P-18

拡散方程式の数値計算法と質量保存則

Numerical methods for the diffusion equation and the law of conservation of mass

○内藤愛 [1],
*Mana Naito[1]

Abstract: We consider the one-dimensional diffusion equation with Neumann boundary conditions. We then derive the forward and backward difference schemes and discuss the conservation of mass from both a theoretical and numerical perspective. Finally, two numerical examples are presented to study whether mass is conserved in the computations.

1. はじめに

次の拡散方程式を考える。

$$\begin{cases} u_t(x,t) = u_{xx}(x,t), & 0 < x < 1,\ t > 0, \\ u(x,0) = u_0(x), & 0 < x < 1, \\ u_x(0,t) = u_x(1,t) = 0, & t > 0. \end{cases} \tag{D}$$

本講演では前進差分法、後退差分法による (D) の数値計算法について述べる。次に (D) に対する質量保存則を導き、数値計算法と質量保存則との関係を述べる。台形則を用いて質量を計算すると、差分法による数値計算法は質量保存則が成り立つ場合と成り立たない場合があることを報告する。

2. 差分法

(D) を差分で置き換えた数値計算法を [1] に従って説明する。0 から 1 までを N 分割した場合を考える。正数 k を指定して、$i = -1, 0, 1, 2, 3, 4 \ldots, N, N+1, j = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots, t_J \leq T$ に対し、

$$x_i = \frac{1}{N} i, \quad t_j = jk \quad u_{ij} = u(x_i, t_j) \tag{1}$$

とおく。ただし、x_{-1}、x_{N+1} は仮想格子である。仮想格子における境界条件の数値解は中心差分を用いる。$x = 0$ のとき、

$$\frac{u_{-1,j} - u_{1,j}}{2h} \sim u_x(0, t_j) = 0 \tag{2}$$

$x = 1$ のとき、

$$\frac{u_{N-1,j} - u_{N+1,j}}{2h} \sim u_x(1, t_j) = 0 \tag{3}$$

より、$u_{-1,j} = u_{1,j}$、$u_{N+1,j} = u_{N-1,j}$ で定める。
時間微分は前進差分

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_j) \sim \frac{u_{i,j+1} - u_j}{k} \tag{4}$$

と後退差分

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x_i, t_j) \sim \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{k} \tag{5}$$

の２つの差分を用いる。空間 2 階微分は

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, t_j) \sim \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} \tag{6}$$

を用いる。$r = \frac{k}{h^2}$ として、(4) と (6) を (D) に用いると、

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + r(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) \tag{7}$$

と書ける。(5) と (6) を用いると、

$$u_{ij} = u_{i,j-1} + r(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j})$$

だから、

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} + r(u_{i+1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}) \tag{8}$$

と書ける。$0 \leq \theta \leq 1$ に対し、(7) に $1 - \theta$、(8) に θ の重みをつけると、

$$\begin{aligned} &u_{i,j+1} - r\theta(u_{i,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i-1,j+1}) \\ &\quad = u_{i,j} + r(1-\theta)(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}) \end{aligned}$$

が得られる。ここで、行列 D を次で定める。

$$D = \begin{bmatrix} -2 & 2 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 2 & -2 \end{bmatrix}. \tag{9}$$

ベクトル表示 $\vec{u}_{n+1}$、$\vec{u}_n$ を用いると、前進差分法と後退差分法はそれぞれ

$$\vec{u}_{n+1} = \vec{u}_n + rD\vec{u}_n \tag{10}$$

$$\vec{u}_{n+1} - rD\vec{u}_{n+1} = \vec{u}_n \tag{11}$$

と書くことができるので、$1 - \theta = \eta$ とすると、

$$\vec{u}_{n+1} - \theta rD\vec{u}_{n+1} = \vec{u}_n + r\eta D\vec{u}_n \tag{12}$$

となる。I を単位行列とすると、$I - \theta rD$ は逆行列を持つことがわかるので、(12) は

$$\vec{u}_{n+1} = (I - \theta rD)^{-1}(1 + r\eta D)\vec{u}_n \tag{13}$$

と表せる。

1: 日大理工・院 (前)・数学

3. 質量保存則

拡散方程式 (D) に対して、$u(x,t)$ は時刻 t、位置 x における密度を表すから $\int_0^1 u(x,t)dx$ は質量となる。(D) に対し、次の質量保存則が成り立つ。

定理 1. u を (D) の解とするとき、任意の $t>0$ に対して、

$$\int_0^1 u(x,t)dx = \int_0^1 u_0(x)dx \tag{14}$$

が成り立つ。

Proof. 質量を時間微分すると (D) より、

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\int_0^1 u(x,t)\,dx &= \int_0^1 u_t(x,t)\,dx \\ &= \int_0^1 u_{xx}(x,t)\,dx \\ &= u_x(1,t)-u_x(0,t) \\ &= 0\end{aligned} \tag{15}$$

が得られ、これを 0 から t まで積分すると、

$$\int_0^t \frac{d}{d\tau}\left(\int_0^1 u(x,\tau)\,dx\right)d\tau = 0 \tag{16}$$

が導かれる。さらに微分積分学の基本定理より

$$\int_0^1 u(x,t)\,dx - \int_0^1 u(x,0)\,dx = 0 \tag{17}$$

が得られ、初期条件 $u(x,0)=u_0(x)$ を代入することで、

$$\int_0^1 u(x,t)\,dx = \int_0^1 u_0(x)\,dx \tag{18}$$

に至る。 □

4. 数値計算

数値解法 (13) が質量保存則 (D) を満たすか否かを julia により調べた [2]。このために、$N=100, r=0.4, t_J=25000$ とした。また、

$$m(t) = \int_0^1 u(x,t)\,dx \tag{19}$$

は台形則によって求める。

4.1　$u_0(x) = 10000\cos(\pi x)$ のとき

$$u_0(x) = 10000\cos(\pi x) \tag{20}$$

とおく。すると、$m(0)=0$ となる。$\theta=0,0.5,1$ のとき、$j=0,12500,25000$ における $m(t)$ の値は次の表のようになった。

$j\backslash\theta$	0	0.5	1
0	-2.0×10^{-13}	-2.0×10^{-13}	-2.0×10^{-13}
12500	3.54×10^{-12}	-2.8×10^{-10}	-1.9×10^{-10}
25000	3.54×10^{-12}	-2.8×10^{-10}	-2.0×10^{-10}

4.2　$u_0(x) = 10000(60x^4-100x^3+30x^2+3)$ のとき

次に

$$u_0(x) = 10000(60x^4-100x^3+30x^2+3) \tag{21}$$

の場合を考える。(20) のときと同じように $m(0)=0$ となる。$\theta=0,0.5,1$ のとき、$j=0,12500,25000$ における $m(t)$ の値は次の表のようになった。

$j\backslash\theta$	0	0.5	1
0	-0.0002	-0.0002	-0.0002
12500	-0.0002	-0.0002	-0.0002
25000	-0.0002	-0.0002	-0.0002

4.3　考察

$u_0(x)$ を (21) で定めたとき、どの $\theta=0,0.5,1$ であっても

$$m(0) = m(12500k) = m(25000k), k = rh^2 = \frac{0.4}{10000} \tag{22}$$

が成り立っている。すなわち、(14) が数値解においても成り立つことがわかる。また、$m(0)=-0.0002$ は積分を台形則で計算したことによる誤差である。次に、$u_0(x)$ を (20) で定めたとき、どの $\theta=0,0.5,1$ であっても

$$m(0) \neq m(12500k), k = rh^2 = \frac{0.4}{10000} \tag{23}$$

である。$\theta=0,0.5$ のときは $m(12500k)=m(25000k)$ となるが $\theta=1$ のときは $m(12500k)\neq m(25000k)$ であった。数値解に対して (14) が成立していないのは打ち切り誤差が発生したためと考えられる。

5. 参考文献

[1] 堀之内總一, 酒井幸吉, 榎園茂, C による数値計算法入門 [第 2 版 新装版], 森北出版, 2021.

[2] Clemens Heitzinger, Algorithms with JULIA: Optimization, Machine Learning, and Differential Equations Using the JULIA Language, Springer, 2022.