

拡散および異常拡散方程式に対する基本解法における CQM の適用

Application of the convolution quadrature method for the method of fundamental solutions for diffusion or abnormal diffusion equations

大江貴司¹⁾
Takashi Ohe

¹⁾博 (工) 岡山理科大学理学部 教授 (〒 700-0005 岡山県岡山市北区理大町 1-1, E-mail: ohe@ous.ac.jp)

The method of fundamental solutions is an efficient numerical method for solving the boundary value problem for partial differential equations, especially, for the Laplace and Helmholtz equations. Some researchers tried to apply this method to the diffusion equation, however, under the Naive implementation, numerical instability occurs for the small time step. To avoid this numerical instability, we propose applying the convolution quadrature method for the time domain of the approximation scheme. The effectiveness of the proposed method is shown by some numerical examples.

Key Words : *diffusion equation, abnormal diffusion equation, method of fundamental solutions, convolution quadrature method*

1. はじめに

基本解法は偏微分方程式の境界値問題の数値解法のひとつで、領域の外部に特異点をもつ基本解の線形和により解を近似する方法である。国内では代用電荷法という名前でも知られている [9]。この解法は、主として Laplace 方程式や Helmholtz 方程式など、定常的な偏微分方程式の数値解法として用いられ、有限差分法や有限要素法などと比較して、次のような利点を持つ [2]。

- 原理が簡単であることから実装が容易である。
- 領域の境界が解析的な曲線であり、かつ境界値が解析的な関数である場合、数値解の誤差が分点の個数に対し指数的に減少する。
- 基本解の重ね合わせであることから、構成される解は対象とする偏微分方程式を厳密に満たす。

上記のような利点を期待して、拡散方程式や波動方程式などの非定常な偏微分方程式に対し、基本解法を適用することが行われている [4,5]。しかし、Naive な構成法では時間刻みを小さくするにつれて不安定になる性質を持つ [10] ことから、対象とする偏微分方程式の基本解を直接に用いることはせず、空間変数のみに対し Laplace 方程式や Helmholtz 方程式の基本解を利用し、時間に関しては差分法のようなステップ・バイ・ステップな方法 [12,13]、もしくは Laplace 逆変換を用いた解法 [7] が提案されている。しかし、これらの方法は対象とする偏微分方程式の基本解そのものを用いていないため、解が方程式を厳密に満たすという利点のひとつを失っている。よって基本解の重ね合わせという特徴を失わず、Naive な構成法の持つ不安定性を軽減する手法が期待される。本講演では近似解の表現として、空間のみについて離散化し、時間方向については畳み込み積分を用いたものを考える。この表現に基づき、時間方向の畳み込み積分を Lubich により提案された convolution quadrature method

[8](以下 CQM と略記する) を適用することで、時間について離散化する手法を提案する。CQM は Laplace 変換の表現を通した畳み込み積分に対する計算法であり、非定常問題に対する境界要素法などにおいて利用されている [1,11]。

以下、第 2 節では本講演で対象とする拡散および異常拡散方程式の初期値・境界値問題を示し、これに対する基本解法の Naive な構成法とその問題点、特に不安定性の原因となる誤差拡大に寄与する行列の性質について示す。続いて第 3 節で、CQM を用いた適用法を提案し、この方法による安定性の改善の可能性および数値実験について示す。

2. 拡散方程式および異常拡散方程式に対する基本解法の Naive な構成法とその不安定性

(1) 基本解法の Naive な構成法

$\Omega \subset \mathbb{R}^2$ を十分滑らかな境界 $\partial\Omega$ をもつ有界かつ単連結な領域とする。領域 Ω における拡散および異常拡散方程式の初期値・境界値問題 [3,6]

$$\partial_t^\alpha u(t, \mathbf{x}) = \Delta u(t, \mathbf{x}), \quad (t, \mathbf{x}) \in (0, T) \times \Omega, \quad (1)$$

$$u(0, \mathbf{x}) = 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2)$$

$$u(t, \mathbf{x}) = f(t, \mathbf{x}), \quad (t, \mathbf{x}) \in (0, T) \times \partial\Omega, \quad (3)$$

の解 $u(t, \mathbf{x})$ の近似法について考える。ここで $T > 0$ は定数であり、 $f \in C([0, T] \times \partial\Omega) \cap C^\infty((0, T) \times \partial\Omega)$, $f(0, \mathbf{x}) = 0$ を満たすものとする。また、時間に関する微分の階数を与える α は $0 < \alpha \leq 1$ を満たす定数であり、 $\alpha = 1$ の場合は通常の拡散を、 $0 < \alpha < 1$ の場合は異常拡散を表す。なお、非整数階微分 ∂_t^α は Caputo の意味で考える。

拡散方程式の初期値・境界値問題 (1)-(3) に対する基本解法による近似解の Naive な構成法として、野中-村島 [10] や Johansson-Lesnic-Reeve[4] による方法があ

る。まず、これらの方法とその問題点について示す。

D を $\bar{\Omega} \subset D \subset \mathbb{R}^2$ を満たす領域とし、その境界 ∂D 上に M 個の点 \mathbf{y}_m , $m = 1, 2, \dots, M$ をおく。また、時間区間 $[0, T]$ を J 個の等間隔 $\Delta t = T/J$ の小区間で区切り、 $t_j = j\Delta t$, $j = 0, 1, 2, \dots, J$ とおく。さらに、 $0 < \delta\tau < \Delta t$ を満たす定数 $\delta\tau$ をとる。Naive な構成法では、初期値・境界値問題 (1)-(3) の解 $u(t, \mathbf{x})$ の近似解 $U_{\text{Naive}}(t, \mathbf{x})$ を、円筒状領域の境界 $[-\delta\tau, T] \times \partial D \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ 上の点 $(t_j - \delta\tau, \mathbf{y}_m)$, $j = 0, 1, 2, \dots, J$, $m = 1, 2, \dots, M$ に特異点を持つ基本解をそれぞれ重み $q_{j,m} \in \mathbb{R}$ で重ね合わせ

$$U_{\text{Naive}}(t, \mathbf{x}) = \sum_{j=0}^J \sum_{m=1}^M q_{j,m} G(t, \mathbf{x}; t_j - \delta\tau, \mathbf{y}_m), \quad (4)$$

により構成する。ここで、 $G(t, \mathbf{x}; s, \mathbf{y})$ は方程式 (1) の基本解であり、Fox の H 関数を用いて

$$G(t, \mathbf{x}; s, \mathbf{y}) = \begin{cases} \frac{(t-s)^{\alpha-1}}{\pi|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} H_{1,2}^{2,0} \left[\frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2}{4(t-s)^\alpha} \right]_{(1,1),(1,1)}^{(\alpha,\alpha)}, & t > s, \\ 0, & t \leq s, \end{cases} \quad (5)$$

で表される [3]。定常問題に対する基本解解法と同様に、近似解 $U_{\text{Naive}}(t, \mathbf{x})$ は対象とする方程式 (1) を厳密に満たす。

各基本解の重み $q_{j,m} \in \mathbb{R}$ は近似解 $U_{\text{Naive}}(t, \mathbf{x})$ が初期条件 (2) および境界条件 (3) を近似的に満たすように決定する。まず初期条件については、 $t = 0$ における近似解の値 $U_{\text{Naive}}(0, \mathbf{x})$ が

$$U_{\text{Naive}}(0, \mathbf{x}) = \sum_{m=1}^M q_{0,m} G(0, \mathbf{x}; -\delta\tau, \mathbf{y}_m), \quad (6)$$

で与えられることから、 $q_{0,m} = 0$, $m = 1, 2, \dots, M$ とおけばよい。

次に境界条件については領域 Ω の境界 $\partial\Omega$ 上に、 $\mathbf{y}_m \in \partial D$ と同じ個数 M の拘束点 \mathbf{x}_n , $n = 1, 2, \dots, M$ をおき、 $(t_j, \mathbf{x}_n) \in [0, T] \times \partial\Omega$, $j = 1, 2, \dots, J$, $n = 1, 2, \dots, M$ において境界条件を満たす、すなわち

$$U_{\text{Naive}}(t_j, \mathbf{x}_n) = f(t_j, \mathbf{x}_n), \quad j = 1, 2, \dots, J, n = 1, 2, \dots, M, \quad (7)$$

を満たすように決定する。この時、 $t \leq s$ について $G(t, \mathbf{x}; s, \mathbf{y}) = 0$ が成り立つことから、 $1 \leq k \leq J$ を満たす k に対し

$$\begin{aligned} U_{\text{Naive}}(t_k, \mathbf{x}_n) &= \sum_{j=0}^k \sum_{m=1}^M q_{j,m} G(t_k, \mathbf{x}_n; t_j - \delta\tau, \mathbf{y}_m) \\ &= \sum_{m=1}^M q_{k,m} G(t_k, \mathbf{x}_n; t_k - \delta\tau, \mathbf{y}_m) \\ &\quad + \sum_{j=0}^{k-1} \sum_{m=1}^M q_{j,m} G(t_k, \mathbf{x}_n; t_j - \delta\tau, \mathbf{y}_m), \end{aligned} \quad (8)$$

が得られる。式 (8) は、重み $q_{k,m}$, $m = 1, 2, \dots, M$ が

$t = t_{k-1}$ 以前の時刻の重みを用いて、 M 個の線型方程式

$$\begin{aligned} &\sum_{m=1}^M q_{k,m} G(t_k, \mathbf{x}_n; t_k - \delta\tau, \mathbf{y}_m) \\ &= f(t_k, \mathbf{x}_n) - \sum_{j=0}^{k-1} \sum_{m=1}^M q_{j,m} G(t_k, \mathbf{x}_n; t_j - \delta\tau, \mathbf{y}_m), \\ &n = 1, 2, \dots, M, \end{aligned} \quad (9)$$

の解で与えられることを示している。よって $q_{k,m}$ は式 (9) を k について逐次的に解くことで得られる。

Naive な構成法により初期値・境界値問題 (1)-(3) を解いた数値計算例を示す。 Ω および D をそれぞれ原点を中心とする半径 1, 1.2 の円板領域とする。微分階数は $\alpha = 1$, すなわち通常の拡散とする。比較対象とする厳密解は次のように構成した。すなわち、領域 Ω を含む領域として、点 $\mathbf{c} = (2 \cos(\pi/5), 2 \sin(\pi/5))$ を中心とする半径 5 の円盤領域 $\Omega' = \{|\mathbf{x} - \mathbf{c}| < 5\}$ をとり、 Ω' における初期値・境界値問題

$$\partial_t^\alpha v(t, \mathbf{x}) = \Delta v(t, \mathbf{x}) \quad (t, \mathbf{x}) \in (0, T) \times \Omega', \quad (10)$$

$$v(0, \mathbf{x}) = v_0(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega', \quad (11)$$

$$v(t, \mathbf{x}) = 0, \quad (t, \mathbf{x}) \in (0, T) \times \partial\Omega', \quad (12)$$

ただし、

$$v_0(\mathbf{x}) = \begin{cases} 32((1/4) - r^2)^2, & r = |\mathbf{x} - \mathbf{c}| < 1/2, \\ 0 & |\mathbf{x} - \mathbf{c}| \geq 1/2, \end{cases} \quad (13)$$

の解 v を $(0, T) \times \bar{\Omega}$ に制限した関数 $u = v|_{(0,T) \times \Omega}$ を考えた。このとき、 u は $f = v|_{(0,T) \times \partial\Omega}$ を境界条件とした初期値・境界値問題 (1)-(3) の解となっている。なお、初期値・境界値問題 (10)-(12) の解は Fourier-Bessel 展開により構成可能である。

基本解解法の適用に際しては、 $M = 40$ とおき、点 $\mathbf{x}_m = (\cos(2\pi m/M), \sin(2\pi m/M))$, $\mathbf{y}_m = (1.2 \cos(2\pi m/M), 1.2 \sin(2\pi m/M)) = 1.2\mathbf{x}_m$, $m = 1, 2, \dots, M$ とした。時間きざみについて $\Delta t = 0.01, 0.02, 0.05, 0.1$ で変化させ、 $\delta\tau = \Delta t/2$ として、近似解 U_{Naive} を $0 \leq t \leq 1$ の範囲で計算を行った。

厳密解 $u(t, \mathbf{x})$ と近似解 $U_{\text{Naive}}(t, \mathbf{x})$ の誤差を Ω 内における L^2 ノルムで評価し、時間区間 $0.4 \leq t \leq 0.5$ および $0.9 \leq 1.0$ の範囲での平均値を求めた結果を図 1 に示す。図 1 からは Δt が小さくなるにしたがって誤差が小さくなっているように見えるが、 $\Delta t < 0.01$ で急激に誤差が増加することを確認している。すなわち、Naive な構成法は Δt が小さくなるについて数値的に不安定となる。

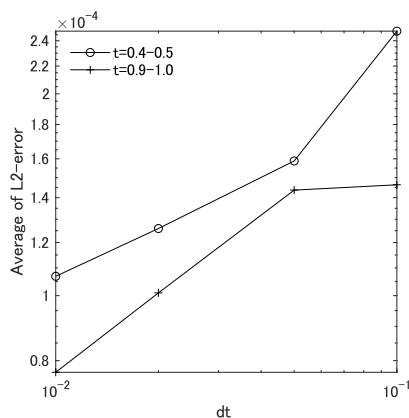


図-1 Naive な構成法を用いた場合の数値解の誤差の Δt に対する変化

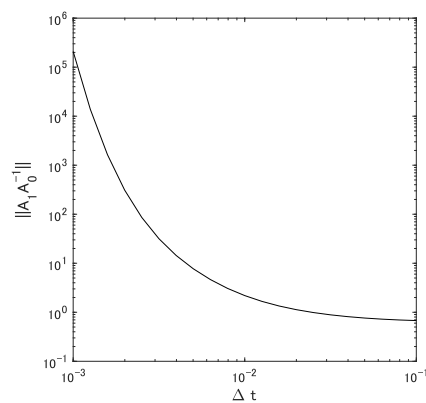


図-2 Naive な構成法における誤差の拡大行列 $-A_1A_0^{-1}$ の L^2 ノルム

(2) Naive な構成法における不安定性の原因

さて, Naive な構成法による数値解の不安定性の原因について考察する. 表現を簡潔にするため,

$$\mathbf{q}_k = (q_{k,1} \quad q_{k,2} \quad \cdots \quad q_{k,M})^T, \quad k = 0, 1, 2, \dots, K, \quad (14)$$

$$\mathbf{f}_k = (f_{k,1} \quad f_{k,2} \quad \cdots \quad f_{k,M})^T, \quad k = 0, 1, 2, \dots, K, \quad (15)$$

$$A_k = \begin{pmatrix} G_{1,1}^k & G_{1,2}^k & \cdots & G_{1,M}^k \\ G_{2,1}^k & G_{2,2}^k & \cdots & G_{2,M}^k \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{M,1}^k & G_{M,2}^k & \cdots & G_{M,M}^k \end{pmatrix}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, K, \quad (16)$$

とおく. ここで, $G_{n,m}^k = G(t_k, \mathbf{x}_n; -\delta\tau, \mathbf{y}_m)$ である. これらを用いて式 (9) を書き換えると

$$A_0 \mathbf{q}_k = \mathbf{f}_k - \sum_{j=1}^{k-1} A_{k-j} \mathbf{q}_j, \quad (17)$$

となる. 式 (17) から \mathbf{q}_j , $j = 0, 1, \dots, k-1$ を消去すると,

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_k &= A_0^{-1} \left((-A_1 A_0^{-1})^{k-1} + \cdots + (-A_{k-1} A_0^{-1}) \right) \mathbf{f}_1 \\ &\quad + A_0^{-1} \left((-A_1 A_0^{-1})^{k-2} + \cdots + (-A_{k-2} A_0^{-1}) \right) \mathbf{f}_2 \\ &\quad + \cdots \\ &\quad + A_0^{-1} \mathbf{f}_k, \end{aligned} \quad (18)$$

となる. 式 (18) は, 誤差の拡大には $-A_1 A_0^{-1}$ が主に寄与することを示している.

そこで先に示した数値例において, $-A_1 A_0^{-1}$ の L^2 ノルムを評価する. 時間きざみについて $0.001 \leq \Delta t \leq 0.1$ で変化させ, $\| -A_1 A_0^{-1} \|_2$ を評価した結果を図 2 に示す. 図 2 より, Δt を小さくすると急激に $\| -A_1 A_0^{-1} \|_2$ が大きくなることが確認でき, 数値解の不安定の一因となっているものと考えられる.

3. 拡散方程式および異常拡散方程式に対する基本解解法における CQM の適用

前節で示した基本解解法の Naive な構成法の持つ数値的不安定性は, 時間方向の離散化に起因するものと考え

えられる. そこで近似解の構成において, 時間方向については直接的に離散化した重ね合わせを用いるのではなく, 畳み込み積分による表現を基に離散化する方法を考える.

まず, 基本解の重ね合わせについて, 空間のみを離散化し, 時間方向については畳み込み積分を用いた近似解 \tilde{U} の表現

$$\tilde{U}(t, \mathbf{x}) = \sum_{m=1}^M \int_0^t q_m(\tau) G(t, \mathbf{x}; t - \tau, \mathbf{y}_m) d\tau, \quad (19)$$

を考える. 時刻 $t = t_k$ における値 $\tilde{U}(t_k, \mathbf{x})$ について, 式 (19) にあらわれる畳み込み積分に対し Lubich により提案された CQM を適用した近似値を $U_{\text{CQM}}(t_k, \mathbf{x})$ とおくと

$$U_{\text{CQM}}(t_k, \mathbf{x}) = \sum_{m=1}^M \sum_{j=1}^k q_{j,m} \omega_{k-j}(\Delta t; \mathbf{x}, \mathbf{y}_m), \quad (20)$$

で表される. ここで

$$\omega_j = \frac{\rho^{-j}}{L} \sum_{l=1}^{L-1} F\left(\frac{\gamma(z_l)}{\Delta t}, \mathbf{x}; \mathbf{y}_m\right) e^{-2\pi i l j / L}, \quad (21)$$

であり, $F(s, \mathbf{x}; \mathbf{y}_m)$ は基本解 $G(t, \mathbf{x}; 0, \mathbf{y}_m)$ の Laplace 変換, $\gamma(z)$ は線形マルチステップ法の特性多項式の商, $z_l = \rho e^{2\pi i l / L}$, ρ は $\rho^L = \sqrt{\varepsilon}$ を満たす定数, L はあらかじめ与えられた正の整数, $\varepsilon > 0$ は目標精度である.

ここで, Naive な構成法と同様に $(t_k, \mathbf{x}_n) \in [0, T] \times \partial\Omega$, $k = 1, 2, \dots, J$, $n = 1, 2, \dots, M$ において境界条件を満足するようにすると, 重み $q_{k,m}$, $k = 1, \dots, K$, $m = 1, 2, \dots, M$ は

$$\begin{aligned} &\sum_{m=1}^M q_{k,m} \omega_0(\Delta t; \mathbf{x}_n, \mathbf{y}_m) \\ &= f(t_k, \mathbf{x}_n) - \sum_{j=0}^{k-1} \sum_{m=1}^M q_{j,m} \omega_{k-j}(\Delta t; \mathbf{x}_n, \mathbf{y}_m), \\ &n = 1, 2, \dots, M, \end{aligned} \quad (22)$$

を k について逐次的に解くことにより得られる。

Naive な構成法と同様に、CQM を適用した構成法 (20) について数値解の安定性について考察する。表現を簡潔にするため、

$$B_k = \begin{pmatrix} \omega_{1,1}^k & \omega_{1,2}^k & \cdots & \omega_{1,M}^k \\ \omega_{2,1}^k & \omega_{2,2}^k & \cdots & \omega_{2,M}^k \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_{M,1}^k & \omega_{M,2}^k & \cdots & \omega_{M,M}^k \end{pmatrix}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, K, \quad (23)$$

を導入する。ここで、 $\omega_{n,m}^k = \omega_k(\Delta t; \mathbf{x}_n, \mathbf{y}_m)$ である。この時、式 (22) は

$$B_0 \mathbf{q}_k = \mathbf{f}_k - \sum_{j=1}^{k-1} B_{k-j} \mathbf{q}_j, \quad (24)$$

となることから、Naive な構成法と同様に

$$\begin{aligned} \mathbf{q}_k &= B_0^{-1} \left((-B_1 A_0^{-1})^{k-1} + \cdots + (-B_{k-1} B_0^{-1}) \right) \mathbf{f}_1 \\ &+ B_0^{-1} \left((-B_1 B_0^{-1})^{k-2} + \cdots + (-B_{k-2} B_0^{-1}) \right) \mathbf{f}_2 \\ &+ \cdots \\ &+ B_0^{-1} \mathbf{f}_k, \end{aligned} \quad (25)$$

が得られる。式 (25) は、誤差の拡大に $-B_1 B_0^{-1}$ が主に寄与していることを示している。

Naive な構成法で示したものと例を用いて $\| -B_1 B_0^{-1} \|_2$ を評価した結果を図 3 に示す。なお、CQM の適用において $L = 1024$, $\varepsilon = 1.0 \times 10^{-14}$ とし、 $\gamma(z) = (1-z) + (1-z)^2/2$ を用いた。(図 2 と図 3 では縦軸のスケールが異なることに注意。) 図 3 より、 Δt を小さくしても $\| -B_1 B_0^{-1} \|_2$ はそれほど大きくならず、数値解が安定に得られることが予想される。

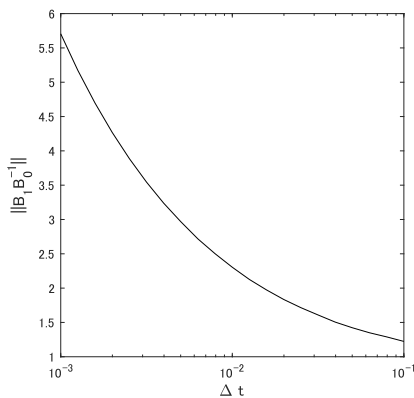


図-3 CQM を適用した構成法における誤差の拡大行列 $-B_1 B_0^{-1}$ の L^2 ノルム

この予想を確認するため、Naive な構成法で数値実験を行ったものと同じ設定の初期値・境界値問題 (1)-(3) に対し、CQM を適用した構成法の数値実験を行った。厳密解 $u(t, \mathbf{x})$ と近似解 $U_{\text{CQM}}(t, \mathbf{x})$ の誤差を Ω 内における L^2 ノルムで評価し、時間区間 $0.4 \leq t \leq 0.5$ および $0.9 \leq 1.0$

の範囲での平均値を求めた結果を図 4 に示す。図 4 より小さい Δt に対しても、安定した数値解が求められていることが確認できる。なお、微分階数が 1 以外の異常拡

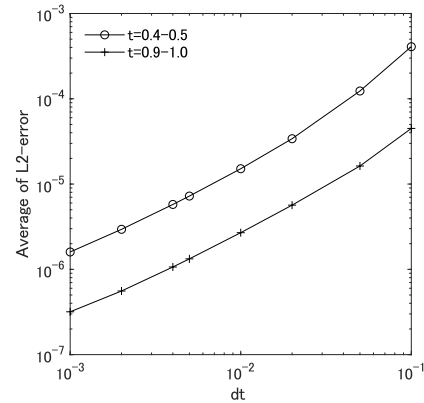


図-4 CQM を適用した構成法を用いた場合の数値解の誤差の Δt に対する変化

散方程式に対する適用結果については講演時に示す。

謝辞: 本研究は、日本学術振興会科学研究費基盤研究 (C)、課題番号 18K03438) の支援を受けて行われた。

参考文献

- [1] Banjai, L., Messner, M., Schanz, M.: Runge-Kutta convolution quadrature for the Boundary Element Method, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, Vol. 245–246, pp90–101, 2012.
- [2] Ei, S.m Ochiai, H, Tanaka Y.: Method of fundamental solutions for Neumann problems of the modified Helmholtz equation in disk domains, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 402, Paper No. 113795, 27 pp, 2022.
- [3] Jin, B.: *Fractional Differential Equations* (Applied Mathematical Sciences 206), Springer, 2021.
- [4] Johansson, B. T., Lesnic, D., Reeve, T.: A method of fundamental solutions for two-dimensional heat conduction, *Internat. J. Comput. Math.*, Vol. 88, pp. 1697–1713, 2011.
- [5] Johansson, B. T.: Properties of a method of fundamental solutions for the parabolic heat equation, *Applied Mathematics Letters*, Vol. 65, pp.83–89, 2017.
- [6] Kubica, A., Ryszewska, K., Yamamoto, M.: *Time-Fractional Differential Equations*, Springer, 2020.
- [7] Labarca, I. and Hiptmair, R.: Acoustic scattering problems with convolution quadrature and the method of fundamental solutions, *Commun. Comput. Phys.*, Vol. 30, No. 4, pp. 9851008, 2021.
- [8] Lubich, C.: Convolution Quadrature and Discretized Operational Calculus. I, *Numer. Math.*, Vol. 52, pp.129–145, 1988.
- [9] 村島定行, 代用電荷法とその応用, 共立出版, 1983.
- [10] 野中善政, 村島定行, グリーン関数の重ね合わせ法による拡散方程式の近似解法, 情報処理学会論文誌, Vol. 23, pp. 288–295 (1982).

- [11] 斎藤隆泰, 瀬川尚揮, 石田貴之, 廣瀬壮一, 並列化された演算子積分時間領域高速多重極境界要素法による大規模多重散乱解析, 計算数理工学論文集, Vol. 11, 論文 No. 19-111216, 2011.
- [12] Valtchev, S. S. and Roberty, N. C.: A time marching MFS scheme for heat conduction problems, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Vol. 32, pp480–493, 2008.
- [13] Yan, L., Yang, F.: A Kansa-type MFS scheme for two-dimensional fractional diffusion equations, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, Vol. 37, pp. 1426–1435, 2013.