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

$$\Omega := (0, W) \times (0, H) = \left\{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \;\middle|\; 0 < x < W,\ 0 < y < H\right\}$$

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。

(1) $$u_t(x, y, t) = \triangle u(x, y, t) \quad ((x, y) \in \Omega,\ t > 0),$$

(2) $$\frac{\partial u}{\partial n}(x, y, t) = 0 \quad ((x, y) \in \partial\Omega,\ t > 0),$$

(3) $$u(x, y, 0) = f(x, y) \quad ((x, y) \in \overline{\Omega}).$$

2 差分方程式

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

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

$$h_x := \frac{W}{N_x}, \quad h_y := \frac{H}{N_y},$$

$$x_i = ih_x \quad (i = 0, 1, \cdots, N_x), \quad y_j = jh_y \quad (j = 0, 1, \cdots, N_y), \quad t_n = n\tau \quad (n = 0, 1, \cdots)$$

とおき、(x_i, y_j, t_n) を格子点と呼ぶ。

$u_{i,j}^n := u(x_i, y_j, t_n)$ $(0 \le i \le N_x,\ 0 \le j \le N_y,\ n = 0, 1, \cdots)$ 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 $\dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dfrac{\partial^2 u}{\partial y^2}$ 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

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

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。

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

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、

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

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

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

コンパクトに表すため

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

とおくと、

(5)
$$\begin{aligned} aU_{i,j}^{n+1} + b_x(U_{i+1,j}^{n+1} + U_{i-1,j}^{n+1}) + b_y(U_{i,j+1}^{n+1} + U_{i,j-1}^{n+1}) = dU_{i,j}^n + c_x(U_{i+1,j}^n + U_{i-1,j}^n) + c_y(U_{i,j+1}^n + U_{i,j-1}^n) \\ (0 \le i \le N_x,\ 0 \le j \le N_y,\ n = 0, 1, 2, \cdots). \end{aligned}$$

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

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

を行うと次が得られる。

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

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

初期条件からは

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

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

他の 3 つの角点における差分方程式も同様にして、

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

辺上にない格子点における差分方程式は

$$\begin{aligned} aU_{i,j}^{n+1} + b_x(U_{i+1,j}^{n+1} + U_{i-1,j}^{n+1}) + b_y(U_{i,j+1}^{n+1} + U_{i,j-1}^{n+1}) &= dU_{i,j}^n + c_x(U_{i+1,j}^n + U_{i-1,j}^n) + c_y(U_{i,j+1}^n + U_{i,j-1}^n) \\ &\qquad (1 \le i \le N_x - 1,\ 1 \le j \le N_y - 1). \end{aligned} \tag{17}$$

その結果、(U_{ij}^n $(0 \le i \le N_x,\ 0 \le j \le N_y)$ を既知として) U_{ij}^{n+1} $(0 \le i \le N_x,\ 0 \le j \le N_y)$ 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

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

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

$$aV_{0,0}^{n+1}+\sqrt{2}b_xV_{1,0}^{n+1}+\sqrt{2}b_yV_{0,1}^{n+1}=dV_{0,0}^n+\sqrt{2}c_xV_{1,0}^n+\sqrt{2}c_yV_{0,1}^n, \tag{18}$$

$$aV_{N_x,0}^{n+1}+\sqrt{2}b_xV_{N_x-1,0}^{n+1}+\sqrt{2}b_yV_{N_x,1}^{n+1}=dV_{N_x,0}^n+\sqrt{2}c_xV_{N_x-1,0}^n+\sqrt{2}c_yV_{N_x,1}^n, \tag{19}$$

$$aV_{0,N_y}^{n+1}+\sqrt{2}b_xV_{1,N_y}^{n+1}+\sqrt{2}b_yV_{0,N_y-1}^{n+1}=dV_{0,N_y}^n+\sqrt{2}c_xV_{1,N_y}^n+\sqrt{2}c_yV_{0,N_y-1}^n, \tag{20}$$

$$aV_{N_x,N_y}^{n+1}+\sqrt{2}b_xV_{N_x-1,N_y}^{n+1}+\sqrt{2}b_yV_{N_x,N_y-1}^{n+1}=dV_{N_x,N_y}^n+\sqrt{2}c_xV_{N_x-1,N_y}^n+\sqrt{2}c_yV_{N_x,N_y-1}^n. \tag{21}$$

(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

$$aV_{0,1}^{n+1}+\sqrt{2}b_xV_{1,1}^{n+1}+b_y(V_{0,2}^{n+1}+\sqrt{2}V_{0,0}^{n+1})=dV_{0,1}^n+\sqrt{2}c_xV_{1,1}^n+c_y(V_{0,2}^n+\sqrt{2}V_{0,0}^n), \tag{22}$$

$$aV_{0,N_y-1}^{n+1}+\sqrt{2}b_xV_{1,N_y-1}^{n+1}+b_y(\sqrt{2}V_{0,N_y}^{n+1}+V_{0,N_y-2}^{n+1})=dV_{0,N_y-1}^n+\sqrt{2}c_xV_{1,N_y-1}^n+c_y(\sqrt{2}V_{0,N_y}^n+V_{0,N_y}^n), \tag{23}$$

$$aV_{1,0}^{n+1}+b_x(V_{2,0}^{n+1}+\sqrt{2}V_{0,0}^{n+1})+\sqrt{2}b_yV_{1,1}^{n+1}=dV_{1,0}^n+c_x(V_{2,0}^n+\sqrt{2}V_{0,0}^n)+\sqrt{2}c_yV_{1,1}^n, \tag{24}$$

$$aV_{1,N_y}^{n+1}+b_x(V_{2,N_y}^{n+1}+\sqrt{2}V_{0,N_y}^{n+1})+\sqrt{2}b_yV_{1,N_y-1}^{n+1}=dV_{1,N_y}^n+c_x(V_{2,N_y}^n+\sqrt{2}V_{0,N_y}^n)+\sqrt{2}c_yV_{1,N_y-1}^n, \tag{25}$$

$$aV_{N_x-1,0}^{n+1}+b_x(\sqrt{2}V_{N_x,0}^{n+1}+V_{N_x-2,0}^{n+1})+\sqrt{2}b_yV_{N_x-1,1}^{n+1}=dV_{N_x-1,0}^n+c_x(\sqrt{2}V_{N_x,0}^n+V_{N_x-2,0}^n)+\sqrt{2}c_yV_{N_x-1,1}^n, \tag{26}$$

$$aV_{N_x-1,N_y}^{n+1}+b_x(\sqrt{2}V_{N_x,N_y}^{n+1}+V_{N_x-2,N_y}^{n+1})+\sqrt{2}b_yV_{N_x-1,N_y-1}^{n+1}=dV_{N_x-1,N_y}^n+c_x(\sqrt{2}V_{N_x,N_y}^n+V_{N_x-2,N_y}^n)+\sqrt{2}c_yV_{N_x-1,N_y-1}^n, \tag{27}$$

$$aV_{N_x,1}^{n+1}+\sqrt{2}b_xV_{N_x-1,1}^{n+1}+b_y(V_{N_x,2}^{n+1}+\sqrt{2}V_{N_x,0}^{n+1})=dV_{N_x,1}^n+\sqrt{2}c_xV_{N_x-1,1}^n+c_y(V_{N_x,2}^n+\sqrt{2}V_{N_x,0}^n), \tag{28}$$

$$aV_{N_x,N_y-1}^{n+1}+\sqrt{2}b_xV_{N_x-1,N_y-1}^{n+1}+b_y(\sqrt{2}V_{N_x,N_y}^{n+1}+V_{N_x,N_y-2}^{n+1})=dV_{N_x,N_y-1}^n+\sqrt{2}c_xV_{N_x-1,N_y-1}^n+c_y(\sqrt{2}V_{N_x,N_y}^n+V_{N_x,N_y-2}^n). \tag{29}$$

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)

$$aV_{0,j}^{n+1}+\sqrt{2}b_xV_{1,j}^{n+1}+b_y(V_{0,j+1}^{n+1}+V_{0,j-1}^{n+1})=dV_{0,j}^n+\sqrt{2}c_xV_{1,j}^n+c_y(V_{0,j+1}^n+V_{0,j-1}^n)\quad(1\le j\le N_y-1), \tag{30}$$

$$aV_{N_x,j}^{n+1}+\sqrt{2}b_xV_{N_x-1,j}^{n+1}+b_y(V_{N_x,j+1}^{n+1}+V_{N_x,j-1}^{n+1})=dV_{N_x,j}^n+\sqrt{2}c_xV_{N_x-1,j}^n+c_y(V_{N_x,j+1}^n+V_{N_x,j-1}^n)\quad(1\le j\le N_y-1), \tag{31}$$

$$aV_{i,0}^{n+1}+b_x(V_{i+1,0}^{n+1}+V_{i-1,0}^{n+1})+\sqrt{2}b_yV_{i,1}^{n+1}=dV_{i,0}^n+c_x(V_{i+1,0}^n+V_{i-1,0}^n)+\sqrt{2}c_yV_{i,1}^n\quad(1\le i\le N_x-1), \tag{32}$$

$$aV_{i,N_y}^{n+1}+b_x(V_{i+1,N_y}^{n+1}+V_{i-1,N_y}^{n+1})+\sqrt{2}b_yV_{i,N_y-1}^{n+1}=dV_{i,N_y}^n+c_x(V_{i+1,N_y}^n+V_{i-1,N_y}^n)+\sqrt{2}c_yV_{i,N_y-1}^n\quad(1\le i\le N_x-1). \tag{33}$$

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、

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

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。$0\le i\le N_x$, $0\le j\le N_y$ に対して、

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

(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

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

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)

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

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

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

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

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)

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

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

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

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

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

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

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

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

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、

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

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

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

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

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

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

行列 A を

$$
A = \left(\begin{array}{c|c|c|c|c|c}
\begin{matrix} a & \sqrt{2}b_y & & & & \\ \sqrt{2}b_y & a & b_y & & & \\ & b_y & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & b_y \\ & & & b_y & a & \sqrt{2}b_y \\ & & & & \sqrt{2}b_y & a \end{matrix} & \begin{matrix} \sqrt{2}b_x & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{2}b_x \end{matrix} & & & & \\ \hline
\begin{matrix} \sqrt{2}b_x & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{2}b_x \end{matrix} & \begin{matrix} a & \sqrt{2}b_y & & & & \\ \sqrt{2}b_y & a & b_y & & & \\ & b_y & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & b_y \\ & & & b_y & a & \sqrt{2}b_y \\ & & & & \sqrt{2}b_y & a \end{matrix} & \begin{matrix} b_x & & \\ & \ddots & \\ & & b_x \end{matrix} & & & \\ \hline
 & \begin{matrix} b_x & & \\ & \ddots & \\ & & b_x \end{matrix} & \ddots & \ddots & & \\ \hline
 & & \ddots & \ddots & \begin{matrix} b_x & & \\ & \ddots & \\ & & b_x \end{matrix} & \\ \hline
 & & & \begin{matrix} b_x & & \\ & \ddots & \\ & & b_x \end{matrix} & \begin{matrix} a & \sqrt{2}b_y & & & & \\ \sqrt{2}b_y & a & b_y & & & \\ & b_y & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & b_y \\ & & & b_y & a & \sqrt{2}b_y \\ & & & & \sqrt{2}b_y & a \end{matrix} & \begin{matrix} \sqrt{2}b_x & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{2}b_x \end{matrix} \\ \hline
 & & & & \begin{matrix} \sqrt{2}b_x & & \\ & \ddots & \\ & & \sqrt{2}b_x \end{matrix} & \begin{matrix} a & \sqrt{2}b_y & & & & \\ \sqrt{2}b_y & a & b_y & & & \\ & b_y & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & b_y \\ & & & b_y & a & \sqrt{2}b_y \\ & & & & \sqrt{2}b_y & a \end{matrix}
\end{array}\right).
$$

で定めると連立 1 次方程式は

$$A\boldsymbol{v}^{n+1} = B\boldsymbol{v}^{n}$$

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)

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} aI + b_y J' & \sqrt{2}b_x I & & & \\ \sqrt{2}b_x I & aI + b_y J' & b_x I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & b_x I & aI + b_y J' & \sqrt{2}b_x I \\ & & & \sqrt{2}b_x I & aI + b_y J' \end{bmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a & \sqrt{2}b_x & & & & & \\ \sqrt{2}b_x & a & b_x & & & & \\ & b_x & a & b_x & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & b_x & a & b_x & \\ & & & & b_x & a & \sqrt{2}b_x \\ & & & & & \sqrt{2}b_x & a \end{pmatrix} \otimes I + \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \otimes (b_y J') \\ &= (aI_{N_x+1} + b_x J'_{N_x+1}) \otimes I_{N_y+1} + I_{N_x+1} \otimes (b_y J'_{N_y+1}) \\ &= ((1 + 2\theta(\lambda_x + \lambda_y))I_{N_x+1} - \theta\lambda_x J'_{N_x+1}) \otimes I_{N_y+1} + I_{N_x+1} \otimes (-\theta\lambda_y J'_{N_y+1}) \\ &= I_{N_x+1} \otimes I_{N_y+1} + \theta\lambda_y I_{N_x+1} \otimes (2I_{N_y+1} - J'_{N_y+1}) + \theta\lambda_x (2I_{N_x+1} - J'_{N_x+1}) \otimes I_{N_y+1} \\ &= I_{N_x+1} \otimes I_{N_y+1} + \theta\lambda_y I_{N_x+1} \otimes K'_{N_y+1} + \theta\lambda_x K'_{N_x+1} \otimes I_{N_y+1}. \end{aligned}$$

同様にして

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

(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=△ 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
[2] http://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,...,x_{Nx+1}), y=(y_1,y_2,...,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
```

heat2n_mat.m

```
% 長方形領域における熱方程式 u_t=△ 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〜).