拡散方程式の陰的数値解法

拡散方程式の後退差分スキーム

以下の 1 次元拡散方程式を考える.

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial U(x,t)}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 U(x,t)}{\partial x^2} \quad (0 \leq x \leq 1), \\
&U(x,0) = f(x), \\
&U(0,t) = U(1,t) = 0
\end{aligned}
\tag{1}
$$

ここで, κ は拡散係数である.

(1) 式を時間方向には 1 段階差分スキーム, 空間方向には 2 次精度中心差分を用いて離散化する. $0 \leq x \leq 1$ を N 分割し, $U(i\Delta x, n\Delta t) = U_i^n$ と表すことにする[1]. そのとき離散化した式は,

$$
\begin{aligned}
\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{\Delta t} &= \kappa \frac{1}{\Delta x}\left[\alpha\left(\left.\frac{\partial U^n}{\partial x}\right|_{i+\frac{1}{2}} - \left.\frac{\partial U^n}{\partial x}\right|_{i-\frac{1}{2}}\right) + \beta\left(\left.\frac{\partial U^{n+1}}{\partial x}\right|_{i+\frac{1}{2}} - \left.\frac{\partial U^{n+1}}{\partial x}\right|_{i-\frac{1}{2}}\right)\right] \\
&= \kappa \frac{1}{\Delta x}\left[\alpha\left(\frac{U_{i+1}^n - U_i^n}{\Delta x} - \frac{U_i^n - U_{i-1}^n}{\Delta x}\right) + \beta\left(\frac{U_{i+1}^{n+1} - U_i^{n+1}}{\Delta x} - \frac{U_i^{n+1} - U_{i-1}^{n+1}}{\Delta x}\right)\right] \\
&= \kappa\left(\alpha\frac{U_{i+1}^n - 2U_i^n + U_{i-1}^n}{\Delta x^2} + \beta\frac{U_{i+1}^{n+1} - 2U_i^{n+1} + U_{i+1}^{n+1}}{\Delta x^2}\right).
\end{aligned}
\tag{2}
$$

ここで,

$\alpha = 1, \beta = 0$	オイラースキーム
$\alpha = 0, \beta = 1$	後退差分スキーム
$\alpha = \frac{1}{2}, \beta = \frac{1}{2}$	台形スキーム

である.

[1] 詳細は GFD ノートの 1 元拡散方程式を参照されたい.

今回は後退差分スキームを用いる. よって,

$$\frac{U_i^{n+1}-U_i^n}{\Delta t}=\kappa\left(\frac{U_{i+1}^{n+1}-2U_i^{n+1}+U_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2}\right). \tag{3}$$

今 $p\equiv\kappa\dfrac{\Delta t}{\Delta x^2}$ とし, 整理しなおすと,

$$-pU_{i+1}^{n+1}+(1+2p)U_i^{n+1}-pU_{i-1}^{n+1}=U_i^n \tag{4}$$

となる. 境界条件より $i=1$ のとき $U_0=0$ なので,

$$-pU_2^{n+1}+(1+2p)U_1^{n+1}=U_1^n.$$

$i=N-1$ では $U_N=0$ なので,

$$(1+2p)U_{N-1}^{n+1}-pU_{N-2}^{n+1}=U_{N-1}^n.$$

$i=1,2,\ldots,N-1$ について式を並べると,

$$\begin{aligned}
-pU_2^{n+1}+&(1+2p)U_1^{n+1} &&=U_1^n,\\
-pU_3^{n+1}+&(1+2p)U_2^{n+1}-pU_1^{n+1}&&=U_2^n,\\
&\vdots\\
-pU_{i+1}^{n+1}+&(1+2p)U_i^{n+1}-pU_{i-1}^{n+1}&&=U_i^n,\\
&\vdots\\
-pU_{N-1}^{n+1}+&(1+2p)U_{N-2}^{n+1}-pU_{N-3}^{n+1}&&=U_{N-2}^n,\\
&(1+2p)U_{N-1}^{n+1}-pU_{N-2}^{n+1}&&=U_{N-1}^n
\end{aligned}$$

となる. これは行列形式で表すことができて,

$$A\cdot\boldsymbol{U}^{n+1}=\boldsymbol{U}^n. \tag{5}$$

ここで $\boldsymbol{U}^n=(U_1^n,U_2^n,\ldots,U_{N-1}^n)^t$, $\boldsymbol{U}^{n+1}=(U_1^{n+1},U_2^{n+1},\ldots,U_{N-1}^{n+1})^t$. A は $N-1\times N-1$ の帯行列で,

$$A=\begin{pmatrix}
(1+2p) & -p & 0 & & & \\
-p & (1+2p) & -p & 0 & & \mathbf{0}\\
0 & -p & (1+2p) & -p & 0 & \\
 & & \ddots & & & \\
 & \mathbf{0} & & & -p & (1+2p)
\end{pmatrix} \tag{6}$$

である [2].

[2] 今回の A は三重対角行列である. 三重対角行列とは $|i-j|>1$ の成分がすべて 0 の行列のことである. つまり, 0 出ない成分が対角線上とその前後のみに分布している行列である.

LU 分解

$\boldsymbol{U}^{n+1}$ は A の逆行列 A^{-1} を用いて.

$$\boldsymbol{U}^{n+1} = A^{-1}\boldsymbol{U}^n$$

で計算できる. これを我々もよく知っているクラメル (Cramer) の公式で解く場合 $n+1$ 個の n 次行列式を計算をしなくてはならず非効率的である. 実際数値計算ではクラメルの公式を用いることはほとんどない. そのため, 他の解法で連立 1 次方程式を解かなければならない. そこで LU 分解を用いて計算する [3].

今, n 次連立 1 次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{7}$$

を考える. ただし, $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_N)$, $\boldsymbol{b} = (b_1, b_2, \ldots, b_N)$. A は n 次正方行列で,

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \tag{8}$$

である. A を

$$A = LU \tag{9}$$

と分解する手順を考える. ここで L は下三角行列, U は対角要素が 1 である上三角行列であり,

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}, \tag{10}$$

$$U = \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & 1 & \cdots & u_{3n} \\ & \mathbf{0} & & \ddots & \vdots \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \tag{11}$$

[3] 連立 1 次方程式の解法としては昔よく使われていたガウス・ジョルダン (Guss-Jordan) の掃き出し法がある. ガウス・ジョルダンの掃き出し法は LU 分解に比べて計算コストがかかるので現在は LU 分解を用いることが多い. 付録にてガウス・ジョルダンの掃き出し法の概要を紹介し, LU 分解との計算コストの比較を行っている.

とする. この分解を LU 分解という [4]. この分解を行うことで速度と精度が良いプログラムが比較的容易に書けるようになる. (9) 式を要素ごとに書く.

第 1 行

1 行目は

$$
\begin{aligned}
a_{11} &= l_{11}, \\
a_{12} &= l_{11}u_{12}, \\
a_{13} &= l_{11}u_{13}, \\
a_{14} &= l_{11}u_{14}, \\
a_{15} &= l_{11}u_{15}, \\
&\vdots.
\end{aligned}
$$

よって,

$$
\begin{aligned}
l_{11} &= a_{11}, \\
u_{12} &= \frac{a_{12}}{l_{11}}, \\
u_{13} &= \frac{a_{13}}{l_{11}}, \\
u_{14} &= \frac{a_{14}}{l_{11}}, \\
u_{15} &= \frac{a_{15}}{l_{11}}, \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

となる.

[4] U の対角要素が 1 の方法をドウリトル (Doolittle) 法, L の対角要素が 1 の方法をクラウト (Crout) 法と呼ぶ. 今回はドウリトル法を用いる.

第 2 行

2 行目は

$$
\begin{aligned}
a_{21} &= l_{21}, \\
a_{22} &= l_{21}u_{12} + l_{22}, \\
a_{23} &= l_{21}u_{13} + l_{22}u_{23}, \\
a_{24} &= l_{21}u_{14} + l_{22}u_{24}, \\
a_{25} &= l_{21}u_{15} + l_{22}u_{25}, \\
&\vdots.
\end{aligned}
$$

よって,

$$
\begin{aligned}
l_{21} &= a_{21}, \\
l_{22} &= a_{22} - l_{21}u_{12}, \\
u_{23} &= \frac{a_{23} - l_{21}u_{13}}{l_{22}}, \\
u_{24} &= \frac{a_{24} - l_{21}u_{14}}{l_{22}}, \\
u_{25} &= \frac{a_{25} - l_{21}u_{15}}{l_{22}}, \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

となる.

第 3 行

3 行目は

$$
\begin{aligned}
a_{31} &= l_{31}, \\
a_{32} &= l_{31}u_{12} + l_{32}, \\
a_{33} &= l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + l_{33}, \\
a_{34} &= l_{31}u_{14} + l_{32}u_{24} + l_{33}u_{34}, \\
a_{35} &= l_{31}u_{15} + l_{32}u_{24} + l_{33}u_{35}, \\
&\vdots.
\end{aligned}
$$

よって,

$$
\begin{aligned}
l_{31} &= a_{31}, \\
l_{32} &= a_{32} - l_{31}u_{12}, \\
l_{33} &= a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23}, \\
u_{34} &= \frac{a_{34} - l_{31}u_{14} - l_{32}u_{24}}{l_{33}}, \\
u_{35} &= \frac{a_{35} - l_{31}u_{15} - l_{32}u_{25}}{l_{33}}, \\
&\vdots
\end{aligned}
$$

となる.

第 k 行

k 行目は,

$i \leq k$ のとき

$$a_{ki} = \sum_{j=1}^{i-1} l_{kj}u_{ji} + l_{ki}.$$

よって,

$$l_{ki} = a_{ki} - \sum_{j=1}^{i-1}. \tag{12}$$

$i > k$ のとき

$$a_{ki} = \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}u_{ji} + l_{kk}u_{ki}.$$

よって,

$$u_{ki} = \frac{a_{ki} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}u_{ji}}{l_{kk}} \tag{13}$$

となる.

第 n 行

最終行である n 行目は,

$$
\begin{aligned}
a_{n1} &= l_{n1}, \\
a_{n2} &= l_{n1}u_{12} + l_{n2}, \\
&\vdots \\
a_{nn} &= \sum_{j=1}^{n-1} l_{nj}u_{jn} + l_{nn}.
\end{aligned}
$$

よって,

$$
\begin{aligned}
l_{n1} &= a_{n1}, \\
l_{n2} &= a_{n2} - l_{n1}u_{12}, \\
&\vdots \\
l_{nn} &= a_{nn} - \sum_{j=1}^{n-1} l_{nj}u_{jn}
\end{aligned}
$$

となる.

従って, 行列 A は

$$
A = \begin{pmatrix}
l_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\
l_{21} & l_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\
\vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\
l_{n1} & l_{n2} & \cdots & & l_{nn}
\end{pmatrix}, \tag{14}
$$

となる.

LU 分解法:前進代入と後退代入

行列 A が LU 分解できたので (7) 式と (9) 式から $\boldsymbol{x}$ を求めることができる.

今, $\boldsymbol{y} = U\boldsymbol{x}$ と置くと, (7) 式は 2 つの連立 1 次方程式

$$
L\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}, \tag{15}
$$

$$
U\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \tag{16}
$$

に分けることができる. (15) 式から $\boldsymbol{y}$ を求めて, その $\boldsymbol{y}$ を用いて (16) 式から $\boldsymbol{x}$ を求めれば (7) 式の解が求められたということである.

(15) 式と (16) 式は L と U が三角行列のために容易に解くことができる. (15) 式を要素ごとに第 1 式から第 n 式まで書くと,

$$\begin{aligned} l_{11}y_1 &= b_1, \\ l_{21}y_1 + l_{22}y_2 &= b_2, \\ l_{31}y_1 + l_{32}y_2 + l_{33}y_3 &= b_3, \\ &\vdots \\ \sum_{j=1}^{n-1} l_{nj}y_j + l_{nn}y_n &= b_n. \end{aligned}$$

よって,

$$\begin{aligned} y_1 &= \frac{b_1}{l_{11}}, \\ y_2 &= \frac{b_2 - l_{21}y_1}{l_{22}}, \\ y_3 &= \frac{b_3 - l_{31}y_1 - l_{32}y_2}{l_{33}}, \\ &\vdots \\ y_n &= \frac{b_n - \sum_{j=1}^{n-1} l_{nj}y_j}{l_{nn}} \end{aligned} \tag{17}$$

となる. これは $y_1,\ y_2,\ \ddots,\ y_n$ の順に次々と y を求めていくことになる. これを前進代入と呼ぶ. また, (16) 式を要素ごとに第 n 式から第 1 式まで書くと,

$$\begin{aligned} x_n &= y_n, \\ x_{n-1} + u_{n-1n}x_n &= y_{n-1}, \\ x_{n-2} + u_{n-2n-1}x_{n-1} + u_{n-2n}x_n &= y_{n-2}, \\ &\vdots \\ x_1 + \sum_{j=2}^{n} u_{1j}x_j &= y_n. \end{aligned}$$

よって,

$$\begin{aligned} x_n &= y_n, \\ x_{n-1} &= y_{n-1} - u_{n-1n}x_n, \\ x_{n-2} &= y_{n-2} - u_{n-2n-1}x_{n-1} - u_{n-2n}x_n, \\ &\vdots \\ x_1 &= y_n - \sum_{j=2}^{n} u_{1j}x_j \end{aligned} \tag{18}$$

となり, x_n から x_1 を逆順に求めることができる. これを, 後退代入と呼ぶ.

前進代入と後退代入を用いることで (7) 式の解を求めることができた.

一次元拡散方程式への LU 分解の適用

(5) 式と (6) 式を LU 分解をして解くことを考える. (6) 式は帯行列なので L と U も帯行列となる. よって, L と U をそれぞれ

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \mathbf{0} & \\ 0 & l_{32} & l_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \cdots & l_{n-1n-2} & l_{n-1n-1} \end{pmatrix},$$

$$U = \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & & \mathbf{0} & \\ 0 & 1 & u_{23} & & \\ 0 & 0 & 1 & u_{34} & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ \mathbf{0} & & \cdots & & 1 \end{pmatrix}$$

と表す. それぞれの要素について第 1 行目から第 3 行目までと最終行を書き表す.

第 1 行目

$$\begin{aligned} l_{11} &= 1 + 2p, \\ u_{12} &= -\frac{p}{l_{11}}, \\ u_{1i} &= 0 \qquad\qquad (i \geq 3). \end{aligned}$$

第 2 行目

$$
\begin{aligned}
l_{21} &= -p, \\
l_{22} &= 1 + 2p - l_{21}u_{12}, \\
u_{23} &= -\frac{p}{l_{22}}, \\
u_{2i} &= 0 && (i \geq 4).
\end{aligned}
$$

第 3 行目

$$
\begin{aligned}
l_{31} &= 0, \\
l_{32} &= -p, \\
l_{33} &= 1 + 2p - l_{32}u_{23} \\
u_{34} &= -\frac{p}{l_{33}}, \\
u_{3i} &= 0 && (i \geq 5).
\end{aligned}
$$

第 $n-1$ 行目

$$
\begin{aligned}
l_{n-1i} &= 0 && (i \leq n-3), \\
l_{n-1n-2} &= -p, \\
l_{n-1n-1} &= 1 + 2p - l_{n-1n-2}u_{n-2n-1}.
\end{aligned}
$$

後は,

$$
L\boldsymbol{y} = \boldsymbol{U}^n, D\boldsymbol{U}^{n+1} = \boldsymbol{y}
$$

として前進代入と後退代入を用いることで U^{n+1} を求めることができる.

参考文献

石岡 圭一, 2004,「スペクトル法による数値計算入門」, 東京大学出版会, ISBN:4130613057

荻原 弘尭, 2012,「1 次元拡散方程式」
URL:http://www.ep.sci.hokudai.ac.jp/g̃fdlab/comptech/resume/0119/2012_0202-ogihara.pdf

川上一郎, 2009,「数値計算の基礎」
URL:http://www7.ocn.ne.jp/k̃awa1/

渡辺善隆,「連立 1 次方程式の基礎知識 - 九州大学」URL:http://yebisu.cc.kyushu-u.ac.jp/w̃atanabe/RESERCH/MANUSCRIPT/KOHO/GEPP/GEPP.pdf

Tomonori Kouya, 2003,「ソフトウェアとしての数値計算」URL;http://202.253.248.12/gijutu/mathemati

平野拓一, 2004,「数値計算法（連立一次方程式の解法）」URL:http://www-antenna.ee.titech.ac.jp/h̃ira/h