

数値解法の適合性と安定性

数値解法を評価するとき重要になってくる概念に適合性と安定性がある。簡単に言えば、前者は方程式を離散化(差分近似)して得られた数値解法が極限においてもとの問題と一致するかどうかということであり、後者は計算過程で混入する諸々の誤差が発散するか否かということである。

適合性

偏微分方程式の解 $u(x, t)$ を求める数値解法を

$$u_j^{n+1} = F(u_{j+1}^n, u_j^n, u_{j-1}^n) \quad (1)$$

とする。この数値解法に現れる量 $u_j^{n+1}, u_{j+1}^n, u_j^n, u_{j-1}^n$ をそれらに対応する真の解に置き換えたとすると、ごく特殊な場合を除けば等式は成り立たない。しかし、 Δt と Δx の関係を一定に保ちつつ、 $\Delta t \rightarrow 0, \Delta x \rightarrow 0$ としたとき、左辺と右辺の差が 0 に収束することは望ましいことである。すなわち

$$\lim_{\substack{\Delta t \rightarrow 0 \\ \Delta x \rightarrow 0}} \{u(j\Delta x, (n+1)\Delta t) - F(u((j+1)\Delta x, n\Delta t), u(j\Delta x, n\Delta t), u((j-1)\Delta x, n\Delta t))\} = 0 \quad (2)$$

を満たすことは望ましいことである。このような性質が成り立つならば、数値解法 (2) はもとの偏微分方程式に適合しているという。

ここで拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (3)$$

を解く陽的数値解法

$$u_j^{n+1} = u_j^n + \rho(u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n), \quad (4)$$
$$\rho = \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$$

が $\rho = \text{一定}$ という条件のもとに適合性を満たしているかどうかを調べてみよう。上の式に現れる量をそれぞれ対応する真の解に置き換え、左辺と右辺の差を調べてみる。そうすると Taylor 展開より

$$\begin{aligned} & u(j\Delta x, (n+1)\Delta t) - u(j\Delta x, n\Delta t) \\ & - \rho \{u((j+1)\Delta x, n\Delta t) - 2u(j\Delta x, n\Delta t) + u((j-1)\Delta x, n\Delta t)\} \\ & = (u_t - u_{xx})\Delta t + \frac{\Delta t^2}{2}u_{tt} - \frac{\Delta t \Delta x^2}{12}u_{xxxx} + O(\Delta t^3) + O(\Delta t \Delta x^4) \quad (5) \\ & = \frac{\Delta t^2}{2} \left(1 - \frac{1}{6\rho}\right) u_{tt} + O(\Delta t^3) \end{aligned}$$

となる。ここで

$$u_t = u_{xx}, \quad u_{tt} = u_{xxxx}, \quad O(\Delta t^2) = O(\Delta x^4)$$

なる関係を用いた。これより $\rho = \text{一定}$ という条件の下に $\Delta t \rightarrow 0 (\Delta x \rightarrow 0)$ とすればこの値は 0 に収束する。したがって、数値解法 (4) は方程式 (3) に適合していることになる。

安定性

解法 (4) による数値解の安定性を調べるため

$$u_j^n = g^n \exp(i \xi j \Delta x), \quad i = \sqrt{-1} \quad (6)$$

という形の解を考える。これは結局、波数 ξ 、振幅 g^n の正弦波である。数値解法がこのような形の解を持つかどうかを確認するため、これを式 (4) に代入してみると、

$$g^{n+1} \exp(i \xi j \Delta x) = g^n \exp(i \xi j \Delta x) + \rho g^n \{ \exp(i \xi(j+1) \Delta x) - 2 \exp(i \xi j \Delta x) + \exp(i \xi(j-1) \Delta x) \}$$

となる。ここで両辺を $g^n \exp(i \xi j \Delta x)$ で割ると

$$g = (1 - 2\rho) + 2\rho \cos(\xi \Delta x) = 1 - 4\rho \sin^2\left(\frac{\xi \Delta x}{2}\right) \quad (7)$$

を得るので、 g が式 (7) で与えられていれば辻褄が合う。ここでこの式で与えられる g がすべての n に対して

$$|g|^n \leq C$$

となるような定数 $C > 0$ が存在すれば、解法 (4) による数値解は安定 (安心) である。

フォン・ノイマンの条件は Δt に無関係の定数 $K > 0$ が存在して

$$-1 - K \Delta t \leq g = 1 - 4\rho \sin^2\left(\frac{\xi \Delta x}{2}\right) \leq 1 + K \Delta t \quad (8)$$

となることである。この条件は

$$\rho = \frac{\Delta t}{\Delta x^2} \leq \frac{1}{2}$$

であれば満たされる。