差分方程式における解の安定条件

by T.Koyama

１．ラックスの同等定理

偏微分方程式を、

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Lu \tag{1}$$

とし、この初期値問題を解くことを考える。L は x に関する定係数線形微分演算子である。この初期値問題は、任意の初期値に対して解が一意に定まり、かつ解は初期値に連続的に依存すると仮定する。また、差分スキームを、

$$u_j^{(n+1)} = S\, u_j^{(n)} \tag{2}$$

とする。また時間および空間の差分間隔 $\Delta t, \Delta x$ の間に

$$\Delta x = h(\Delta t) \tag{3}$$

が成立し、$\Delta t \to 0$ の時、$h(\Delta t) \to 0$ とする。

ラックスの同等定理は、この差分方程式がもとの微分方程式の初期値問題における解に収束するための条件に関する定理である。

「ラックスの同等定理」

・差分演算子 S の n 乗 S^n のノルム（拡大率）$\|S^n\|$ に対して、$0 \le n\Delta t \le T$ を満たすいかなる n および Δt についても、

$$\|S^n\| \le C \tag{4}$$

となるような、正の定数 C が存在する場合には、微分方程式(1)に適合する差分スキーム(2)の解は、$\Delta t \to 0$ の極限で式(1)の解に収束する。

差分演算子 S が条件(4)を満たす時、S は安定であるという。その場合、差分スキーム(2)も安定である。つまり、ラックスの同等定理が成立すれば、微分方程式(1)に適合する差分スキームの解は、そのスキームが安定であるならば、$\Delta t \to 0$ の極限でもとの微分方程式に収束する。

ところで、式(4)はそのままでは使いづらいので、これを使いやすい形である「フォン・ノイマンの条件」に書き換える。

２．フォン・ノイマンの条件

式(2)が陽の差分方程式である場合を考え、差分演算子 S を

$$S = \sum_m c_m \Phi^m \tag{5}$$

と書く。Φ を演算子であり、任意の関数 $f(x)$ に作用させた時、

$$(\Phi f)(x) = f(x + \Delta x)$$

となるような、平行移動を表す演算子を意味する。また m は整数（負もあることに注意）で、c_m は一般に Δx や Δt を含む係数である。

　さて、式(1)の特解はフーリエ波にて表現できる。すなわち波数を ξ として、

$$u_j^{(n)} = g^n \exp(i\xi j\Delta x) \tag{6}$$

である。j は差分における空間方向ステップ数を意味し、例えば、空間差分分割において、x 方向の j 番目位置座標における x 成分は $x = j\Delta x$ となる。g は一般に Δx や Δt を含む関数で、g^n の指数部の n は通常の意味の n 乗である。式(6)を式(2)に代入しよう。

$$\begin{aligned}
u_j^{(n+1)} &= S\,u_j^{(n)} \\
g^{n+1}\exp(i\xi j\Delta x) &= S\,g^n\exp(i\xi j\Delta x) = \left[S\,g^n \exp(i\xi x)\right] \\
&= \sum_m c_m \Phi^m \{g^n \exp(i\xi j\Delta x)\} \\
&= \sum_m c_m\, g^n \exp\{i\xi(j+m)\Delta x\} \\
&= \sum_m c_m\, g^n \exp(i\xi m\Delta x)\exp(i\xi j\Delta x) \\
&= g^n \exp(i\xi j\Delta x)\sum_m c_m \exp(i\xi m\Delta x)
\end{aligned}$$

$$\therefore\ \ g = \sum_m c_m \exp(i\xi m\Delta x) \tag{7}$$

これより、g は、演算子 S によって時間を Δt だけ進めた時、$u_j^{(n)}$ がどれだけ拡大(縮小)されるかを表す数で、増幅率と呼ばれる。したがって、

$$|g|^n \le C \tag{8}$$

を満たす定数 C が存在すれば、差分スキームは安定である。これをもう少し利用しやすい形になおすと、

$$|g| \le 1 + K\Delta t \tag{9}$$

となり、正の定数 K が存在することが、差分スキームが安定である条件となる。g は、もともと $\Delta t, \Delta x$ の関数であるから、式(9)から、$\Delta x = h(\Delta t)$ の関係式が得られることになる。逆に、式(9)が満たされないような $\Delta x = h(\Delta t)$ の関係下では、$\Delta t \to 0$ の極限で差分方程式の解が、元の微分方程式の解に近づかないのである。（まれに近づくことがあるが、保証はない。）式(9)の条件式をフォン・ノイマンの条件という。ただし、重要な点は、この条件式は、フーリエ波を解として持つような微分方程式にしか適用できない点である。しかし、フーリエ解析可能な物理現象に対しては、式(9)を利用することが出来るので、式(9)の応用範囲は非常に広い。

　なお、一般的な偏微分方程式の安定条件は、固有値解析から求めることが出来る。すなわち、差分方程式は基本的に時空間における膨大な数の線形代数方程式を解く操作に帰着されるので、その際の固有値の収束条件から解の安定性に関する議論が一般的に可能であ

る。しかし、この詳細については、ここでは議論しない。なぜなら、材料の組織形成分野で、フーリエ解析できないような物理現象はほとんど考慮する必要がないからである。

・陰の差分方程式の場合($u^{(n+1)} = u^{(n)} + (\Delta t)\ f(u^{(n+1)}, t+\Delta t)$)

　この場合、差分方程式は一般的に、

$$S_1\, u_j^{(n+1)} = S_0\, u_j^{(n)} \tag{10}$$

の形式を取る。ここで演算子を、

$$S_0 = \sum_p c_p^{(0)} \Phi^p \quad , \quad S_1 = \sum_q c_q^{(1)} \Phi^q \tag{11}$$

と置けば、$S = S_1^{-1} S_0$ の増幅率として、

$$g = \frac{\sum_p c_p^{(0)} \exp(i\xi p\Delta x)}{\sum_q c_q^{(1)} \exp(i\xi q\Delta x)} \tag{12}$$

を得る。この後の議論は陽の差分方程式の場合と全く同様である。

　なお、連立偏微分方程式を解く場合、陽および陰の差分方程式の場合とも、増幅率 g はマトリックスになる。したがって、安定性の条件として、増幅行列 g のスペクトル半径(固有値の絶対値の最大値) γ に対して、

$$\gamma \le 1 + K\Delta t \tag{13}$$

が得られる。これもフォン・ノイマンの条件と呼ばれる。しかしこの場合、式(13)は安定性の必要条件にはなるが、必ずしも十分条件になるとは限らない。なお、式(9)は必要十分条件である。

3．具体例

　拡散方程式

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad , (D > 0) \tag{14}$$

における陽の差分方程式の安定条件を求めてみよう。

$$\begin{aligned} \frac{c_j^{(n+1)} - c_j^{(n)}}{\Delta t} &= D\frac{c_{j+1}^{(n)} - 2c_j^{(n)} + c_{j-1}^{(n)}}{(\Delta x)^2} \\ c_j^{(n+1)} &= c_j^{(n)} + D\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2}\left(c_{j+1}^{(n)} - 2c_j^{(n)} + c_{j-1}^{(n)}\right) \\ c_j^{(n+1)} &= c_j^{(n)} + \alpha\left(c_{j+1}^{(n)} - 2c_j^{(n)} + c_{j-1}^{(n)}\right) \end{aligned} \tag{15}$$

ここで、

$$\alpha = D\frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \tag{16}$$

と置いた。差分演算子を S として、式(15)を書き直すと、

$$c_j^{(n+1)} = S\,c_j^{(n)} \tag{17}$$

$$S = \Phi^0 + \alpha(\Phi^1 - 2\Phi^0 + \Phi^{-1}) = \alpha\Phi^1 + (1-2\alpha)\Phi^0 + \alpha\Phi^{-1} \tag{18}$$

である。増幅率 g は、

$$g = \sum_m c_m \exp(i\xi m\Delta x)$$

にて与えられるので、式(18)より、

$$\begin{aligned} g &= \alpha\exp(i\xi\Delta x) + (1-2\alpha) + \alpha\exp(-i\xi\Delta x) \\ &= (1-2\alpha) + 2\alpha\cos(\xi\Delta x) \\ &= 1 - 2\alpha\{1-\cos(\xi\Delta x)\} \\ &= 1 - 4\alpha\sin^2\left(\frac{\xi\Delta x}{2}\right) \end{aligned} \tag{19}$$

と計算される。フォン・ノイマンの条件式に代入してみよう。

$$\begin{aligned} &-1-K\Delta t \le g \le 1+K\Delta t \\ &-1-K\Delta t \le 1-4\alpha\sin^2\left(\frac{\xi\Delta x}{2}\right) \le 1+K\Delta t \\ &-2-K\Delta t \le -4\alpha\sin^2\left(\frac{\xi\Delta x}{2}\right) \le K\Delta t \\ &-K\Delta t \le 4\alpha\sin^2\left(\frac{\xi\Delta x}{2}\right) \le 2+K\Delta t \end{aligned} \tag{20}$$

ここで、左側の不等式は、左辺が負の値で右辺が正の値になるので自明である。右側の不等式が、どのような実数 ξ に対しても、成立する条件は、

$$\begin{aligned} &4\alpha\sin^2\left(\frac{\xi\Delta x}{2}\right) \le 2+K\Delta t \\ &\alpha\sin^2\left(\frac{\xi\Delta x}{2}\right) \le \frac{1}{2}+\frac{1}{4}K\Delta t \\ &\alpha\sin^2\left(\frac{\xi\Delta x}{2}\right) \le \alpha \le \frac{1}{2}+\frac{1}{4}K\Delta t \end{aligned} \tag{21}$$

である。したがって、差分方程式の解の安定条件は、

$$
\begin{aligned}
&\alpha \le \frac{1}{2} + \frac{1}{4} K \Delta t \\
&D \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \le \frac{1}{2} + \frac{1}{4} K \Delta t
\end{aligned}
\tag{22}
$$

と書かれる。いま、αの値を定数に固定するスキームを選択すれば、式(22)の左辺は当然ながら一定値である。さらに式(22)は$\Delta t \to 0$の極限においても成立しなくてはならないので、結局、

$$
D \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \le \frac{1}{2} \qquad , \ \therefore \ \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \le \frac{1}{2D} \tag{23}
$$

が必要十分条件となる。