

# Crank-Nicolson 法による 拡散方程式の数値解法

小高正嗣

2000 年 2 月 15 日

## 目次

1	はじめに	1
2	基本的な考え方	2
3	具体的な計算例	3
3.1	1次元の境界値固定問題	3
3.2	不等格子間隔, 拡散係数非一様の場合	5
4	参考文献	6

## 1 はじめに

本稿では Crank-Nicolson 法による拡散方程式の数値解法, および LAPCK を用いて実際に計算した結果について解説する.

Crank-Nicolson 法は陰解法に分類されるスキームである. その大まかな位置づけをおさえるために, 時間座標を  $t$ , 空間座標を  $x$  としてある変数  $A$  の時間発展方程式

$$\frac{\partial A(x, t)}{\partial t} = f(x, t),$$

を差分化して解くこと考える. 時間刻みを  $\Delta t$  として差分化すると,

$$\frac{A_i^{j+1} - A_i^{j-1}}{\Delta t} = f_i^{\theta},$$

と表される. なお  $A_i^j = A(i\Delta x, j\Delta t)$  である. ここで,

$$f_i^\theta = \theta f_i^{j+1} + (1 - \theta) f_i^j$$

,  $\theta = [0, 1]$  である.

$\theta$  の取り方によって実際の差分形式は変化する.  $\theta = 0$  の場合, 時刻  $(j + 1)\Delta t$  における  $A$  の値は時刻  $j\Delta t$  の  $A, f$  によって決められる. このような方法は陽解法と呼ばれる. 一方  $\theta \neq 0$  の場合, 時刻  $(j + 1)\Delta t$  における  $A$  の値を求めるためには時刻  $(j + 1)\Delta t$  の  $f$  (場合によっては  $A$  自身) が必要となる. このような方法は陰解法と呼ばれる. Crank-Nicolson 法は  $f(x, t)$  が拡散項であった場合に  $\theta = \frac{1}{2}$  として解く方法である. したがって陰解法の一つに分類される.

陰解法の特徴は計算安定性がよいことである. 陰解法を用いると連立一次方程式を解くことになる. したがって係数行列の性質がよほど悪くない限り, 時間刻みと空間刻みをどのように与えても計算を安定に進めることができる.

陽解法の場合は一般に時間刻みと空間刻みに何らかの制約が加わる. 例えば無次元化された 1 次元拡散方程式の場合, 無次元時間刻み  $\tau$  と無次元空間刻  $h$  は  $0 < \tau < \frac{h^2}{2}$  を満たすように与えなければならない. 空間解像度を 2 倍にすると全体の計算量は 8 倍になってしまう. 陰解法を用いる場合はこのような計算量の増大を避けることができる.

## 2 基本的な考え方

無次元化された 1 次元拡散方程式

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \quad (1)$$

を考える. ここで  $\psi = \psi(x, t), x = [0, 1], t = [0, T]$  とする. これを空間方向に 2 次心差分で差分化する.  $\psi_i(t) = \psi(ih, t)$  とすると,

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h^2}, \quad (2)$$

となる.

前節にならない時間方向にも差分化する.  $\psi_i^j = \psi(ih, j\tau)$  とすると,

$$\frac{\psi_i^{j+1} - \psi_i^j}{\tau} = \left( \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h^2} \right)^\theta. \quad (3)$$

ここで

$$\left( \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h^2} \right)^\theta = \theta \left( \frac{\psi_{i+1}^{j+1} - 2\psi_i^{j+1} + \psi_{i-1}^{j+1}}{h^2} \right) + (1-\theta) \left( \frac{\psi_{i+1}^j - 2\psi_i^j + \psi_{i-1}^j}{h^2} \right),$$

である.

Crank-Nicolson 法では  $\theta = \frac{1}{2}$  とするので,

$$\left( \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h^2} \right)^\theta = \frac{1}{2} \left( \frac{\psi_{i+1}^{j+1} - 2\psi_i^{j+1} + \psi_{i-1}^{j+1}}{h^2} + \frac{\psi_{i+1}^j - 2\psi_i^j + \psi_{i-1}^j}{h^2} \right),$$

となる. まとめると,

$$\frac{\psi_i^{j+1} - \psi_i^j}{\tau} = \frac{1}{2} \left( \frac{\psi_{i+1}^{j+1} - 2\psi_i^{j+1} + \psi_{i-1}^{j+1}}{h^2} + \frac{\psi_{i+1}^j - 2\psi_i^j + \psi_{i-1}^j}{h^2} \right), \quad (4)$$

または,

$$-\psi_{i-1}^{j+1} + 2 \left( \frac{h^2}{\tau} + 1 \right) \psi_i^{j+1} - \psi_{i+1}^{j+1} = \psi_{i-1}^j + 2 \left( \frac{h^2}{\tau} - 1 \right) \psi_i^j + \psi_{i+1}^j, \quad (5)$$

である.  $\psi^{j,T} = (\psi_1^j, \psi_2^j, \dots, \psi_i^j, \dots)$  とすると, 上式は

$$A\psi^{j+1} = B\psi^j, \quad (6)$$

と形式的に表される. 係数行列の第 1 行及び第 N 行の要素は境界条件により異なる.

### 3 具体的な計算例

#### 3.1 1次元の境界値固定問題

(1) 式を以下のような境界条件, 初期条件を与えて解く.  $x = 0, 1$  における境界条件は,

$$\psi = 0 \quad (t \geq 0), \quad (7)$$

とする.  $t = 0$  における初期条件は

$$u = 2x, \quad 0 \leq x \leq \frac{1}{2}, \quad (8)$$

$$u = 2(1 - x), \quad \frac{1}{2} \leq x \leq 1, \quad (9)$$

とする.

$h = 0.1, \tau = 0.01$  として計算する. この場合係数行列は,

$$\begin{aligned} A_{ii} &= 2(h^2/\tau + 1) = 4, & A_{i,i-1} &= -1, & A_{i,i+1} &= -1, \\ B_{ii} &= 2(h^2/\tau - 1) = 0, & B_{i,i-1} &= 1, & B_{i,i+1} &= 1, \end{aligned}$$

となる.  $t = 0.5$  までの結果を  $t = 0.1$  間隔で示したのが図 1 である.  $x$  方向には  $x = 0.5$  まで示した.

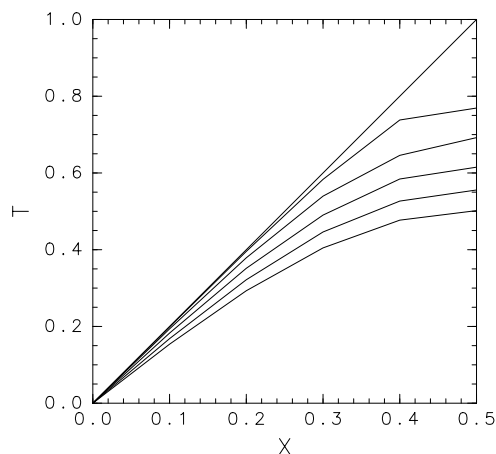


図 1: 1次元拡散方程式の計算結果.  $t = 0.5$  までの結果を  $t = 0.1$  間隔で示した.

### 3.2 不等格子間隔, 拡散係数非一様の場合

空間領域, 初期条件, 境界条件は全節と同じように与られるが, 拡散係数が空間的に非一様, 不等格子間隔の場合について考える. 解くべき式は

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( K \frac{\partial \psi}{\partial x} \right), \quad (10)$$

である.

全節と同様にまず空間方向に離散化する. ただし  $\psi, K$  は半整数格子点上にとる.

$$\frac{\partial \psi_{i+\frac{1}{2}}}{\partial t} = \frac{1}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \left[ (K_{i+\frac{3}{2}} + K_{i+\frac{1}{2}}) \frac{\psi_{i+\frac{3}{2}} - \psi_{i+\frac{1}{2}}}{\Delta x_{i+\frac{3}{2}} + \Delta x_{i+\frac{1}{2}}} - (K_{i+\frac{1}{2}} + K_{i-\frac{1}{2}}) \frac{\psi_{i+\frac{1}{2}} - \psi_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}} + \Delta x_{i-\frac{1}{2}}} \right]. \quad (11)$$

ただし  $\Delta x_{i+\frac{1}{2}} = x_{i+1} - x_i (i = [0, N-1])$  である.

さらに時間方向に離散化する.

$$\begin{aligned} \frac{\psi_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} - \psi_{i+\frac{1}{2}}^j}{\Delta t} &= \frac{1}{2\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \left[ (K_{i+\frac{3}{2}} + K_{i+\frac{1}{2}}) \frac{\psi_{i+\frac{3}{2}}^{j+1} - \psi_{i+\frac{1}{2}}^{j+1}}{\Delta x_{i+\frac{3}{2}} + \Delta x_{i+\frac{1}{2}}} - (K_{i+\frac{1}{2}} + K_{i-\frac{1}{2}}) \frac{\psi_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} - \psi_{i-\frac{1}{2}}^{j+1}}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}} + \Delta x_{i-\frac{1}{2}}} \right. \\ &\quad \left. + (K_{i+\frac{3}{2}} + K_{i+\frac{1}{2}}) \frac{\psi_{i+\frac{3}{2}}^j - \psi_{i+\frac{1}{2}}^j}{\Delta x_{i+\frac{3}{2}} + \Delta x_{i+\frac{1}{2}}} - (K_{i+\frac{1}{2}} + K_{i-\frac{1}{2}}) \frac{\psi_{i+\frac{1}{2}}^j - \psi_{i-\frac{1}{2}}^j}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}} + \Delta x_{i-\frac{1}{2}}} \right]. \quad (12) \end{aligned}$$

これを整理すると,

$$\begin{aligned} & -\frac{\Delta t}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\bar{K}_i}{\Delta x_i} \psi_{i-\frac{1}{2}}^{j+1} + \left[ 2 + \frac{\Delta t}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \left( \frac{\bar{K}_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} + \frac{\bar{K}_i}{\Delta x_i} \right) \right] \psi_{i+\frac{1}{2}}^{j+1} - \frac{\Delta t}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\bar{K}_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} \psi_{i+\frac{3}{2}}^{j+1} \\ & = +\frac{\Delta t}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\bar{K}_i}{\Delta x_i} \psi_{i-\frac{1}{2}}^j + \left[ 2 - \frac{\Delta t}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \left( \frac{\bar{K}_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} + \frac{\bar{K}_i}{\Delta x_i} \right) \right] \psi_{i+\frac{1}{2}}^j + \frac{\Delta t}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\bar{K}_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} \psi_{i+\frac{3}{2}}^j \end{aligned} \quad (13)$$

となる. ただしここで  $\bar{K}_i = (K_{i+\frac{1}{2}} + K_{i-\frac{1}{2}})/2$ ,  $\bar{\Delta x}_i = (\Delta x_{i+\frac{1}{2}} + \Delta x_{i-\frac{1}{2}})/2$  である. この式も (6) 式のように行列形式で表すことができる. 係数行列の要素は,

$$A_{ii} = 2 + \frac{\Delta t}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \left( \frac{\bar{K}_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} + \frac{\bar{K}_i}{\Delta x_i} \right), A_{i,i+1} = -\frac{\Delta t}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\bar{K}_{i+1}}{\Delta x_{i+1}}, A_{i,i-1} = -\frac{\Delta t}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\bar{K}_i}{\Delta x_i},$$

$$B_{ii} = 2 - \frac{\Delta t}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \left( \frac{\bar{K}_{i+1}}{\Delta x_{i+1}} + \frac{\bar{K}_i}{\Delta x_i} \right), B_{i,i+1} = \frac{\Delta t}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\bar{K}_{i+1}}{\Delta x_{i+1}}, B_{i,i-1} = \frac{\Delta t}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}}} \frac{\bar{K}_i}{\Delta x_i},$$

となる。ただし係数行列の第 1 行及び第 N 行の対角要素は、

$$A_{11} = 2 + \frac{\Delta t}{\Delta x_{\frac{1}{2}}} \left( \frac{\bar{K}_1}{\Delta x_1} + \frac{\bar{K}_0}{\Delta x_{\frac{1}{2}}/2} \right), \quad B_{11} = 2 - \frac{\Delta t}{\Delta x_{\frac{1}{2}}} \left( \frac{\bar{K}_1}{\Delta x_1} + \frac{\bar{K}_0}{\Delta x_{\frac{1}{2}}/2} \right),$$

$$A_{NN} = 2 + \frac{\Delta t}{\Delta x_{N-\frac{1}{2}}} \left( \frac{\bar{K}_N}{\Delta x_{N-\frac{1}{2}}/2} + \frac{\bar{K}_{N-1}}{\Delta x_{N-1}} \right), \quad B_{NN} = 2 - \frac{\Delta t}{\Delta x_{N-\frac{1}{2}}} \left( \frac{\bar{K}_N}{\Delta x_{N-\frac{1}{2}}/2} + \frac{\bar{K}_{N-1}}{\Delta x_{N-1}} \right),$$

となる。

全ての範囲で  $K = 1.0$  とした場合の計算結果を図 2 に、 $x > 0.5$  で  $K = 3.0$  とした場合の計算結果を図 3 に示す。

## 4 参考文献

- 東京大学理学部地球物理学科 演習テキスト編集グループ, 1994: 数値計算入門,  
[http://www.gfd-dennou.org/arch/zz1992/ta\\_comp/textcalc-1.3.ps.gz](http://www.gfd-dennou.org/arch/zz1992/ta_comp/textcalc-1.3.ps.gz) .
- 小国 力 訳, 1995: 行列計算パッケージ LAPACK 利用の手引, 丸善.
- 田端 正久, 1994: 微分方程式の数値解法 II, 岩波講座応用数学 13, 岩波書店.

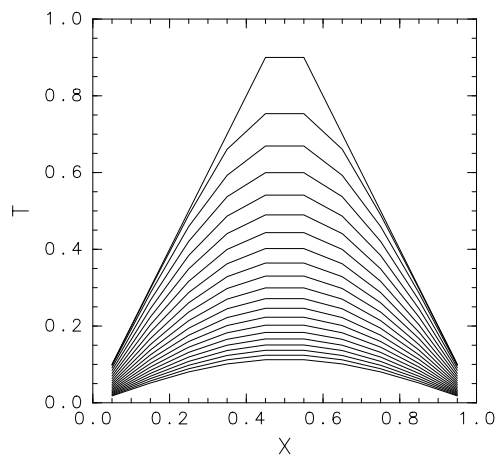


図 2: 1次元拡散方程式の計算結果.  $t = 2.0$  までの結果を  $t = 0.1$  間隔で示した.

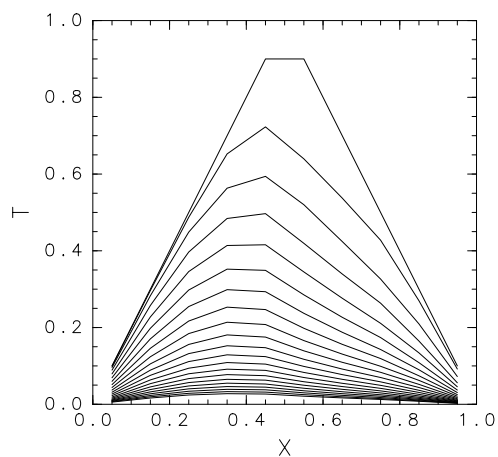


図 3: 1次元拡散方程式の計算結果.  $x > 0$  で  $K = 3.0$  とした場合. その他は図 2 と同じ.