum_{n=0}^N \left(\bar{\zeta}_n \sum_{k=0}^n \beta_{n-k} \zeta_k\right) r^{2n} \quad (3.15)$$

が成り立つ.

1 次分数変換 $\frac{1+z}{1-z}$ は, 単位円内部を右半平面にうつすことから, (3.15) の (左辺の) 実部は 0 以上である. そこで, $r \uparrow 1$ の極限を考えると, (3.14) が得られる. (証明終)

定理 3 の証明 (3.12) の第 1 式に $u(x)$ をかけて積分し, 部分積分により変形すると,

$$\int_0^1 |u^n(x)|^2 dx = -\left(\frac{\Delta t}{2}\right)^\alpha \int_0^1 \frac{du^n}{dx} \sum_{k=1}^n \beta_{n-k} \frac{du^k}{dx} dx + \int_0^1 u^n(x) F^n(x) dx \quad (3.16)$$

が得られる. さらに, n に関する和をとり, $u^0(x) \equiv 0$ とおいて, (3.14) を用いると

$$\sum_{n=1}^N \int_0^1 |u^n(x)|^2 dx \leq \sum_{n=1}^N \int_0^1 u^n(x) F^n(x) dx \quad (3.17)$$

が成り立ち, シュワルツの不等式を使って変形すると, (3.13) が得られる. (証明終)

注意 2 スキーム (3.11) の第 2 式を $(u^n)'(0) = g_0(t_n)$, $(u^n)'(1) = g_1(t_n)$ のような形でおきかえるとノイマン条件の場合のスキームが得られる. このスキームについても, 定理 3 と同じ結果が成立する.

特別な場合には, 定理 3 により, 半離散スキーム (3.11) の収束性を示すことができる. 実際, $u(t, x)$ を (3.1) の厳密解とし, $\varepsilon^n(x) = u(t_n, x) - u^n(x)$ とおくと, $\varepsilon^n(x)$ は

$$\begin{cases} \varepsilon^n(x) = \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^\alpha \sum_{k=1}^n \beta_{n-k} \frac{d^2 \varepsilon^k}{dx^2} + \delta^n(x) & (n = 1, 2, \dots, N) \\ \varepsilon^n(0) = \varepsilon^n(1) = 0 \end{cases} \quad (3.18)$$

をみたす。ここで,

$$\delta^n(x) = \mathcal{E}_{\Delta t}^\alpha \left[\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\cdot, x) \right] (t_n) \quad (3.19)$$

である。したがって, 定理 3 により

$$\sum_{n=1}^N \int_0^1 |\varepsilon^n(x)|^2 dx \leq \sum_{n=1}^N \int_0^1 |\delta^n(x)|^2 dx \quad (3.20)$$

が成り立ち, 右辺の量が $N \rightarrow \infty$ において 0 に収束することが言えれば, スキーム (3.11) の収束性が示される。

例えば, m を $\alpha m \geq 2$ をみたす自然数とし, 初期関数 $\varphi(x)$ は

$$\sum_{k=1}^{\infty} k^{2(m+1)} |\hat{\varphi}_k| < \infty, \quad \hat{\varphi}_k = 2 \int_0^1 \varphi(x) \sin(kx) dx \quad (3.21)$$

をみたすものとする。関数 $\varphi(x)$ が十分滑らかであり, 高階導関数まで含めて端点で 0 になっていれば, この仮定がみたされる。整関数 $R_\alpha(z)$ を

$$E_\alpha(z) = \sum_{j=0}^{m-1} \frac{z^j}{\Gamma(\alpha j + 1)} + z^m R_\alpha(z)$$

で定義すると, 初期値・境界値問題 (2.1) の解 (2.9) は

$$u(t, x) = \sum_{j=0}^{m-1} t^{\alpha j} v_j(x) + \int_0^t (t - \sigma) w(\sigma, x) d\sigma \quad (3.22)$$

のように書き直される。ここで,

$$v_j(x) = \frac{(-1)^j \pi^{2j}}{\Gamma(\alpha j + 1)} \sum_{k=1}^{\infty} k^{2j} \hat{\varphi}_k \sin(k\pi x)$$

$$w(t, x) = (-1)^m \pi^{2m} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \sum_{k=1}^{\infty} k^{2m} \hat{\varphi}_k t^{\alpha m} R_\alpha(-k^2 \pi^2 t^\alpha) \sin(k\pi x)$$

であり, 条件 (3.21) により $v_j(x)$ は $0 \leq x \leq 1$ 上の C^2 級関数となる。また,

$$R_\alpha(z) = z^{-m} E_\alpha(z) - \sum_{j=0}^{m-1} \frac{z^{j-m}}{\Gamma(\alpha j + 1)}$$

に注意すると, (2.7) から

$$|R_\alpha^{(j)}(x)| \leq \frac{\hat{C}_{\alpha, j}}{(1 + |x|)^{j+1}} \quad (x \leq 0, j = 0, 1, 2) \quad (3.23)$$

が得られ ($\hat{C}_{\alpha,j}$ は x に依存しない定数), この評価と (3.21) を合わせると, $w(t, x)$ は $\{t \geq 0, 0 \leq x \leq 1\}$ 上の有界な連続関数であって, x については C^2 級 (w_{xx} は有界) となることが示される.

このとき, (3.19) に対応する量は

$$\delta^n(x) = \sum_{j=1}^{m-1} v_j''(x) \mathcal{E}_{\Delta t}^\alpha[\phi_{\alpha j}](t_n) + \mathcal{E}_{\Delta t}^\alpha[\phi_1] * w_{xx}(\cdot, x)(t_n) \quad (3.24)$$

のように表される. 誤差評価 (3.6) より, $|\mathcal{E}_{\Delta t}^\alpha[\phi_{\alpha j}](t_n)| \leq \mathcal{O}(\Delta t^\alpha n^{\alpha-1})$ が成り立ち,

$$\sum_{n=2}^N n^{2(\alpha-1)} < \int_1^N t^{2(\alpha-1)} dt = \begin{cases} \frac{1}{1-2\alpha} \left(1 - \frac{1}{N^{1-2\alpha}}\right) & (\alpha < 1/2) \\ \log N & (\alpha = 1/2) \\ \frac{1}{2\alpha-1} (N^{2\alpha-1} - 1) & (\alpha > 1/2) \end{cases}$$

と $\Delta t = T/N$ の関係に注意すると,

$$\sum_{n=1}^N |\mathcal{E}_{\Delta t}^\alpha[\phi_{\alpha j}](t_n)|^2 \rightarrow 0 \quad (N \rightarrow \infty)$$

が得られる. 同様な (ただし, 若干面倒な) 議論により

$$\sum_{n=1}^N \sup_{0 \leq x \leq 1} |\mathcal{E}_{\Delta t}^\alpha[\phi_1] * w_{xx}(\cdot, x)(t_n)|^2 \rightarrow 0 \quad (N \rightarrow \infty)$$

となることが示され, (3.20) の右辺は $N \rightarrow \infty$ のとき 0 に収束する.

4. 数値例

最後に, 数値例をひとつだけ示しておく. 初期関数 $\varphi(x)$ が C^2 級であるとき, (2.1) の解 $u(t, x)$ について, $v(t, x) = u(t, x) - \varphi(x)$ は

$$v(t, x) = I^\alpha \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(\cdot, x) + \varphi_{xx}(x) \right](t) = I^\alpha \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(\cdot, x) \right](t) + \frac{t^\alpha \varphi_{xx}(x)}{\Gamma(\alpha+1)}$$

をみたす. したがって, ($\varphi(0) = \varphi(1) = 0$ ならば)

$$\begin{cases} v(t, x) = I^\alpha \left[\frac{\partial^2 v}{\partial x^2}(\cdot, x) \right](t) + \frac{t^\alpha \varphi_{xx}(x)}{\Gamma(\alpha+1)} & (0 \leq t \leq T, 0 < x < 1) \\ v(t, 0) = v(t, 1) = 0 & (0 \leq t \leq T) \end{cases} \quad (4.1)$$

を解いて $v(t, x)$ を求め, $v(t, x)$ に $\varphi(x)$ を加えて, 解 $u(t, x)$ を求めることができる.

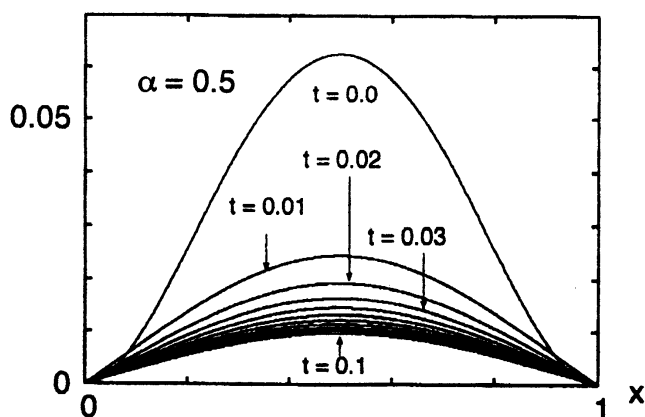


図 2 $\varphi(x) = x^2(1-x)^2$ の場合の (2.1) の近似解
 $(\Delta t = 0.1/1000, \Delta x = 1/1000)$

表 1 分数階段形則による近似解の誤差
 $(\Delta t = 0.1/N, \Delta x = 1/N)$

$\alpha \backslash N$	10	20	40	80	160	320	640
0.9	9.72	11.71	13.70	15.70	17.70	19.69	21.69
		1.99	2.00	2.00	2.00	2.00	2.00
0.8	9.57	11.56	13.55	15.54	17.53	19.53	21.52
		1.99	1.99	1.99	1.99	1.99	1.99
0.7	9.49	11.46	13.44	15.42	17.41	19.38	21.36
		1.97	1.98	1.98	1.98	1.98	1.97
0.6	9.53	11.43	13.37	15.33	17.29	19.14	20.77
		1.90	1.95	1.96	1.95	1.86	1.62
0.5	9.63	11.60	13.42	15.10	16.68	18.23	19.76
		1.97	1.82	1.68	1.59	1.55	1.53
0.4	9.68	11.55	13.14	14.61	16.05	17.46	18.87
		1.87	1.59	1.47	1.44	1.41	1.40
0.3	9.69	11.83	13.49	14.78	15.95	17.10	18.29
		2.14	1.66	1.30	1.16	1.16	1.19
0.2	9.53	11.80	14.08	15.81	17.05	17.96	18.92
		2.27	2.28	1.72	1.25	0.91	0.96
0.1	9.34	11.42	13.63	16.14	18.49	19.10	19.51
		2.08	2.21	2.51	2.35	0.61	0.41

図 2 は, $\varphi(x) = x^2(1-x)^2$ の場合について, そのようにして求めた近似解の様子を表している. また, 表 1 は, その場合の近似解の誤差を測定した結果を示している. 具体的には, $T = 0.1$ とし, 変数 x についても, $\Delta x = 1/N$ とおいて, 区間 $[0, 1]$ を

$$x_j = j\Delta x \quad (j = 0, 1, \dots, N)$$

のように分割し, 半離散スキーム (3.11) の 2 点境界値問題を通常を中心差分近似を用いて解いた際の結果である. 表 1 の各 α に対応する行の上段は

$$-\log_2 \max_{1 \leq j \leq N-1} |u_j^N - \hat{u}_{2j}^{2N}| \quad (4.2)$$

の値を表している. ここで, u_j^N は, t 変数, x 変数をそれぞれ N 分割して計算した際の $u(T, x_j)$ の近似値, $\hat{u}_{2j}^{2N}$ は $2N$ 分割して計算した際の同じ値の近似値であり, $\max_{1 \leq j \leq N-1} |u_j^N - \hat{u}_{2j}^{2N}|$ は $t = T$ における数値解の誤差の推定値とみなすことができる. 下段の値は, 上段の (N の場合と $N/2$ の場合の) 値の差である. いずれの α についても, N を大きくすると, 近似解が (数値的には) 一定の値に近づく様子が見られる.

参考文献

- [1] A. R. Bechelova, On the convergence of difference schemes for a diffusion equation of fractional order, *Ukrain. Mat. Zh.*, **50** (1998), 994–996.
- [2] H. Brunner, Collocation methods for Volterra integral and related functional differential equations, Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- [3] A. Erdélyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, F. G. Tricomi, *Higher transcendental functions. Vol. III*, McGraw-Hill, New York-Toronto-London, 1955.
- [4] G. Gripenberg, S.-O. Londen, O. Staffans, *Volterra integral and functional equations*, Cambridge University Press, Cambridge, 1990.
- [5] T. A. M. Langlands, B. I. Henry, The accuracy and stability of an implicit solution method for the fractional diffusion equation, *J. Comput. Phys.*, **205** (2005), 719–736.
- [6] Ch. Lubich, Fractional linear multistep methods for Abel-Volterra integral equations of the second kind, *Math. Comp.*, **45** (1985), 463–469.
- [7] Ch. Lubich, Discretized fractional calculus, *SIAM J. Math. Anal.*, **17** (1986), 704–719.

- [8] R. Metzler, J. Klafter, The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach, *Physics Reports*, **339** (2000), 1–77.
- [9] I. Podlubny, *Fractional differential equations*, Academic Press Inc., San Diego, 1999.
- [10] W. R. Schneider, W. Wyss, Fractional diffusion and wave equations, *J. Math. Phys.*, **30** (1989), 134–144.
- [11] W. Wyss, The fractional diffusion equation, *J. Math. Phys.*, **27** (1986), 2782–2785.
- [12] 吉田耕作, 伊藤清三編, 函数解析と微分方程式, 岩波書店, 1976.
- [13] S. B. Yuste, L. Acedo, An explicit finite difference method and a new von Neumann-type stability analysis for fractional diffusion equations, *SIAM J. Numer. Anal.*, **42** (2005), 1862–1874.
- [14] S. B. Yuste, Weighted average finite difference methods for fractional diffusion equations, *J. Comput. Phys.* (in press).