

Neumann 境界条件下の熱方程式に対する差分法

桂田 祐史

2015 年 5 月 27 日, 2015 年 5 月 30 日, 2017 年 3 月 9 日 (微修正)

A3 横置きを使うのは初めてだ…

1 モデル問題

考える領域は長方形

$$\Omega := (0, W) \times (0, H) = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid 0 < x < W, 0 < y < H\}$$

とする (長方形の内部)。 $\partial\Omega$ はその境界 (長方形の 4 つの辺) を表すとする。

$$\begin{aligned} (1) \quad & u_t(x, y, t) = \Delta u(x, y, t) \quad ((x, y) \in \Omega, t > 0), \\ (2) \quad & \frac{\partial u}{\partial n}(x, y, t) = 0 \quad ((x, y) \in \partial\Omega, t > 0), \\ (3) \quad & u(x, y, 0) = f(x, y) \quad ((x, y) \in \bar{\Omega}). \end{aligned}$$

2 差分方程式

変数 (x, y, t) が動く範囲 $\bar{\Omega} \times [0, \infty) = [0, L] \times [0, H] \times [0, \infty)$ を差分格子に切る。

$N_x, N_y \in \mathbb{N}, \tau > 0$ に対して、

$$\begin{aligned} h_x &:= \frac{W}{N_x}, \quad h_y := \frac{H}{N_y}, \\ x_i &= ih_x \quad (i = 0, 1, \dots, N_x), \quad y_j = jh_y \quad (j = 0, 1, \dots, N_y), \quad t_n = n\tau \quad (n = 0, 1, \dots) \end{aligned}$$

とおき、 (x_i, y_j, t_n) を格子点と呼ぶ。

$u_{i,j}^n := u(x_i, y_j, t_n)$ ($0 \leq i \leq N_x, 0 \leq j \leq N_y, n = 0, 1, \dots$) の近似値 $U_{i,j}^n$ を求めることを目標にする。 $U_{i,j}^n$ は差分方程式の解として定義する。

熱方程式 $\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ において、 t に関する微分係数を前進差分近似すると、陽解法の方程式

$$\frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{\tau} = \frac{U_{i+1,j}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i-1,j}^n}{h_x^2} + \frac{U_{i,j+1}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i,j-1}^n}{h_y^2} \quad (0 \leq i \leq N_x, 0 \leq j \leq N_y)$$

が得られる。ここでは初めから θ 法の差分方程式を考えることにする。

$$\begin{aligned} (4) \quad \frac{U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n}{\tau} &= (1 - \theta) \left(\frac{U_{i+1,j}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i-1,j}^n}{h_x^2} + \frac{U_{i,j+1}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i,j-1}^n}{h_y^2} \right) \\ &+ \theta \left(\frac{U_{i+1,j}^{n+1} - 2U_{i,j}^{n+1} + U_{i-1,j}^{n+1}}{h_x^2} + \frac{U_{i,j+1}^{n+1} - 2U_{i,j}^{n+1} + U_{i,j-1}^{n+1}}{h_y^2} \right) \\ &\quad (0 \leq i \leq N_x, 0 \leq j \leq N_y, n = 0, 1, 2, \dots). \end{aligned}$$

両辺に τ をかけて、

$$\lambda_x := \frac{\tau}{h_x^2}, \quad \lambda_y := \frac{\tau}{h_y^2}$$

とおいて代入すると、

$$\begin{aligned} U_{i,j}^{n+1} - U_{i,j}^n &= (1-\theta) [\lambda_x (U_{i+1,j}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i-1,j}^n) + \lambda_y (U_{i,j+1}^n - 2U_{i,j}^n + U_{i,j-1}^n)] \\ &\quad + \theta [\lambda_x (U_{i+1,j}^{n+1} - 2U_{i,j}^{n+1} + U_{i-1,j}^{n+1}) + \lambda_y (U_{i,j+1}^{n+1} - 2U_{i,j}^{n+1} + U_{i,j-1}^{n+1})]. \end{aligned}$$

移項して ($U_{\circ\Delta}^{n+1}$ は左辺、 $U_{\circ\Delta}^n$ は右辺)

$$\begin{aligned} [1 + 2\theta(\lambda_x + \lambda_y)] U_{i,j}^{n+1} - \theta\lambda_x (U_{i+1,j}^{n+1} + U_{i-1,j}^{n+1}) - \theta\lambda_y (U_{i,j+1}^{n+1} + U_{i,j-1}^{n+1}) \\ = [1 - 2(1-\theta)(\lambda_x + \lambda_y)] U_{i,j}^n + (1-\theta)\lambda_x (U_{i+1,j}^n + U_{i-1,j}^n) + (1-\theta)\lambda_y (U_{i,j+1}^n + U_{i,j-1}^n). \end{aligned}$$

コンパクトに表すため

$$\begin{aligned} b_x &:= -\theta\lambda_x, & b_y &:= -\theta\lambda_y, & a &:= 1 + 2\theta(\lambda_x + \lambda_y), \\ c_x &:= (1-\theta)\lambda_x, & c_y &:= (1-\theta)\lambda_y, & d &:= 1 - 2(1-\theta)(\lambda_x + \lambda_y) \end{aligned}$$

とおくと、

$$(5) \quad aU_{i,j}^{n+1} + b_x(U_{i+1,j}^{n+1} + U_{i-1,j}^{n+1}) + b_y(U_{i,j+1}^{n+1} + U_{i,j-1}^{n+1}) = dU_{i,j}^n + c_x(U_{i+1,j}^n + U_{i-1,j}^n) + c_y(U_{i,j+1}^n + U_{i,j-1}^n) \\ (0 \leq i \leq N_x, 0 \leq j \leq N_y, n = 0, 1, 2, \dots).$$

境界条件については、仮想格子点 (x_{-1}, y_j, t_n) (x_{N+1}, y_j, t_n) を用いて、中心差分近似

$$u_x(0, y_j, t_n) \doteq \frac{u(x_1, y_j, t_n) - u(x_{-1}, y_j, t_n)}{h}, \quad u_x(N, y_j, t_n) \doteq \frac{u(x_{N+1}, y_j, t_n) - u(x_{N-1}, y_j, t_n)}{h}$$

を行うと次が得られる。

$$(6) \quad U_{-1,j}^n = U_{1,j}^n, \quad U_{N_x+1,j}^n = U_{N_x-1,j}^n \quad (j = 0, 1, 2, \dots, N_y, n = 1, 2, \dots),$$

$$(7) \quad U_{i,-1}^n = U_{i,1}^n, \quad U_{i,N_y+1}^n = U_{i,N_y-1}^n \quad (i = 0, 1, \dots, N_x, n = 1, 2, \dots).$$

初期条件からは

$$(8) \quad U_{i,j}^0 = f(x_i, y_j) \quad (0 \leq i \leq N_x, 0 \leq j \leq N_y).$$

(6), (7) を用いて、(5) に含まれる仮想格子点上の値 $U_{-1,j}^\ell, U_{N_x+1,j}^\ell, U_{i,-1}^\ell, U_{i,N_y+1}^\ell$ ($\ell = n, n+1$) を消去することが出来る。

例えば角点 $(0,0)$ における差分方程式は、(5) で $i = j = 0$ の場合の式

$$aU_{0,0}^{n+1} + b_x(U_{1,0}^{n+1} + U_{-1,0}^{n+1}) + b_y(U_{0,1}^{n+1} + U_{0,-1}^{n+1}) = dU_{0,0}^n + c_x(U_{1,0}^n + U_{-1,0}^n) + c_y(U_{0,1}^n + U_{0,-1}^n)$$

から

$$(9) \quad aU_{0,0}^{n+1} + 2b_xU_{1,0}^{n+1} + 2b_yU_{0,1}^{n+1} = dU_{0,0}^n + 2c_xU_{1,0}^n + 2c_yU_{0,1}^n.$$

他の3つの角点における差分方程式も同様にして、

$$(10) \quad aU_{N_x,0}^{n+1} + 2b_xU_{N_x-1,0}^{n+1} + 2b_yU_{N_x,1}^{n+1} = dU_{N_x,0}^n + 2c_xU_{N_x-1,0}^n + 2c_yU_{N_x,1}^n,$$

$$(11) \quad aU_{0,N_y}^{n+1} + 2b_xU_{1,N_y}^{n+1} + 2b_yU_{0,N_y-1}^{n+1} = dU_{0,N_y}^n + 2c_xU_{1,N_y}^n + 2c_yU_{0,N_y-1}^n,$$

$$(12) \quad aU_{N_x,N_y}^{n+1} + 2b_xU_{N_x-1,N_y}^{n+1} + 2b_yU_{N_x,N_y-1}^{n+1} = dU_{N_x,N_y}^n + 2c_xU_{N_x-1,N_y}^n + 2c_yU_{N_x,N_y-1}^n.$$

長方形の下の辺上にある格子点のうち、角点でない点における差分方程式は

$$aU_{i,0}^{n+1} + b_x(U_{i+1,0}^{n+1} + U_{i-1,0}^{n+1}) + b_y(U_{i,0+1}^{n+1} + U_{i,-1}^{n+1}) = dU_{i,0}^n + c_x(U_{i+1,0}^n + U_{i-1,0}^n) + c_y(U_{i,0+1}^n + U_{i,-1}^n)$$

から

$$(13) \quad aU_{i,0}^{n+1} + b_x(U_{i+1,0}^{n+1} + U_{i-1,0}^{n+1}) + 2b_yU_{i,1}^{n+1} = dU_{i,0}^n + c_x(U_{i+1,0}^n + U_{i-1,0}^n) + 2c_yU_{i,1}^n \quad (1 \leq i \leq N_x - 1).$$

長方形の上の辺上にある格子点のうち、角点でない点における差分方程式も同様にして

$$(14) \quad aU_{i,N_y}^{n+1} + b_x(U_{i+1,N_y}^{n+1} + U_{i-1,N_y}^{n+1}) + 2b_yU_{i,N_y-1}^{n+1} = dU_{i,N_y}^n + c_x(U_{i+1,N_y}^n + U_{i-1,N_y}^n) + 2c_yU_{i,N_y-1}^n \quad (1 \leq i \leq N_x - 1).$$

長方形の左の辺上にある格子点のうち、角点でない点における差分方程式は

$$aU_{0,j}^{n+1} + b_x(U_{1,j}^{n+1} + U_{-1,j}^{n+1}) + b_y(U_{0,j+1}^{n+1} + U_{0,j-1}^{n+1}) = dU_{0,j}^n + c_x(U_{1,j}^n + U_{-1,j}^n) + c_y(U_{0,j+1}^n + U_{0,j-1}^n)$$

から

$$(15) \quad aU_{0,j}^{n+1} + 2b_xU_{1,j}^{n+1} + b_y(U_{0,j+1}^{n+1} + U_{0,j-1}^{n+1}) = dU_{0,j}^n + 2c_xU_{1,j}^n + c_y(U_{0,j+1}^n + U_{0,j-1}^n) \quad (1 \leq j \leq N_y - 1).$$

長方形の右の辺上にある格子点のうち、角点でない点における差分方程式も同様にして

$$(16) \quad aU_{N_x,j}^{n+1} + 2b_xU_{N_x-1,j}^{n+1} + b_y(U_{N_x,j+1}^{n+1} + U_{N_x,j-1}^{n+1}) = dU_{N_x,j}^n + 2c_xU_{N_x-1,j}^n + c_y(U_{N_x,j+1}^n + U_{N_x,j-1}^n) \quad (1 \leq j \leq N_y - 1).$$

辺上にない格子点における差分方程式は

$$(17) \quad aU_{i,j}^{n+1} + b_x(U_{i+1,j}^{n+1} + U_{i-1,j}^{n+1}) + b_y(U_{i,j+1}^{n+1} + U_{i,j-1}^{n+1}) = dU_{i,j}^n + c_x(U_{i+1,j}^n + U_{i-1,j}^n) + c_y(U_{i,j+1}^n + U_{i,j-1}^n) \\ (1 \leq i \leq N_x - 1, 1 \leq j \leq N_y - 1).$$

その結果、 $(U_{ij}^n (0 \leq i \leq N_x, 0 \leq j \leq N_y))$ を既知として $U_{ij}^{n+1} (0 \leq i \leq N_x, 0 \leq j \leq N_y)$ についての $(N_x + 1)(N_y + 1)$ 個の 1 次方程式からなる連立方程式が得られる。

2.1 行列を対称にするための準備

U_{ij} を普通に並べてベクトルを作った場合、連立 1 次方程式の係数行列は対称行列にならない。

以下のように V_{ij} を定義して、 V_{ij} を並べてベクトルを作ると、連立 1 次方程式の係数行列を対称行列にすることが出来る。これは 1 次元の場合や、2 次元の固有値問題などでうまく行くことが分かっているもので、2 次元の熱方程式に対しても、以下に示すようにうまく行く (らしい— 成り立つとは信じていたけれど、確認したのは今回が初めて)。

$V_{i,j}^n$ を

$$V_{i,j}^n = \frac{U_{i,j}^n}{2} \quad ((i, j) = (0, 0), (N_x, 0), (0, N_y), (N_x, N_y)), \\ V_{i,j}^n = \frac{U_{i,j}^n}{\sqrt{2}} \quad (i = 0, N_x; j = 1, 2, \dots, N_y - 1), \\ V_{i,j}^n = \frac{U_{i,j}^n}{\sqrt{2}} \quad (i = 1, 2, \dots, N_x - 1; j = 0, N_y), \\ V_{i,j}^n = U_{i,j}^n \quad (i = 1, 2, \dots, N_x - 1; j = 1, 2, \dots, N_y - 1)$$

で定める。

以下、(i) (Ω) の角点、(ii) 角点のすぐ隣の辺上の格子点、(iii) 辺上の格子点のうち (i) と (ii) 以外のもの、(iv) 領域内部の格子点、の 4 通りに分けて考える。

2.1.1 角点

角点における差分方程式は

$$\begin{aligned}
 (18) \quad & aV_{0,0}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{1,0}^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{0,1}^{n+1} = dV_{0,0}^n + \sqrt{2}c_xV_{1,0}^n + \sqrt{2}c_yV_{0,1}^n, \\
 (19) \quad & aV_{N_x,0}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{N_x-1,0}^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{N_x,1}^{n+1} = dV_{N_x,0}^n + \sqrt{2}c_xV_{N_x-1,0}^n + \sqrt{2}c_yV_{N_x,1}^n, \\
 (20) \quad & aV_{0,N_y}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{1,N_y}^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{0,N_y-1}^{n+1} = dV_{0,N_y}^n + \sqrt{2}c_xV_{1,N_y}^n + \sqrt{2}c_yV_{0,N_y-1}^n, \\
 (21) \quad & aV_{N_x,N_y}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{N_x-1,N_y}^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{N_x,N_y-1}^{n+1} = dV_{N_x,N_y}^n + \sqrt{2}c_xV_{N_x-1,N_y}^n + \sqrt{2}c_yV_{N_x,N_y-1}^n.
 \end{aligned}$$

(1つ導出すれば納得できると思う。)

いずれの方程式も3項だけからなる。角点は4個なので4つの方程式しかない。

2.1.2 辺上の格子点で角点の隣のもの

辺上の格子点で角点の隣にあるものは、全部で8個ある。そこでの差分方程式は

$$\begin{aligned}
 (22) \quad & aV_{0,1}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{1,1}^{n+1} + b_y(V_{0,2}^{n+1} + \sqrt{2}V_{0,0}^{n+1}) = dV_{0,1}^n + \sqrt{2}c_xV_{1,1}^n + c_y(V_{0,2}^n + \sqrt{2}V_{0,0}^n), \\
 (23) \quad & aV_{0,N_y-1}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{1,N_y-1}^{n+1} + b_y(\sqrt{2}V_{0,N_y}^{n+1} + V_{0,N_y-2}^{n+1}) = dV_{0,N_y-1}^n + \sqrt{2}c_xV_{1,N_y-1}^n + c_y(\sqrt{2}V_{0,N_y}^n + V_{0,N_y-2}^n), \\
 (24) \quad & aV_{1,0}^{n+1} + b_x(V_{2,0}^{n+1} + \sqrt{2}V_{0,0}^{n+1}) + \sqrt{2}b_yV_{1,1}^{n+1} = dV_{1,0}^n + c_x(V_{2,0}^n + \sqrt{2}V_{0,0}^n) + \sqrt{2}c_yV_{1,1}^n, \\
 (25) \quad & aV_{1,N_y}^{n+1} + b_x(V_{2,N_y}^{n+1} + \sqrt{2}V_{0,N_y}^{n+1}) + \sqrt{2}b_yV_{1,N_y-1}^{n+1} = dV_{1,N_y}^n + c_x(V_{2,N_y}^n + \sqrt{2}V_{0,N_y}^n) + \sqrt{2}c_yV_{1,N_y-1}^n, \\
 (26) \quad & aV_{N_x-1,0}^{n+1} + b_x(\sqrt{2}V_{N_x,0}^{n+1} + V_{N_x-2,0}^{n+1}) + \sqrt{2}b_yV_{N_x-1,1}^{n+1} = dV_{N_x-1,0}^n + c_x(\sqrt{2}V_{N_x,0}^n + V_{N_x-2,0}^n) + \sqrt{2}c_yV_{N_x-1,1}^n, \\
 (27) \quad & aV_{N_x-1,N_y}^{n+1} + b_x(\sqrt{2}V_{N_x,N_y}^{n+1} + V_{N_x-2,N_y}^{n+1}) + \sqrt{2}b_yV_{N_x-1,N_y-1}^{n+1} = dV_{N_x-1,N_y}^n + c_x(\sqrt{2}V_{N_x,N_y}^n + V_{N_x-2,N_y}^n) + \sqrt{2}c_yV_{N_x-1,N_y-1}^n, \\
 (28) \quad & aV_{N_x,1}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{N_x-1,1}^{n+1} + b_y(V_{N_x,2}^{n+1} + \sqrt{2}V_{N_x,0}^{n+1}) = dV_{N_x,1}^n + \sqrt{2}c_xV_{N_x-1,1}^n + c_y(V_{N_x,2}^n + \sqrt{2}V_{N_x,0}^n), \\
 (29) \quad & aV_{N_x,N_y-1}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{N_x-1,N_y-1}^{n+1} + b_y(\sqrt{2}V_{N_x,N_y}^{n+1} + V_{N_x,N_y-2}^{n+1}) = dV_{N_x,N_y-1}^n + \sqrt{2}c_xV_{N_x-1,N_y-1}^n + c_y(\sqrt{2}V_{N_x,N_y}^n + V_{N_x,N_y-2}^n).
 \end{aligned}$$

いずれの方程式も4項からなり、 $\sqrt{2}$ という因子を含む項が2つある。8個の方程式がある。

ここが大事なところなので、1つだけでもチェックすることをお勧めする。

2.1.3 角点とその隣の点以外の辺上の格子点

角点とその隣の点以外の辺上の格子点における差分方程式は(左の辺、右の辺、下の辺、上の辺の順に)

$$\begin{aligned}
 (30) \quad & aV_{0,j}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{1,j}^{n+1} + b_y(V_{0,j+1}^{n+1} + V_{0,j-1}^{n+1}) = dV_{0,j}^n + \sqrt{2}c_xV_{1,j}^n + c_y(V_{0,j+1}^n + V_{0,j-1}^n) \quad (1 \leq j \leq N_y - 1), \\
 (31) \quad & aV_{N_x,j}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{N_x-1,j}^{n+1} + b_y(V_{N_x,j+1}^{n+1} + V_{N_x,j-1}^{n+1}) = dV_{N_x,j}^n + \sqrt{2}c_xV_{N_x-1,j}^n + c_y(V_{N_x,j+1}^n + V_{N_x,j-1}^n) \quad (1 \leq j \leq N_y - 1), \\
 (32) \quad & aV_{i,0}^{n+1} + b_x(V_{i+1,0}^{n+1} + V_{i-1,0}^{n+1}) + \sqrt{2}b_yV_{i,1}^{n+1} = dV_{i,0}^n + c_x(V_{i+1,0}^n + V_{i-1,0}^n) + \sqrt{2}c_yV_{i,1}^n \quad (1 \leq i \leq N_x - 1), \\
 (33) \quad & aV_{i,N_y}^{n+1} + b_x(V_{i+1,N_y}^{n+1} + V_{i-1,N_y}^{n+1}) + \sqrt{2}b_yV_{i,N_y-1}^{n+1} = dV_{i,N_y}^n + c_x(V_{i+1,N_y}^n + V_{i-1,N_y}^n) + \sqrt{2}c_yV_{i,N_y-1}^n \quad (1 \leq i \leq N_x - 1).
 \end{aligned}$$

いずれの方程式も4項からなり、 $\sqrt{2}$ という因子を含む項が1つある。

2.1.4 辺上にない格子点 (内部格子点)

もともと仮想格子点での値を含まないので、最初に導出した差分方程式のままである。念のために書いておくと、

$$aV_{i,j}^{n+1} + b_x(V_{i+1,j}^{n+1} + V_{i-1,j}^{n+1}) + b_y(V_{i,j+1}^{n+1} + V_{i,j-1}^{n+1}) = dV_{i,j}^n + c_x(V_{i+1,j}^n + V_{i-1,j}^n) + c_y(V_{i,j+1}^n + V_{i,j-1}^n) \quad (1 \leq i \leq N_x - 1, 1 \leq j \leq N_y - 1).$$

いずれの方程式も5項からなる。

3 差分方程式の行列・ベクトル表記

連立1次方程式 (9)– (17) を解くために、 $Ax = b$ (A は既知の行列、 b は既知のベクトル、 x が未知ベクトル) という形に書き表そう。
未知数を1次元的に並べてベクトルにする必要がある。 $0 \leq i \leq N_x$, $0 \leq j \leq N_y$ に対して、

$$(34) \quad V_\ell^n := V_{i,j}^n, \quad \ell := j + (N_y + 1)i,$$

(列の番号が先に進むので “column major order” と呼ばれる並べ方)、さらに

$$(35) \quad \mathbf{v}^n := \begin{pmatrix} V_0^n \\ V_1^n \\ \vdots \\ V_{N-1}^n \end{pmatrix}, \quad N := (N_x + 1)(N_y + 1)$$

とおく。

$s := N_y + 1$ とおく。(以下 V_{is+j}^ℓ は、2次元添字では $V_{i,j}^\ell$ であることを必要に応じて思い出すと良い。)

角点における差分方程式 (§2.1.1) は、(左下、左上、右下、右上の順に — これは以下の行列での登場順)

$$(36) \quad aV_0^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_1^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{N_y+1}^{n+1} = dV_0^n + \sqrt{2}c_yV_1^n + \sqrt{2}c_xV_{N_y+1}^n,$$

$$(37) \quad \sqrt{2}b_yV_{s-2}^{n+1} + aV_{s-1}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{2s-1}^{n+1} = \sqrt{2}c_yV_{s-2}^n + dV_{s-1}^n + \sqrt{2}c_xV_{2s-1}^n,$$

$$(38) \quad \sqrt{2}b_xV_{(N_x-1)s}^{n+1} + aV_{N_x s}^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{N_x s+1}^{n+1} = \sqrt{2}c_xV_{(N_x-1)s}^n + dV_{N_x s}^n + \sqrt{2}c_yV_{N_x s+1}^n,$$

$$(39) \quad \sqrt{2}b_xV_{N-1-s}^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{N-2}^{n+1} + aV_{N-1}^{n+1} = \sqrt{2}c_xV_{N-1-s}^n + \sqrt{2}c_yV_{N-2}^n + dV_{N-1}^n.$$

角点の隣の辺上の格子点 (§2.1.2) では(左下角点の上、左上角点の下、左下角点の右、左上角点の右、右下角点の左、右上角点の左、右下角点の上、右上角点の下の順に — これは以下の行列での登場順)

$$(40) \quad \sqrt{2}b_yV_0^{n+1} + aV_1^{n+1} + b_yV_2^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{s+1}^{n+1} = \sqrt{2}c_yV_0^n + dV_1^n + c_yV_2^n + \sqrt{2}c_xV_{s+1}^n,$$

$$(41) \quad b_yV_{N_y-2}^{n+1} + aV_{N_y-1}^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{N_y}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{s+N_y-1}^{n+1} = c_yV_{N_y-2}^n + dV_{N_y-1}^n + \sqrt{2}c_yV_{N_y}^n + \sqrt{2}c_xV_{s+N_y-1}^n,$$

$$(42) \quad \sqrt{2}b_xV_0^{n+1} + aV_s^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{s+1}^{n+1} + b_xV_{2s}^{n+1} = \sqrt{2}c_xV_0^n + dV_s^n + \sqrt{2}c_yV_{s+1}^n + c_xV_{2s}^n,$$

$$(43) \quad \sqrt{2}b_xV_{N_y}^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{s+N_y-1}^{n+1} + aV_{N_y+s}^{n+1} + b_xV_{N_y+2s}^{n+1} = \sqrt{2}c_xV_{N_y}^n + \sqrt{2}c_yV_{s+N_y-1}^n + dV_{N_y+s}^n + c_xV_{2s+N_y}^n,$$

$$(44) \quad b_xV_{(N_x-2)s}^{n+1} + aV_{(N_x-1)s}^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{(N_x-1)s+1}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{N_x s}^{n+1} = c_xV_{(N_x-2)s}^n + dV_{(N_x-1)s}^n + \sqrt{2}c_yV_{(N_x-1)s+1}^n + \sqrt{2}c_xV_{N_x s}^n,$$

$$(45) \quad b_xV_{(N_x-2)s+N_y}^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{(N_x-1)s+N_y-1}^{n+1} + aV_{(N_x-1)s+N_y}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{N_x s+N_y}^{n+1} = c_xV_{(N_x-2)s+N_y}^n + \sqrt{2}c_yV_{(N_x-1)s+N_y-1}^n + dV_{(N_x-1)s+N_y}^n + \sqrt{2}c_xV_{N_x s+N_y}^n,$$

$$(46) \quad \sqrt{2}b_xV_{(N_x-1)s+1}^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{N_x s}^{n+1} + aV_{N_x s+1}^{n+1} + b_yV_{N_x s+2}^{n+1} = \sqrt{2}c_xV_{(N_x-1)s+1}^n + \sqrt{2}c_yV_{N_x s}^n + dV_{N_x s+1}^n + c_yV_{N_x s+2}^n,$$

$$(47) \quad \sqrt{2}b_xV_{(N_x-1)s+N_y-1}^{n+1} + b_yV_{N_x s+N_y-2}^{n+1} + aV_{N_x s+N_y-1}^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{N_x s+N_y}^{n+1} = \sqrt{2}c_xV_{(N_x-1)s+N_y-1}^n + c_yV_{N_x s+N_y-2}^n + dV_{N_x s+N_y-1}^n + \sqrt{2}c_yV_{N_x s+N_y}^n.$$

それ以外の辺上の格子点における差分方程式 (§2.1.3) は、左の辺 (行列で最初の s 行)、右の辺 (行列で最後の s 行)、下の辺、上の辺の順に、

$$(48) \quad b_yV_{j-1}^{n+1} + aV_j^{n+1} + b_yV_{j+1}^{n+1} + \sqrt{2}b_xV_{s+j}^{n+1} = c_yV_{j-1}^n + dV_j^n + c_yV_{j+1}^n + \sqrt{2}c_xV_{s+j}^n \quad (1 \leq j \leq N_y - 1),$$

$$(49) \quad \sqrt{2}b_xV_{(N_x-1)s+j}^{n+1} + b_yV_{N_x s+j-1}^{n+1} + aV_{N_x s+j}^{n+1} + b_yV_{N_x s+j+1}^{n+1} = \sqrt{2}c_xV_{(N_x-1)s+j}^n + c_yV_{N_x s+j-1}^n + dV_{N_x s+j}^n + c_yV_{N_x s+j+1}^n \quad (1 \leq j \leq N_y - 1),$$

$$(50) \quad b_xV_{(i-1)s}^{n+1} + aV_{is}^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{is+1}^{n+1} + b_xV_{(i+1)s}^{n+1} = c_xV_{(i-1)s}^n + dV_{is}^n + \sqrt{2}c_yV_{is+1}^n + c_xV_{(i+1)s}^n \quad (1 \leq i \leq N_x - 1),$$

$$(51) \quad b_xV_{(i-1)s+N_y}^{n+1} + \sqrt{2}b_yV_{is+N_y-1}^{n+1} + aV_{is+N_y}^{n+1} + b_xV_{(i+1)s+N_y}^{n+1} = c_xV_{(i-1)s+N_y}^n + \sqrt{2}c_yV_{is+N_y-1}^n + dV_{is+N_y}^n + c_xV_{(i+1)s+N_y}^n \quad (1 \leq i \leq N_x - 1).$$

それ以外、つまり内部の格子点 ($1 \leq i \leq N_x - 1$, $1 \leq j \leq N_y - 1$) においては

$$aV_\ell^{n+1} + b_y(V_{\ell+1}^{n+1} + V_{\ell-1}^{n+1}) + b_x(V_{\ell+s}^{n+1} + V_{\ell-s}^{n+1}) = dV_\ell^n + c_y(V_{\ell+1}^n + V_{\ell-1}^n) + c_x(V_{\ell+s}^n + V_{\ell-s}^n).$$

で定めると連立1次方程式は

$$Av^{n+1} = Bv^n$$

となる。

コンパクトに表すため、記号の準備をする。 $m \in \mathbb{N}$ とするとき、 m 次単位行列を I_m と表す。 $m \geq 2$ のとき、 m 次正方形行列 J'_m, K'_m を

$$J'_m := \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & & & & & \\ \sqrt{2} & 0 & 1 & & & & \\ & 1 & 0 & 1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & 1 & 0 & 1 & \\ & & & & 1 & 0 & \sqrt{2} \\ & & & & & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix},$$

$$K'_m := 2I_m - J'_m = \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{2} & & & & & \\ -\sqrt{2} & 2 & -1 & & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & & -1 & 2 & -\sqrt{2} \\ & & & & & & -\sqrt{2} & 2 \end{pmatrix}$$

で定める ($'$ をつけているのは、Dirichlet 境界条件の場合と良く似ているが、少しだけ違うので、記号を変えた、ということである)。

ここで ($I := I_s, J := J_s$ として)

$$A = \begin{bmatrix} aI + b_y J' & \sqrt{2}b_x I & & & & & \\ \sqrt{2}b_x I & aI + b_y J' & b_x I & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & b_x I & aI + b_y J' & \sqrt{2}b_x I & \\ & & & & \sqrt{2}b_x I & aI + b_y J' & \end{bmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} a & \sqrt{2}b_x & & & & & \\ \sqrt{2}b_x & a & b_x & & & & \\ & b_x & a & b_x & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & b_x & a & b_x & \\ & & & & b_x & a & \sqrt{2}b_x \\ & & & & & \sqrt{2}b_x & a \end{pmatrix} \otimes I + \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & 1 & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & & & & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix} \otimes (b_y J')$$

$$= (aI_{N_x+1} + b_x J'_{N_x+1}) \otimes I_{N_y+1} + I_{N_x+1} \otimes (b_y J'_{N_y+1})$$

$$= ((1 + 2\theta(\lambda_x + \lambda_y))I_{N_x+1} - \theta\lambda_x J'_{N_x+1}) \otimes I_{N_y+1} + I_{N_x+1} \otimes (-\theta\lambda_y J'_{N_y+1})$$

$$= I_{N_x+1} \otimes I_{N_y+1} + \theta\lambda_y I_{N_x+1} \otimes (2I_{N_y+1} - J'_{N_y+1}) + \theta\lambda_x (2I_{N_x+1} - J'_{N_x+1}) \otimes I_{N_y+1}$$

$$= I_{N_x+1} \otimes I_{N_y+1} + \theta\lambda_y I_{N_x+1} \otimes K'_{N_y+1} + \theta\lambda_x K'_{N_x+1} \otimes I_{N_y+1}.$$

同様にして

$$\begin{aligned}
 B &= \begin{pmatrix} dI + c_y J' & \sqrt{2}c_x I & & & \\ \sqrt{2}c_x I & aI + c_y J' & c_x I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & c_x I & dI + c_y J' & \sqrt{2}c_x I \\ & & & \sqrt{2}c_x I & dI + c_y J' \end{pmatrix} \\
 &= (dI_{N_x+1} + c_x J'_{N_x+1}) \otimes I_{N_y+1} + I_{N_x+1} \otimes (c_y J'_{N_y+1}) \\
 &= ((1 - 2(1 - \theta)(\lambda_x + \lambda_y))I_{N_x+1} + (1 - \theta)\lambda_x J'_{N_x+1}) \otimes I_{N_y+1} + I \otimes ((1 - \theta)\lambda_y J'_{N_y+1}) \\
 &= I_{N_x+1} \otimes I_{N_y+1} + \theta\lambda_y I_{N_x+1} \otimes (2I_{N_y+1} - J'_{N_y+1}) + \theta\lambda_x (2I_{N_x+1} - J'_{N_x+1}) \otimes I_{N_y+1} \\
 &= I_{N_x+1} \otimes I_{N_y+1} - (1 - \theta)\lambda_y I_{N_x+1} \otimes K'_{N_y+1} - (1 - \theta)\lambda_x K'_{N_x+1} \otimes I_{N_y+1}.
 \end{aligned}$$

(もしも row major order ならば)

$$\begin{aligned}
 A &= I_{N_y+1} \otimes I_{N_x+1} + \theta\lambda_x I_{N_y+1} \otimes K'_{N_x+1} + \theta\lambda_y K'_{N_y+1} \otimes I_{N_x+1}, \\
 B &= I_{N_y+1} \otimes I_{N_x+1} - (1 - \theta)\lambda_x I_{N_y+1} \otimes K'_{N_x+1} - (1 - \theta)\lambda_y K'_{N_y+1} \otimes I_{N_x+1}
 \end{aligned}$$

となる。 x と y を入れ替えるだけである。))

A で θ となっている部分を $-(1 - \theta)$ に置き換えると B が得られる。

4 MATLAB プログラム

係数行列を用意するプログラムは独立させた。

`heat2n.m`¹, `heat2n_mat.m`² を入手して (~/Documents/MATLAB などに置き)、コマンド・ウィンドウで

```
>> heat2n
```

とすれば実行できる。

```
heat2n.m
% 長方形領域における熱方程式 u_t = Δ u (Dirichlet 境界条件) を解くための差分方程式
% A U^{n+1} = B U^n
% の行列 A, B を求める。
% Nx=3; Ny=3; hx=1/Nx; hy=1/Ny; theta=0.5; tau=0.5/(1/hx^2+1/hy^2); lamx=tau/hx^2; lamy=tau/hy^2;
% heat2d(Nx,Ny,lamx,lamy,theta)
% A =
% 1.5000 -0.1250 -0.1250 0
% -0.1250 1.5000 0 -0.1250
% -0.1250 0 1.5000 -0.1250
% 0 -0.1250 -0.1250 1.5000
% B =
% 0.5000 0.1250 0.1250 0
% 0.1250 0.5000 0 0.1250
% 0.1250 0 0.5000 0.1250
% 0 0.1250 0.1250 0.5000
function heat2d
a=0; b=2; c=0; d=1;
```

¹<http://nalab.mind.meiji.ac.jp/labo/text/heat2n.m>

²http://nalab.mind.meiji.ac.jp/labo/text/heat2n_mat.m

```

Nx=100;
Ny=50;
hx=(b-a)/Nx;
hy=(d-c)/Ny;
theta=0.5;
tau=0.5/(1/hx^2+1/hy^2);
lambdax=tau/hx^2;
lambday=tau/hy^2;

% 差分方程式  $A U^{n+1}=B U^n$  の行列
[A,B]=heat2n_mat(Nx,Ny,lambdax,lambday,theta);
if ((Nx <= 5) && (Ny <= 5))
    A
    B
end
% 格子点の座標ベクトル  $x=(x_1,x_2,\dots,x_{Nx+1})$ ,  $y=(y_1,y_2,\dots,y_{Ny+1})$ 
X=linspace(a,b,Nx+1);
Y=linspace(c,d,Ny+1);
% 格子点の  $x,y$  座標の配列  $X=\{X_{ij}\}$ ,  $Y=\{Y_{ij}\}$ 
[x,y]=meshgrid(X,Y);
% 初期値  $\sin(\pi x) \sin(\pi y)$ 
u=sin(pi*x) .* sin(pi*y);
if Nx<=5 && Ny<=5
    x
    y
    X
    Y
    u
end
%
% 初期値のグラフを描く
disp('初期値')
mesh(x,y,u);
[AL,AU,AP]=lu(A);
Tmax=1;
t=tau;
disp('繰り返し')
k=0;
dt=0.005;
skip=dt/tau;
v=u;
v(1,:)=v(1,)/sqrt(2); v(Ny+1,:)=v(Ny+1,)/sqrt(2);
v(:,1)=v(:,1)/sqrt(2); v(:,Nx+1)=v(:,Nx+1)/sqrt(2);
V=reshape(v,(Nx+1)*(Ny+1),1);
while t<=Tmax
    V=AU\ (AL\ (AP*(B*V)));
    if mod(k,skip)==0
        u(1:Ny+1,1:Nx+1)=reshape(V,Ny+1,Nx+1);
        u(1,:)=u(1,)*sqrt(2); u(Ny+1,:)=u(Ny+1,)*sqrt(2);
        u(:,1)=u(:,1)*sqrt(2); u(:,Nx+1)=u(:,Nx+1)*sqrt(2);
        meshc(x,y,u);
        axis([a b c d -1 1]);
        drawnow;
    end
    t=t+tau
    k=k+1;
end
end

```

```

heat2n_mat.m
% 長方形領域における熱方程式  $u_t = \Delta u$  (Dirichlet 境界条件) を解くための差分方程式
%  $A U^{n+1} = B U^n$ 
% の行列 A, B を求める。
% Nx=3; Ny=3; hx=1/Nx; hy=1/Ny; theta=0.5; tau=0.5/(1/hx^2+1/hy^2); lamx=tau/hx^2; lamy=tau/hy^2;
% heat2n_mat(Nx,Ny,lamx,lamy,theta)
% A =
%   1.5000   -0.1250   -0.1250         0
%   -0.1250   1.5000         0   -0.1250
%   -0.1250         0   1.5000   -0.1250
%         0   -0.1250   -0.1250   1.5000
% B =
%   0.5000   0.1250   0.1250         0
%   0.1250   0.5000         0   0.1250
%   0.1250         0   0.5000   0.1250
%         0   0.1250   0.1250   0.5000
function [A,B]=heat2d_mat(Nx,Ny,lambdax,lambday,theta)
    Ix=speye(Nx+1,Nx+1);
    Iy=speye(Ny+1,Ny+1);
    vx=[sqrt(2); ones(Nx-2,1); sqrt(2)];
    Jx=sparse(diag(vx,1)+diag(vx,-1));
    vy=[sqrt(2); ones(Ny-2,1); sqrt(2)];
    Jy=sparse(diag(vy,1)+diag(vy,-1));
    Kx=2*Ix-Jx;
    Ky=2*Iy-Jy;
% column first
    A=kron(Ix,Iy)+theta*lambday*kron(Ix,Ky)+theta*lambdax*kron(Kx,Iy);
    B=kron(Ix,Iy)-(1-theta)*lambday*kron(Ix,Ky)-(1-theta)*lambdax*kron(Kx,Iy);
% row first
    A=kron(Iy,Ix)+theta*lambdax*kron(Iy,Kx)+theta*lambday*kron(Ky,Ix);
    B=kron(Iy,Ix)-(1-theta)*lambdax*kron(Iy,Kx)-(1-theta)*lambday*kron(Ky,Ix);

```

長方形領域の熱方程式に対する差分法については、桂田 [1] がまとめ。

参考文献

[1] 桂田祐史：熱方程式に対する差分法 I — 区間における熱方程式 —, <http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/labo/text/heat-fdm-1.pdf> (1998 年～).