知識システム基礎学研修 A
偏微分方程式のシミュレーションの基本理論と技法の習得について

指導教官 橋本 敬 助教授

北陸先端科学技術大学院大学
知識科学研究科知識システム基礎学専攻
250063 谷内田一成

平成 15 年 4 月 21 日

目 次

1　序章

1.1　はじめに

偏微分方程式の数学的解法は古くから研究されている。しかし、解析的に且つ具体的に解けるのは限られた場合だけである。1 時代前は級数を用いた未定係数が利用されたが、近年の計算機および数値解法の発展により、偏微分方程式の実用に当たっては数値解析法を用いることが多い。本研究では、この数値解析を利用して、偏微分方程式をシミュレーションするための基本理論と技法を身につけることを目的としている。

1.2　本論文の構成

第 1 章では研究背景及び目的と、本論文の構成を示す。第 2 章には、数値解析を行う場合に考慮しなければならない誤差について説明する。第 3 章では、偏微分方程式の解析のために必要とされる基本理論について説明する。第 4 章では、偏微分方程式の数値解法として、差分法について説明する。

2　誤差と桁落ち

2.1　誤差の種類について

数値解析を行う際に、様々な誤差が生じている。誤差とは、真の値 x の近似値を a とする時、$c = a - x$ を a の誤差という。この誤差を評価して、近似の程度の良さを判定する。この判定には 2 つの方法がある。1 つは絶対値 $|c| = |a - x|$ による絶対誤差を評価する方法である。2 つ目は誤差と真の値の比を取った

$$c_R = \frac{e}{x} = \frac{a-x}{x}$$

相対誤差 c_R を利用するものである。

計算機で扱う数は無限桁の数ではなく、有限桁の数である。そのため計算機は有効桁数の範囲で、取り扱っいる数値で打ち切ってしまう。この操作によって、生ずる誤差を丸め誤差という。

次に打ち切り誤差とは、例えば関数 $f(x) = e^x$ の無限級数展開

$$f(x) = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots, \qquad -\infty < x < \infty$$

を有限項で打ち切って得られる関数 $f_n(x)$

$$f_n(x) = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots + \frac{x^n}{n!}$$

によって生じた打ち切り誤差 $c(x)$ は

$$c(x) \equiv f_n(x) - f(x) = -\frac{x^{n+1}}{(n+1)!} - \frac{x^{n+2}}{(n+2)!} - \cdots$$

になる。これにより打ち切り誤差を評価できる。

また関数 $f(x)$ に、真の値 x の代わりとして近似値 a を代入して生ずる誤差 $f(x) - f(a)$ を代入誤差という。

2.2　桁落ちについて

次に、誤差と関連して計算の精度を低下させる桁落ちについて説明する。

桁落ちとは、有効数字の桁数が計算により急激に減少することである。桁落ちが起ると、近似値と計算値の相対誤差が大きくなる。

例えば、$a = 1.23456, b = 1.23421$ を、それぞれ真の値 x, y の近似値とするとき、

$$a - b = 0.000035 = 0.35 \times 10^{-3}$$

となり、有効桁数が 6 から 2 に減る。この時の a, b の相対誤差の限界は $0.5 \times 10^{-5}/1.234 < 0.41 \times 10^{-5}$ であり、その差 $a - b$ の相対誤差 e_R の限界は、

$$|e_R| = \left| \frac{(x-y)-(a-b)}{a-b} \right| \leq \frac{(x-a)-(y-b)}{|a-b|} \leq \frac{10^{-5}}{0.35 \times 10^{-3}} = 0.29 \times 10^{-1}$$

となり、これは、a,b の相対誤差の限界より大きくなってしまっている。よって計算する上で、桁落ちが起きないように注意すべきである。また行列の計算時に良くみられる現象であり、倍精度指定などの措置を用いることが多い。

2.3　情報落ちについて

また情報落ちとは絶対値の差が大きな 2 数の加減算で、小さな値の方の数が無視されてしまう現象のことである。

例えば、$a = 123456.78, b = 0.012345678, c = 0.0012345678$ のとき、有効桁数 8 桁として計算すると

$$a + b = 123456.79 \qquad a + c = 123456.78 = a$$

となり、a に対して b と c の影響がほとんどなくなってしまう。

以上のような誤差を減らすように解析しなければならない。

3　数値解析の基本理論

3.1　補間

相違なる $n+1$ 個の点 $x_0, x_1, \cdots, x_n$ における $f(x)$ の値 $f(x_0), f(x_1), \cdots, f(x_n)$ が分かっているとき、n 次の式 $g(x)$ が

$$g(x_j) = f_j = f(x_j) \qquad\qquad (j = 0, 1, \cdots, n) \tag{3.1}$$

を満たす関数 $g(x)$ を $f(x)$ の補間関数という。特に、 $g(x)$ が多項式のとき、

$$g(x_i) = c_0 + c_1 x_i + c_2 x_i + \cdots + c_n x_i^n = f(x_i),$$

となる $g(x_i)$ を補間多項式という。x_j $(j = 0, 1, \cdots, n)$ と異なる x における関数 $f(x)$ の近似値を $g(x)$、つまり

$$f(x) \approx g(x)$$

として求める方法を補間法という。

次に補間法の１つである、ラグランジュ補間公式について説明する。n 次の補間多項式 $L_{n,k}(x), k = 0, 1, \cdots, n$ によって、$g(x)$ が

$$g(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k L_{n,k}(x) \tag{3.2}$$

で表されるとする。もし $L_{n,k}(x)$ が

$$L_{n,k}(x) = \begin{cases} 0, & x = x_j, j \neq k \\ 1, & x = x_k \end{cases} \tag{3.3}$$

であれば、

$$g(x_i) = c_i \qquad i = 0, 1, \cdots, n$$

となるから、$c_i = f(x_i), i = 0, 1, \cdots, n$ とおけば $g(x)$ は補間条件を満たす。そして、多項式

$$L_{i,k}(x) \;\; = \;\; \prod_{i=0, i\neq k}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - k_i} \tag{3.4}$$

は (3.3) の条件を満たしていて、これをラグランジュの補間係数関数といい、(3.2) を、ラグランジュの補間多項式という。付録１にラグランジュ補間公式を用いて、数値解析したプログラミングソースを示した。

3.2　ニュートン法による近似

ニュートン法は代数方程式の近似解を求めるものである。ここで $x = x_{k-1}\mathrm{d}$ で関数 y の値 $f(x_{k-1})$ が与えられた時、その x_{k-1} から微小区間 h 離れた $x_k, (h = x_k - x_{k-1})$ についてテイラー展開すると

$$f(x_k) = f(x_{k-1}) + (x_k - x_{k-1})f'(x_{k-1}) + \frac{(x_k - x_{k-1})^2}{2} f''(x_k - x_{k-1}) + \cdots \tag{3.5}$$

となる。この (3.5) 式の第３項以降を無視した、

$$f(x_k) = f(x_{k-1}) + (x_k - x_{k-1})f'(x_{k-1}) \tag{3.6}$$

すなわち直線近似を考える。ここで、方程式 $f(x) = 0$ の真の解 x を求める代わりに、近似的に一次方程式 3.6 の解 x_k を求めるために (3.6) 式に $f(x_k) = 0$ とおいて求めらる式

$$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})} \tag{3.7}$$

で得られた x_k が一次近似解となる。これを再び x_{k-1} に再び代入して繰り返し計算する。この様にして真の解 x への漸近解を求める方法をニュートン（あるいはニュートン-ラフソン）法という。付録２に数値解析した結果とプログラミングソースを示した。

3.3　積分について

関数 $f(x)$ が閉区間 $[a, b]$ で積分可能であるとき、その定積分

$$\int_a^b f(x)dx \tag{3.8}$$

の近似値を求める公式を説明する。大部分の関数の原始関数を見つけ出すのは難しい。そのような関数の定積分の近似値を数値解析により求める場合は、積分区間を有限個とした離散的取り扱いになる。いくつかの数値積分法について説明する。

区分求積法は、 $[a,b]$ で連続な関数 $f(x)$ において a から b を n 等分してその分点を $x_i \quad (i=0,1,2,\cdots,n)$ としたときの $f(x_i)$ と刻み幅 h の積の和で近似する方法で (3.9) 式となる。

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &\approx h(f(x_1)+f(x_2)+\cdots+f(x_n)),\\ &\approx h(f(x_0)+f(x_1)+\cdots+f(x_{n-1})), \qquad (h=(b-a)/n)\end{aligned} \tag{3.9}$$

複合台形公式は、区間 $[a,b]$ を m 等分してその分点を x_j とし、各小区間 $[x_{j-1},x_j]$ で台形公式を適用して近似する方法で (3.10) 式になる。

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{j=1}^{m}\int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)dx \approx \sum_{j=1}^{m}\frac{h}{2}(f_{j-1}+f_j) \tag{3.10}$$

よって (3.10) 式より、

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2}(f_0+f_m)+h(f_1+f_2+\ldots+f_{m-1}), \qquad (h=(b-a)/m) \tag{3.11}$$

を得る。付録 3 に複合台形公式の用いた数値解析を行った結果とプログラムソースを示した。

3.4 オイラー法

1 階の常微分方程式の初期値問題を求める数値解析法の 1 つであるオイラー法について説明する。次の (3.12) 式

$$\frac{dy}{dx}=f(x,y), \qquad y(x_0)=y_0 \tag{3.12}$$

で、真の解が $y(x)=y$ とする。この $y(x)$ の近似解 Y_j を求めることを考える。この $y(x)$ に対して

$$y(x_j)=y(x_{j-1})+h\phi(x_{j-1},y(x_{j-1});h) \tag{3.13}$$

とおけば、 ϕ は一般に複雑な関数になる。これを比較的簡単な関数 F で近似して (3.13) 式に対応した近似式

$$Y_j=Y_{j-1}+hF(x_{j-1},Y_{j-1};h) \tag{3.14}$$

により、Y_j の値を求める。(3.14) 式は Y_j に関する差分方程式であり、$F(x,y(x);h)$ を勾配関数という。この勾配関数の選び方により、それぞれに数値解析法の名前がつけられている。ここで、$f(x,y)$ が十分な微分可能性を持っているとして、関数 ϕ を求める。$y'=f(x,y)$ の解 $y(x)$ に対して微小区間 h において、テイラーの定理より、

$$\begin{aligned}y(x+h) &= y(x)+hy'(x)+\frac{h^2}{2!}y''(x)+\cdots+\frac{h^p}{p!}y^{(p)}(x)+\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}y^{(p+1)}(x+\theta h)\\ &= y(x)+hf(x,y(x))+\frac{h^2}{2!}\frac{d}{dx}f(x,y(x))+\cdots+\frac{h^p}{(p)!}\frac{d^{p-1}}{dx^{p-1}}f(x,y(x))\\ &\quad +\frac{h^{p+1}}{(p+1)!}\frac{d^p}{dx^p}f(x+\theta h,y(x+\theta h)), \qquad 0<\theta<1\end{aligned} \tag{3.15}$$

よって (3.15) 式より、

$$\begin{aligned}\phi(x,y(x);h) &= f(x,y(x)) + \frac{h}{2!}\frac{d}{dx}f(x,y(x)) + \cdots + \frac{h^{p-1}}{p!}\frac{d^{p-1}}{dx^{p-1}}f(x,y(x)) \\ &\quad + \frac{h^p}{(p+1)!}\frac{d^p}{dx^p}f(x+\theta h, y(x+\theta h)) \qquad (3.16)\end{aligned}$$

である。ここで、勾配関数 F として、

$$F(x,y(x);h) = f(x,y(x)) + \frac{h}{2!}\frac{d}{dx}f(x,y(x)) + \cdots + \frac{h^{p-1}}{p!}\frac{d^{p-1}}{dx^{p-1}}f(x,y(x)) \qquad (3.17)$$

とおけば、(3.16)、(3.17) 式より

$$|F(x,y(x);h) - \phi(x,y(x);h)| = O(h^p) \qquad (3.18)$$

(3.18) 式が成り立つ。このときの近似公式 (3.14) 式を p 次の公式という。
オイラー法は $p=1$ の時の近似公式 (3.14) 式を使用する方法である。$p=1$ から (3.17) 式より、

$$F(x,y(x);h) = f(x,y(x)) \qquad (3.19)$$

であるから、オイラー法のアルゴリズムは (3.14)、(3.19) 式より以下のようになる。

$$\begin{aligned}Y &= y_0 \\ Y_j &= Y_{j-1} + hf(x_{j-1}, Y_{j-1}) \\ x_j &= x_{j-1} + h \qquad (j = 1, 2, \cdots, n)\end{aligned}$$

3.5 ホイン法

ホイン法は p 次の近似公式 (3.14) 式の $p=2$ の時を使用した方法である。$p=2$ 及び (3.19) 式より、

$$F(x,y(x);h) = f(x,y(x)) + \frac{h}{2!}\frac{d}{dx}f(x,y(x)) \qquad (3.20)$$

ここで、$y(x)$ が (3.12) 式の解であることに注意して、合成関数の偏微分を適用すると、

$$\begin{aligned}\frac{\partial f(x,y(x))}{\partial x} &= f_x(x,y(x)) + f_y(x,y(x))y'(x) \\ &= f_x(x,y(x)) + f(x,y(x))f_y(x,y(x)) \qquad (3.21)\end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned}f_x(x,y(x)) &= \frac{\partial f}{\partial x} \\ f_y(x,y(x)) &= \frac{\partial f}{\partial y}\end{aligned}$$

である。よって、(3.20)、(3.21) 式より、

$$F(x,y(x);h)=f(x,y(x))+\frac{h(f_x(x,y(x))+f(x,y(x))f_y(x,y(x)))}{2} \tag{3.22}$$

となる。ここで、偏導関数を含まない形である (3.23) 式

$$F(x,y(x);h)=\alpha f(x,y(x))+\beta f(x+\gamma h,y+\gamma hf(x,y(x))) \tag{3.23}$$

の形に (3.22) 式が変換できれば簡単になる。2 変数のテイラー展開により得られる (3.24) 式

$$f(x+\gamma h,y+\gamma hf(x,y(x)))=f(x,y(x))+\gamma hf_x(x,y(x))+\gamma hf(x,y(x))f_y(x,y(x))+O(h^2) \tag{3.24}$$

を、(3.23) 式に代入すると、

$$\begin{aligned} F(x,y(x);h) &= \alpha f(x,y(x))+\beta\{f(x,y(x))+\gamma hf_x(x,y(x))+\gamma hf(x,y(x))f_y(x,y(x))+O(h^2)\} \\ &= (\alpha+\beta)f(x,y(x))+\beta\gamma h\{f_x(x,y(x))+f(x,y(x))f_y(x,y(x))\}+O(h^2) \end{aligned} \tag{3.25}$$

ここで、$F=F(x,y(x);h)$, $f=f(x,y(x))$, $f_x=f_x(x,y(x))$, $f_y=f_y(x,y(x))$ と簡略化すると、(3.22) 式、(3.25) 式はそれぞれ

$$F = f+h(f_x+ff_y)/2 \tag{3.26}$$

$$F = (\alpha+\beta)f+\beta\gamma h(f_x+ff_y)+O(h^2) \tag{3.27}$$

なるので、両式を比較して、$\alpha+\beta=1,\beta\gamma=1/2$ とおく。ここで、β の部分を λ としてパラメータにすると、(3.23) 式は、

$$F(x,y(x);h)=(1-\lambda)f(x,y(x))+\lambda f(x+\frac{h}{2\lambda},y+\frac{h}{2\lambda}f(x,y(x))) \tag{3.28}$$

と書け、(3.17)、(3.18)、(3.19)、(3.27)、(3.28) 式より

$$|F(x,y(x);h)-\phi(x,y(x);h)|=O(h^2)$$

となる。よって、(3.28) 式で定義された F をもって定められた (3.14) 式の近似公式

$$Y_j=Y_{j-1}+hF(x_{j-1},Y_{j-1};h)$$

は、2 次の公式と呼ばれる。特に、$\lambda=1/2$ とおいた (3.29) 式

$$F(x,y(x);h)=\frac{1}{2}(f(x,y(x))+f(x+h,y+hf(x,y(x))) \tag{3.29}$$

を用いて解く方法をホイン法という。$Y_j=y(x_j)$ として (3.14)、(3.25) 式より

$$Y_j=Y_{j-1}+h(f(x_{j-1},Y_{j-1})+f(x_{j-1}+h,Y_{j-1}+hf(x_{j-1},Y_{j-1}))/2 \tag{3.30}$$

となるから、アルゴリズムは以下のようになる。初期値 y_0 が与えられた時、各 j $(j=1,2,\cdots,n)$ に対して、

$$\begin{aligned} Y_0 &= y_0 \\ k_1 &= hf(x_{j-1},Y_{j-1}) \\ k_2 &= hf(x_{j-1}+h,Y_{j-1}+k_1) \\ Y_j &= Y_{j-1}+\frac{1}{2}(k_1+k_2) \\ x_j &= x_{j-1}+h \end{aligned}$$

3.6　ルンゲクッタ法

ルンゲクッタ法は p 次の近似公式の $p=4$ の時を使用したものを考える。まず、

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x,Y) && (3.31)\\ k_2 &= f(x+\alpha h, Y+\beta k_1) && (3.32)\\ k_3 &= f(x+\alpha_1 h, Y+(\beta_1 k_1+\gamma_1 k_2)h) && (3.33)\\ k_4 &= f(x+\alpha_2 h, Y+(\beta_2 k_1+\gamma_2 k_2+\delta_2 k_3)h) && (3.34)\\ & && (3.35)\end{aligned}$$

とおく。ここで、(3.15) 式を考えると、$y'=f(x,y(x))$ であるから、y'',y''' についても同様にして

$$\begin{aligned} y'' &= \frac{df}{dx}=\left(\frac{\partial}{\partial x}+f\frac{\partial}{\partial y}\right)f=f_x+ff_y && (3.36)\\ y''' &= \frac{d^2f}{dx^2}=\left(\frac{\partial}{\partial x}+f\frac{\partial}{\partial y}\right)(f_x+ff_y)=f_{xx}+f_xf_y+ff_{xy}+ff_{yx}+ff_y^2+f^2f_{yy} && (3.37)\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$D=\frac{\partial}{\partial x}+f_0\frac{\partial}{\partial y}$$

とおく。ただし、$f_0=f(x_0,y_0)$ とする。また以下においては $[\cdots]_0$ は、$x=x_0,y=y_0$ における関数値を表すものとする。y',y'',y''' はそれぞれ

$$\begin{aligned} y_0' &= f_0\\ y_0'' &= [f_x+ff_y]_0=[Df]_0\\ y_0''' &= [f_{xx}+2ff_{xy}+f^2f_{yy}+f_y(f_x+ff_y)]_0=[D^2f+f_yDf]_0\end{aligned}$$

これらを用いれば、(3.16) 式で、$x=x_0$ の時は以下のように表すことができる。

$$\begin{aligned} \phi(x_0,y(x_0);h) &= \Bigg[f+\frac{h}{2!}Df+\frac{h^2}{3!}(D^2+f_yD)f\\ &\quad+\frac{h^3}{4!}(D^3+f_yD^2+f_y^2D+3D^2f_y)f\Bigg]_0+O(h^5) && (3.38)\end{aligned}$$

ただし、

$$D^l=\sum_{k=0}^{l}\binom{l}{k}f_0^{l-k}\frac{\partial^l}{\partial x^k\partial y^{l-k}}$$

ここで、(3.16) 式の $p=4$ について考えるが一般に

$$f(x+u,y+v)=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{1}{l!}\left(u\frac{\partial}{\partial x}+v\frac{\partial}{\partial y}\right)^l f(x,y)$$

が成り立つから、ここで

$$D_1^l=\sum_{k=0}^{l}\binom{l}{k}\alpha^k(\beta f_0)^{l-k}\frac{\partial^l}{\partial x^k\partial y^{l-k}}$$

とすると

$$D_1 = \alpha\frac{\partial}{\partial x} + \beta f_0 \frac{\partial}{\partial y}$$

より、

$$hD_1 = \alpha h\frac{\partial}{\partial x} + \beta h f_0 \frac{\partial}{\partial y} \equiv D_{11}$$

とおく。すると、

$$\begin{aligned}
k_1 &= f(x_0, y_0) = f_0 \qquad (3.39)\\
k_2 &= f(x_0 + \alpha h, y_0 + \beta f_0 h)\\
&= \left[f + D_{11}f + \frac{D_{11}^2 f}{2!} + \frac{D_{11}^3 f}{3!} + \frac{D_{11}^4 f}{4!} + \cdots\right]_0\\
&= \left[f + hD_1 f + \frac{h^2}{2!}D_1^2 f + \frac{h^3}{3!}D_1^3 f + \frac{h^4}{4!}D_1^4 f + \cdots\right]_0 \qquad (3.40)
\end{aligned}$$

と表せる。次に

$$D_2^l = \sum_{k=0}^{l}\binom{l}{k}\alpha_1^k\{(\beta_1+\gamma_1)f_0\}^{l-k}\frac{\partial^l}{\partial x^k \partial y^{l-k}}$$

とすると

$$D_2 = \alpha_1\frac{\partial}{\partial x} + (\beta_1+\gamma_1)f_0\frac{\partial}{\partial y}$$

より

$$hD_2 = \alpha_1 h\frac{\partial}{\partial x} + (\beta_1+\gamma_1)hf_0\frac{\partial}{\partial y}$$

とおくと、

$$\begin{aligned}
\alpha_1 h\frac{\partial}{\partial x} + (\beta_1 k_1 + \gamma_1 k_2)h\frac{\partial}{\partial y} &= hD_2 + (\beta_1 k_1 + \gamma_1 k_2 - \beta_1 k_1 - \gamma_1 k_1)h\frac{\partial}{\partial y}\\
&= hD_2 + (k_2 - f_0)\gamma_1 h\frac{\partial}{\partial y}\\
&= hD_2 + \gamma_1 h^2\left[D_1 f + \frac{h}{2!}D_1^2 f + \frac{h^2}{3!}D_1^3 f + \cdots\right]_0\frac{\partial}{\partial y} \equiv D_{21}
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
k_3 = & f[x_0 + \alpha_1 h, y_0 + (\beta_1 k_1 + \gamma_1 k_2)h]\\
= & \left[f + D_{21}f + \frac{D_{21}^2 f}{2!} + \frac{D_{21}^3 f}{3!} + \frac{D_{21}^4 f}{4!} + \cdots\right]_0\\
= & \left[f + \left\{hD_2 + \gamma_1 h^2\left[D_1 f + \frac{h^2}{2!}D_1^2 f + \frac{h^2}{3!}D_1^3 f + \cdots\right]_0\frac{\partial}{\partial y}\right\}f\right.\\
& + \frac{1}{2!}\left\{h^2 D_2^2 + 2hD_2\gamma_1 h^2\left[D_1 f + \frac{h}{2!}D_1^2 f + \cdots\right]_0\frac{\partial}{\partial y}\right.
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&+\gamma_1^2 h^4\left[D_1 f+\frac{h}{2!}D_1^2 f+\cdots\right]_0^2\frac{\partial^2}{\partial y^2}\Bigg\}\\
&+\frac{1}{3!}\left\{h^3 D_2^3+3h^2 D_2^2\gamma_1 h^2\left[D_1 f+\frac{h^2}{2!}D_1^2 f+\cdots\right]_0\frac{\partial}{\partial y}+\cdots\right\}f+\cdots\Bigg]_0\\
= &\left[f+hD_2 f+\frac{h^2}{2!}D_2^2 f+\frac{h^3}{3!}D_2^3 f+\cdots+\gamma_1 h^2\left\{f_y D_1 f+\frac{h}{2!}f_y D_1^2 f\right.\right.\\
&+hD_1 f D_2 f_y+\frac{h^2}{3!}f_y D_1^3 f+\frac{h^2}{2!}D_1^2 f D_2 f_y+\frac{h^2}{2!}\gamma_1 f_{yy}(D_1 f)^2\\
&\left.\left.+\frac{h^2}{2!}D_1 f D_2^2 f_y+\cdots\right\}\right]_0
\end{aligned}
\tag{3.41}
$$

となる。また、

$$
D_3^l=\sum_{k=0}^{l}\binom{l}{k}\alpha_2^k\{(\beta_2+\gamma_2+\delta_2)f_0\}^{l-k}\frac{\partial^l}{\partial x^k\partial y^{l-k}}
$$

とすると、

$$
D_3=\alpha_2\frac{\partial}{\partial x}+(\beta_2+\gamma_2+\delta_2)f_0\frac{\partial}{\partial y}
$$

より

$$
hD_3=\alpha_2 h\frac{\partial}{\partial x}+(\beta_2+\gamma_2+\delta_2)hf_0\frac{\partial}{\partial y}
$$

おけば、

$$
\begin{aligned}
&\alpha_2 h\frac{\partial}{\partial x}+(\beta_2 k_1+\gamma_2 k_2+\delta_2 k_3)h\frac{\partial}{\partial y}\\
&= hD_3+(\beta_2 k_1+\gamma_2 k_2+\delta_2 k_3-\beta_2 f_0-\gamma_2 f_0-\delta_2 f_0)h\frac{\partial}{\partial y}\\
&= hD_3+[\gamma_2(k_2-f_0)+\delta_2(k_3-f_0)]h\frac{\partial}{\partial y}\\
&= hD_3+h^2\left[\gamma_2\left\{D_1 f+\frac{h}{2!}D_1^2 f+\frac{h^2}{3!}D_1^3 f+\cdots\right\}\right.\\
&\qquad\left.+2\delta_2\gamma_1 hf_y D_1 f)+\frac{h^2}{3!}D_1^3 f+\frac{h^2}{2!}\gamma_1 f_y D_1^2 f+h^2\gamma_1 D_1 f D_2 f_y+\cdots\Big\}\right]_0\frac{\partial}{\partial y}\equiv D_{31}
\end{aligned}
$$

したがって

$$
\begin{aligned}
k_4= &\left[f+D_{31}f+\frac{D_{31}^2 f}{2!}+\frac{D_{31}^3 f}{3!}+\frac{D_{31}^4 f}{4!}+\cdots\right]_0\\
= &\Bigg[f+hD_3 f+h^2 f_y\Bigg\{\gamma_2\left(D_1 f+\frac{h}{2}D_1^2 f+\frac{h^2}{3!}D_1^3 f+\cdots\right)\\
&+\delta_2\left(D_2 f+h\gamma_1 f_y D_1 f+\frac{h}{2}D_2^2 f+\frac{h^2}{2}\gamma_1 f_y D_1^2 f+h^2\gamma_1 D_1^2 f D_2 f_y+\frac{h^2}{3!}D_2^3 f f_y+\cdots\right)\Bigg\}\\
&+\frac{1}{2!}\Bigg\{h^2 D_3^2 f+2h^3 D_3 f_y\Bigg(\gamma_2\left(D_1 f+\frac{h}{2}D_1^2 f+\frac{h^2}{3!}D_2^3 f+\cdots\right)\\
&+\delta_2\left(D_2 f+h\gamma_1 f_y D_1 f+\frac{h}{2}D_2^2 f+\cdots\right)\Bigg)+h^4 f_{yy}(\gamma_2^2(D_1 f)^2+2\gamma_2\delta_2 D_1 f D_2 f
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&\quad + \delta_2^2 (D_2 f)^2 + \cdots) \Big\} + \frac{1}{3!}\{h^3 D_3^3 f + 3h^4 D_3^2 f_y (\gamma_2 D_1 f + \delta_2 D_2 f + \cdots) + \cdots\} \\
&\quad + \frac{1}{4!}\{h^4 D_3^4 f + \cdots\} + \cdots \Big]_0 \\
= &\quad \Big[f + hD_3 f + \frac{h^2}{2!} D_3^2 f + \frac{h^3}{3!} D_3^3 f + \cdots + h^2 (\gamma_2 D_2 f) f_y \\
&\quad + h^3 (\gamma_2 D_1 f + \delta_2 D_2 f_y) D_3 f_y + \frac{h^3}{2} (\gamma_2 D_1^2 f + \delta_2 D_2^2 f + 2\gamma_1 \delta_2 f_y D_1 f) f_y \cdots \Big]
\end{aligned}
\tag{3.42}
$$

となる。そして、(3.14) 式を用いて作ることができる 1 段法

$$
\begin{aligned}
Y_j &= Y_{j-1} + hF(x_{j-1}, Y_{j-1}; h) \\
&= Y_{j-1} + h(c_1 k_1 + c_2 k_2 + c_3 k_3 + c_4 k_4)
\end{aligned}
\tag{3.43}
$$

に (3.39)、(3.40)、(3.41)、(3.42) 式を代入する。これと (3.38) 式とを対応させて、各項の係数を比較すると、以下の方程式を得る。

$$
\left.
\begin{array}{l}
hf \text{ の係数 :} \\
\qquad c_1 + c_2 + c_3 + c_4 = 1 \\
h^2 Df \text{ の係数 :} \\
\qquad c_2 D_1 f + C_3 D_2 f + c_4 D_3 f = \dfrac{Df}{2!} \\
h^3 D^2 f \text{ の係数 :} \\
\qquad c_2 D_1^2 f + c_3 D_2^2 f + c_4 D_3^2 f = \dfrac{2!}{3!} D^2 f \\
h^3 f_y Df \text{ の係数 :} \\
\qquad c_3 \gamma_1 D_1 f + c_4 (\gamma_2 D_1 f + \delta_2 D_2 f) = \dfrac{1}{3!} Df \\
h^4 D^3 f \text{ の係数 :} \\
\qquad c_2 D_1^3 f + c_3 D_2^3 f + c_4 D_3^3 f = \dfrac{3!}{4!} D^3 f \\
h^4 f_y D^2 f \text{ の係数 :} \\
\qquad c_3 \gamma_1 D_1^2 f + c_4 (\gamma_2 D_1^2 f + \delta_2 D_2^2 f) = \dfrac{2}{4!} D^2 f \\
h^4 Df Df_y \text{の係数 :} \\
\qquad c_3 \gamma_1 D_1 f D_2 f_y + c_4 (\gamma_2 D_1 f + \delta_2 D_2 f) D_3 f_y = \dfrac{3}{4!} Df Df_y \\
h^4 f_y^2 Df \text{ の係数 :} \\
\qquad c_4 \gamma_1 \delta_2 D_1 f = \dfrac{1}{4!} Df
\end{array}
\right\}
\tag{3.44}
$$

以上の関係式は演算子 $D, D_s (s = 1, 2, 3)$ について同次になっている。これらの等式が f に関係なく成り立つためには、$D_s^l / D^l f (s, l = 1, 2, 3)$ が定数でなければならない。したがって、$D_1 f = \alpha \dfrac{\partial f}{\partial x} + \beta \dfrac{\partial f}{\partial y}$ と $D_1 f = \dfrac{\partial f}{\partial x} + f_0 \dfrac{\partial f}{\partial y}$ との比が一定になるので、

$$
\alpha = \beta \tag{3.45}
$$

となる。同様に、$D_2 f$、Df、$D_3 f$、Df との比がおのおの一定なので、

$$
\left\{
\begin{array}{l}
\alpha_1 = \beta_1 + \gamma_1 \\
\alpha_2 = \beta_2 + \gamma_2 + \delta_2
\end{array}
\right.
\tag{3.46}
$$

を得る。すなわち、

$$\left(\begin{array}{l} D_1 f = \alpha D f \\ D_2 f = \alpha_1 D f \\ D_3 f = \alpha_2 D f \end{array}\right. \tag{3.47}$$

となる。(3.47) 式を (3.44) 式に代入すると、10 の未知数に関する 8 式（クッタの条件式）が得られる。

$$\left(\begin{array}{llllllllll} c_1 & + & c_2 & + & c_3 & + & c_4 & = & 1 & (a) \\ & & c_2\alpha & + & c_3\alpha_1 & + & c_4\alpha_2 & = & 1/2 & (b) \\ & & c_2\alpha^2 & + & c_3\alpha_1^2 & + & c_4\alpha_2^2 & = & 1/3 & (c) \\ & & c_2\alpha^3 & + & c_3\alpha_1^3 & + & c_4\alpha_2^3 & = & 1/4 & (d) \\ & & & & c_3\alpha\gamma_1 & + & c_4(\alpha\gamma_2 + (\alpha_1\delta_2) & = & 1/6 & (e) \\ & & & & c_3\alpha_2\gamma_1 & + & c_4(\alpha^2\gamma_2 + (\alpha_1^2\delta_2) & = & 1/12 & (f) \\ & & & & c_3\alpha\alpha_1\gamma_1 & + & c_4(\alpha\gamma_2 + (\alpha_1\delta_2)\alpha_2 & = & 1/8 & (g) \\ & & & & & & c_4\alpha\gamma_1\delta_2 & = & 1/24 & (h) \end{array}\right. \tag{3.48}$$

ここで (e)、(f) 式より c_3 を消去する。

$$C_4(\alpha_1 - \alpha)\alpha_1\delta_2 = \frac{1}{12} - \frac{\alpha}{6}$$

これと (h) 式か c_4 を消去する。

$$\frac{(\alpha_1 - \alpha)\alpha_1\delta_2}{224\alpha\gamma_1\delta_2} = \frac{1}{12} - \frac{\alpha}{6} 2\alpha\gamma_1(2\alpha - 1) = \alpha_1(\alpha - \alpha_1) \tag{i}$$

また、(e)、(f) から c_4 を消去する。

$$c_3\alpha\gamma_1(\alpha_2 - \alpha_1) = \frac{\alpha_2}{6} - \frac{1}{8}$$

これと、(i) 式から γ を消去する。

$$c_3(\alpha_2 - \alpha_1)\frac{\alpha_1(\alpha - \alpha_1)}{2(\alpha - 1)} = \frac{\alpha_2}{6} - \frac{1}{8}$$

よって、

$$c_3\alpha_1(\alpha_2 - \alpha_1)(\alpha - \alpha_1) = (2\alpha - 1)\left(\frac{\alpha_2}{3} - \frac{1}{4}\right) \tag{j}$$

さらに計算をすすめると、$(b) \times \alpha\alpha_2 - (\alpha + \alpha_1) \times (c) + (d)$ より

$$c_3\alpha_1(\alpha_2 - \alpha_1)(\alpha - \alpha_1) = \frac{1}{2}\alpha\alpha_2 - \frac{1}{3}(\alpha + \alpha_2) + \frac{1}{4} \tag{k}$$

(j)、(k) 式から、

$$(2\alpha - 1)\left(\frac{\alpha_2}{3} - \frac{1}{4}\right) = \frac{1}{2}\alpha\alpha_2 - \frac{1}{3}(\alpha + \alpha_2) + \frac{1}{4}$$

これを整理する。また (h) 式より、$\alpha \neq 0$ より

$$\alpha(\alpha_2 - 1) = 0, \qquad \alpha_2 = 0$$

これを (a)、(b)、(c) 式に代入して、c_1, c_2, c_3, c_4 について解くと、

$$c_1 = \frac{6\alpha\alpha_1 - 2(\alpha+\alpha_1)+1}{12\alpha\alpha_1}$$
$$c_2 = \frac{2\alpha_1 - 1}{12\alpha(\alpha_1-\alpha)(1-\alpha)}$$
$$c_3 = \frac{1-2\alpha}{12\alpha_1(\alpha_1-\alpha)(1-\alpha_1)}$$
$$c_4 = \frac{6\alpha\alpha_1 - 4(\alpha+\alpha_1)+3}{12(1-\alpha)(1-\alpha_1)}$$

となる。これらを (a)、(b)、(c)、(d) 式に代入して $\gamma_1\gamma_2\delta_1$ を α, α_1 を用いて求める。また、(3.45)、(3.46) 式より、

$$\beta = \alpha, \qquad \beta_1 = \alpha_1 - \gamma_1(\alpha,\alpha_1)\beta_2 = \alpha_2 - \gamma_2(\alpha,\alpha_1) - \delta_2(\alpha,\alpha_1)$$

と表すことができる。特に、ルンゲクッタの公式は、$\alpha = \alpha_1 = \dfrac{1}{2}$ の場合で、連立一次方程式 (a)、(b)、(c)、(d) 式を解くと

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1/2 & 1/2 & 1 & 1/2 \\ 0 & 1/4 & 1/4 & 1 & 1/3 \\ 0 & 1/8 & 1/8 & 1 & 1/4 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1/6 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 2/3 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1/6 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

となるから、c_1, c_2, c_4 は任意変数 c_3 を含む不定解

$$\begin{cases} C_1 = \dfrac{1}{6} \\ C_2 = \dfrac{2}{3} - C_3 \\ C_3 = \dfrac{1}{6} \end{cases} \tag{3.49}$$

また (3.45)、(3.46)、(3.49)、(e)、(f)、(g) 式から

$$\begin{cases} \gamma_1 = \dfrac{1}{6c_3} \\ \gamma_2 = 1 - 3c_3 \\ \delta_2 = 3c_3 \\ \beta = \alpha = \dfrac{1}{2} \\ \beta_1 = \alpha_1 - \gamma_1 = \dfrac{1}{2} - \dfrac{1}{6c_3} \\ \beta_2 = \alpha_2 - \gamma_2 - \gamma_2 = 0 \end{cases} \tag{3.50}$$

ここで、式の対称性を考えて、$c_3 = 1/3$ を選ぶと、$c_1 = 1/6, c_2 = 1/3, c_3 = 1/3, c_4 = 1/6, \gamma_1 = 1/2, \gamma_2 = 0, \delta_2 = 1, \beta_1 = 0, \beta_2 = 0$ となる。これらをまとめると、以下のようなアルゴリズムが得られる。

$$Y \;=\; y_0$$

各 $j \;\; (j = 1, 2, \cdots, n)$ に対して、

$$\begin{aligned} k_1 &= hf(x_{j-1}, Y_{j-1}) \\ k_2 &= hf(x_{j-1} + h/2, Y_{j-1} + k_1/2) \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
k_3 &= hf(x_{j-1}+h/2, Y_{j-1}+k_2/2) \\
k_4 &= hf(x_{j-1}+h, Y_{j-1}+k_3) \\
Y_j &= Y_{j-1}+\frac{1}{6}(k_1+2k_2+2k_3+k_4) \\
x_j &= x_{j-1}+h
\end{aligned}
$$

となる。
以上の三種類の数値解法を用いて計算した結果とプログラムソースを付録 4 に示す。

3.7 連立微分方程式の数値解法

次に、ルンゲクッタ法による連立微分方程式の数値解法を考える。m 個の未知関数 $y_1(x), \ldots, y_m(x)$ の初期値問題

$$
\frac{dy_j}{dx} = f_j(x, y_1, \ldots, y_m), \quad y_j(x_0) = y_j0, \quad (j = 1, 2, \cdots, m)
$$

を解くとする。この時にベクトル記号

$$
\boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{y}_0 = \begin{pmatrix} y_10 \\ \vdots \\ y_m0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}) = \begin{pmatrix} f_1(x, y_1, \cdots, y_m) \\ \vdots \\ f_m(x, y_1, \cdots, y_m) \end{pmatrix}
$$

を用いれば、 一階常微分方程式の初期値問題のように

$$
\frac{d\boldsymbol{y}}{dx} = \boldsymbol{f}(x, \boldsymbol{y}) \quad \boldsymbol{y}(x_0) = \boldsymbol{y}_0 \tag{3.51}
$$

と考えれば、スカラーをベクトルに置き換えて考えればよい。以下に 2 元連立微分方程式の初期値問題

$$
\frac{dy}{dx} = f_1(x, y, z) \tag{3.52}
$$

$$
\frac{dz}{dx} = f_2(x, y, z) \tag{3.53}
$$

$$
y(x_0) = y_0, \quad z(x_0) = z_0
$$

のルンゲクッタ法のアルゴリズムを示す。初期条件、

$$
Y_0 = y_0, Z_0 = z_0,
$$

の時、各 $j(j = 1, 2, \cdots, n)$ に対して、

$$
\begin{aligned}
k_1 &= hf_1(x_{j-1}, Y_{j-1}, Z_{j-1}) \\
m_1 &= hf_2(x_{j-1}, Y_{j-1}, Z_{j-1}) \\
k_2 &= hf_1(x_{j-1}+h/2, Y_{j-1}+k_1/2, Z_{j-1}+m_1/2) \\
m_2 &= hf_2(x_{j-1}+h/2, Y_{j-1}+k_1/2, Z_{j-1}+m_1/2) \\
k_3 &= hf_1(x_{j-1}+h/2, Y_{j-1}+k_2/2, Z_{j-1}+m_2/2)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
m_3 &= hf_2(x_{j-1}+h/2, Y_{j-1}+k_2/2, Z_{j-1}+m_2/2) \\
k_4 &= hf_1(x_{j-1}+h, Y_{j-1}+k_3, Z_{j-1}+m_3) \\
m_4 &= hf_2(x_{j-1}+h, Y_{j-1}+k_3, Z_{j-1}+m_3) \\
Y_j &= Y_{j-1}+\frac{1}{6}(k_1+2k_2+2k_3+k_4) \\
Z_j &= Z_{j-1}+\frac{1}{6}(m_1+2m_2+2m_3+m_4) \\
x_j &= x_{j-1}+h
\end{aligned}
$$

付録 5 に連立微分方程式の数値計算の結果とプログラミングソースを示した。

4　偏微分方程式の数値解法

4.1　偏微分方程式の種類

独立変数 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ とその関数 u、ならびにある階数までの u の偏導関数に関する 1 つの関数方程式

$$F(x_1, x_2, \cdots, x_n, u, \frac{\partial u}{\partial x_1}, \cdots, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2}, \frac{\partial^2 u}{\partial x_1 \partial x_2}, \cdots) = 0$$

を偏微分方程式という。今回は 2 独立変数の 2 階線形偏微分方程式までを扱うことにした。ここで、独立変数 x, y 未知関数 $u(x, y)$ とすると、

$$a(x,y)\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2b(x,y)\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c(x,y)\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + d(x,y)\frac{\partial u}{\partial x} + e(x,y)\frac{\partial u}{\partial y} + f(x,y)u = g(x,y)$$

と表すことができる。ここで、a, b, c, d, e, f, g は既存関数である。この方程式は指定された領域で常に

$b^2 - ac > 0$ ならば、双曲型

$b^2 - ac < 0$ ならば、楕円型

$b^2 - ac = 0$ ならば、放物型

というように、分類される。

4.2　差分法

偏微分方程式を解く方法の 1 つである差分法について説明する。x 軸上の点 $x_{i-1} < x_i < x_{i+1}(x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1} = \Delta x)$ に対する関数 $y = y(x)$ 上の 3 点を $(x_{i-1}, y_{i-1}), (x_i, y_i), (x_{i+1}, y_{i+1})$ とする。この関数上の点 (x_i, y_i) における勾配 $\tan\theta$（接線と x 軸とのなす角 θ とする。）は

$$\tan\theta = \frac{dy}{dx} = \lim_{\Delta x \to 0}\frac{\Delta y}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0}\frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x}$$

であるから、Δx が十分小さければ、$\tan\theta = (y_{i+1} - y_i)/\Delta x$ と近似できる。すなわち常微分係数 dy/dx が次式で近似できる。

$$\frac{dy}{dx} = \frac{y_{i+1} - y_i}{\Delta x}$$

これを常微分係数の前進差分近似という。同様にして、後退差分近似は

$$\frac{dy}{dx} = \frac{y_i - y_{i-1}}{\Delta x}$$

で表すことができ、また $\tan\theta = (y_{i+1} - y_{i-1})/(2\Delta x)$ で近似すると、

$$\frac{dy}{dx} = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2\Delta x}$$

となり、これを中心差分近似という。これは、偏微分係数においても考え方は全く同様である。今 $u = u(x, y)$ が領域 $0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b$ で与えられているものとする。この領域を格子に分割する。x 方向への格子番号を $i = 0 \sim m$、y 方向への格子番号を $j = 0 \sim n$ とする。点 (x, y) の格子点の番号を (i, j) とし、そこでの u の値 $u(x, y)$ を u_{ij} と表す。また隣の格子点も同様に、$u_{i-1,j}, u_{i,j-1}$ などで表す。また格子間隔を $\Delta x_i, \Delta y_j$ とする。そうすると、偏微分係数 $\partial u/\partial x, \partial u/\partial y$ に対する差分近似は、次のように表すことができる。

前進差分近似

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x_i} \tag{4.1}$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y_j} \tag{4.2}$$

後退差分近似

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1}} \tag{4.3}$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y_{j-1}} \tag{4.4}$$

中心差分近似

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i} \tag{4.5}$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j-1}}{\Delta y_{i-1} + \Delta y_j} \tag{4.6}$$

また、2 階偏微分係数 $\partial^2 u/\partial x \partial y$ は中心差分近似を用いると次のように表される。

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right) = \frac{(\partial u/\partial y)_{i+1,j} - (\partial u/\partial y)_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1} + \Delta x_i}$$

$(\partial u/\partial y)_{i+1,j}$ は $i+1$ を固定して u の差分近似をとればよいから

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i-1,j} = \frac{u_{i-1,j+1} - u_{i-1,j-1}}{\Delta y_{j-1} + \Delta y_j}$$

同様に、$(\partial u/\partial y)_{i-1,j}$ は $i-1$ を固定して

$$\left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{i+1,j} = \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1}}{\Delta y_{j-1} + \Delta y_j}$$

よって

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1} - u_{i-1,j+1} + u_{i-1,j-1}}{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)(\Delta y_{i-1} + \Delta y_i)} \tag{4.7}$$

さらに $\partial^2 u/\partial y \partial x$ を同様に計算すると、

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} = \frac{u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1} - u_{i-1,j+1} + u_{i-1,j-1}}{(\Delta x_{i-1} + \Delta x_i)(\Delta y_{i-1} + \Delta y_i)} \tag{4.8}$$

すなわち、差分近似においても

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 u}{\partial y \partial x} \tag{4.9}$$

となる。また、$\partial^2 u/\partial x^2$ と $\partial^2 u/\partial y^2$ にたいしては、$\partial u/\partial x$ と $\partial u/\partial y$ の前進差分近似を用いて

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right) = \frac{(\partial u/\partial x)_{i+1,j} - (\partial u/\partial x)_{i,j}}{\Delta x_i}$$

$(\partial u/\partial x)_{i+1,j}$ と $(\partial u/\partial x)_{i,j}$ には後退差分近似を用いて

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i+1,j} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x_i}, \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{i,j} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1}}$$

と表すと、

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \left(\frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{\Delta x_i} - \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{\Delta x_{i-1}}\right) \Big/ \Delta x_i \tag{4.10}$$

と差分化される。同様にして、y についても次式が得られる。

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \left(\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta y_j} - \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta y_{j-1}}\right) \Big/ \Delta y_j \tag{4.11}$$

ここで、格子間隔が同じ場合は、

$$\Delta x_{i-1} = \Delta x_i = h \Delta y_{j-1} = \Delta j_i = k$$

とおくと、上式をこの h、k と置き換えれば良い。置き換えた場合を以下に示す。
中心差分近似

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{1}{2h}(u_{i+1,j} - u_{i-1,j}) \tag{4.12}$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{1}{2k}(u_{i,j+1} - u_{i,j-1}) \tag{4.13}$$

2 階偏微分係数

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} = \frac{1}{4hk}(u_{i+1,j+1} - u_{i+1,j-1} - u_{i-1,j+1} + u_{i-1,j-1}) \tag{4.14}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2}(u_{i+1,j} - 2u_{i,j} - u_{i-1,j}) \tag{4.15}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{1}{k^2}(u_{i,j+1} - 2u_{i,j} - u_{i,j-1}) \tag{4.16}$$

ここで、差分近似の誤差について説明する。まず、2 変数関数のテイラー展開により $u(x+h,y)$ と $u(x-h,y)$ は以下のようになる。

$$u(x+h,y) = u(x,y) + h\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{h^3}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \cdots \tag{4.17}$$

$$u(x-h,y) = u(x,y) - h\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{h^2}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{h^3}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \cdots \tag{4.18}$$

(4.17) より $(\partial u/\partial x)$ を求めると

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u(x+h,y) - u(x,y)}{h} - \frac{h}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - \frac{h^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \cdots$$

$u(x+h,y) = u_{i+1,j}, u(x,y) = u_{i,j}$ とすると、

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i+1,j} - u_{i,j}}{h} - O(h) \tag{4.19}$$

となり、前進差分近似の主要誤差は h の程度となる。同様にして (4.18) 式より

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{i,j} - u_{i-1,j}}{h} - O(h) \tag{4.20}$$

となるから、後退差分近似の主要誤差も $O(h)$ となる。また、(4.17) 式から (4.18) 式を引いて $(\partial u/\partial x)$ を求めると、

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial x} &= \frac{u(x+h,y) - u(x-h,y)}{2h} - \frac{h^2}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3} - \cdots \\ &= \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h} - O(h^2)\end{aligned} \tag{4.21}$$

となり、中心差分近似の打ち切り誤差は h^2 程度となる。さらに (4.17) 式と (4.18) 式を加えて $(\partial u/\partial x)$ を求めると

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &= \frac{u(x+h,y) - 2u(x,y) + u(x-h,y)}{h^2} - \frac{h^2}{12}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4} - \cdots \\ &= \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} - O(h^2)\end{aligned} \tag{4.22}$$

となり、$\partial^2 u/\partial x^2$ の打ち切り誤差も h^2 程度となる。このように微分方程式に現れる導関数、偏導関数をこのような差分近似に置き換えて、差分方程式を導き、これを解いて近似解を求める方法を差分法という。

4.3 一次元の方程式の解法

3 つある方程式から、放物型偏微分方程式である、一次元の熱伝導方程式の境界値問題

$$\frac{\partial u}{\partial t} = c^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \tag{4.23}$$

初期条件が

$$u(x,0) = f(x), \quad 0 \leq x \leq \text{Ł}$$

で境界条件を

$$u(0,t) = p(t), u(L,t) = q(t), \quad t \geq 0$$

の計算法について説明する。ここで、c は任意定数とする。(4.23) 式の差分近似式は、(4.13)、(4.15) 式より

$$\frac{u(x,t+k)-u(x,t)}{k}=c^2\frac{u(x+h,t)-2u(x,t)+u(x-h,t)}{h^2}$$

となる。ここで、$\lambda=kc^2/h^2$ とおいて上式を

$$u(x,t+k)=\lambda u(x+h,t)+(1-2\lambda)u(x,t)+\lambda u(x-h,t) \tag{4.24}$$

と書き直すと、$u(x+h,t),u(x,t),u(x-h,t)$ の 3 つの値が分かれば、$u(x,t+k)$ の値が得られることがわかる。また、(4.13)、(4.15) 式を用いているから

$$\{u_t(x,t)-c^2u_{xx}(x,t)\}-\{c^2/(\lambda h^2)\}\{u(x,t+k)-\lambda u(x+h,t)-(1-2\lambda)u(x,t)-\lambda u(x-h,t)\}=O(h^2)$$

となるから、u が (4.23) 式を満たしていれば、$k=\lambda h^2/c^2$ より、

$$u(x,t+k)=\lambda u(x+h,t)+(1-2\lambda)u(x,t)+\lambda u(x-h,t)+O(h^4)$$

よって、 近似式 は誤差が $O(h^4)$ になる。これを利用して境界値問題の近似解を差分法により求める。まず、区間 $[0,L]$ を N 等分して、$h=L/N,k=\lambda h^2/c^2$ とき、分点をそれぞれ $x_m=mh \quad (m=0,1,\cdots,N),t_n=nk \quad (n=0,1,\cdots)$ とおく。そうすると $\{0\le x\le L,t\ge 0\}$ で格子点 (x_m,t_n) ができる。そして、$u(x_m,t_n)$ の近似値を $U_{m,n}$ とおくと、(4.23) 式に対する差分式は、(4.24) より、

$$U_{m,n+1}=\lambda U_{m-1,n}+(1-2\lambda)U_{m,n}+\lambda U_{m+1,n} \quad (n=0,1,\cdots;m=1,2,\cdots,N-1) \tag{4.25}$$

である。ここで、初期条件と境界条件は真の値を用いて

$$\begin{cases} U_{m,0}=u(x_m,0)=f(x_m) & (m=0,1,\cdots,N) \\ U_{0,n}=u(0,t_n)=p(t_n),\ U_{n,m}=u(L,t_n)=q(t_n) & (n=0,1,\cdots) \end{cases} \tag{4.26}$$

とおく。以上を利用すれば、一次元の熱伝導方程式を解くことができる。数値解析のアルゴリズムを以下に示す。
初期値、境界値を以下の様におくと、

$$\begin{aligned} U_{m,0} &= f(x_m) \quad (m=0,1,\cdots,N) \\ U_{0,n} &= p(t_n),U_{N,n}=q(t_n) \quad (n=0,1,\cdots) \end{aligned}$$

各 n $(n=0,1,2,\cdots)$ に対して

$$U_{m,n+1}=\lambda U_{m-1,n}+(1-2\lambda)U_{m,n}+\lambda U_{m+1,n} \quad (m=1,2,\cdots,N-1)$$

を繰り返し解く。
ここで、注意しなければならないのが、λ である。λ の値によっては、微分方程式の解が収束しない時があるので、λ について以下の定理がある。

定理 4.1 $\lambda=kc^2/h^2$ を $0\le\lambda\le 1/2$ に固定するとき、熱伝導方程式に対する差分方程式の解 $U_{m,n}$ は $h\to 0$ のとき、真の解 $u(x_m,t_n)$ に、x について一様に収束する。

この理論を用いて、実際に数値計算した結果とプログラムソースを付録 6 に示す。

4.4　二次元の方程式の解法

3 つある方程式から 2 次元の楕円形方程式である、ラプラス方程式

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}=0; \quad 0\le x\le a,\ 0\le y\le b \tag{4.27}$$

を境界条件

$$\begin{aligned} u(0,y)&=p(y) \quad ,u(a,y)=q(y)\\ u(x,0)&=v(x) \quad ,u(x,b)=w(x) \end{aligned} \tag{4.28}$$

のもとで、数値計算する方法について示す。p,q,v,w は既知関数とする。領域 $0\le x\le a, 0\le y\le b$ を間隔 h,k の等間隔差分格子で分割し、$i=0,1,\cdots,m,\quad j=0,1,\cdots,n$ とする。また $f(x,y)=f_{i,j}$ として、(4.15)、(4.16) 式を用いて (4.27) 式を差分方程式に変換する。

$$\frac{1}{h^2}(u_{i+1,j}-2u_{i,j}+u_{i-1,j})+\frac{1}{k^2}(u_{i,j+1}-2u_{i,j}+u_{i,j-1})=0$$

上式より $u_{i,j}$ を求めると

$$u_{i,j}=\frac{1}{2(h^2+k^2)}\{k^2(u_{i+1,j}+u_{i-1,j})+h^2(u_{i,j+1}+u_{i,j-1})\} \tag{4.29}$$

となる。境界上における u の値 $p(y)$、$q(y)$、$v(x)$、$w(x)$ は既知であるから、それ以外の $u_{i,j}\quad i=1,2,\cdots,m-1; j=1,2,\cdots,n-1$ に適当な初期値 $u_{i,j}=0$ を与えておく。この初期値を (4.29) 式の右辺に代入して、新しい u の値 $u_{i,j}^{(1)}$ を求める。次に $u_{i,j}^{(1)}$ を (4.29) 式の右辺にまた代入して次の値 $u_{i,j}^{(2)}$ を求める。この操作を繰り返して、第 k 番目と第 $k+1$ 番目の近似値の相対誤差が、指定した十分小さな ε より小さくなったとき、すなわち

$$\begin{gathered}\left|(u_{i,j}{}^{(k+1)}-u_{i,j}{}^{(k)})/u_{i,j}{}^{(k+1)}\right|\le\varepsilon;\\ i=1,2,\cdots,m-1; \qquad j=1,2,\cdots,n-1\end{gathered} \tag{4.30}$$

となったとき解は収束したものみなして、$u_{i,j}{}^{(k+1)}$ を解とする。しかしながら格子点が多くなると判定すべき解 $u_{i,j}$ が多くなり、収束判定に時間がかかる。そこで、すべての解の収束を同時に判定するために、誤差の合計の相対量を用いることにすると、

$$\sum_{i=1}^{m-1}\sum_{j=1}^{n-1}\left|u_{i,j}{}^{(k+1)}-u_{i,j}{}^{(k)}\right|\Big/\sum_{i=1}^{m-1}\sum_{j=1}^{n-1}\left|u_{i,j}{}^{(k+1)}\right|\le\varepsilon \tag{4.31}$$

(4.31) 式によって収束を判定することができる。そして、(4.29) 式で繰り返し計算を行う場合、一番新しい u の値を用いると収束が早くなる。よって、(4.29) 式は、次のように表すことができる。

$$u_{i,j}{}^{(k+1)} \;=\; \frac{1}{2(h^2+k^2)}\left\{k^2(u_{i+1,j}{}^{(k)}+u_{i-1,j}{}^{(k+1)})+h^2(u_{i,j+1}{}^{(k)}+u_{i,j-1}{}^{(k+1)})\right\} \tag{4.32}$$

この (4.32) 式を用いる反復法をガウス-ザイデル法という。次に、(4.32) 式の右辺に $u_{i,j}{}^{(k)}-u_{i,j}{}^{(k)}$ を加えて次のように変形する。

$$u_{i,j}{}^{(k+1)}=u_{i,j}{}^{(k)}+\left[\frac{1}{2(h^2+k^2)}\left\{k^2(u_{i+1,j}{}^{(k)}+u_{i-1,j}{}^{(k+1)})+h^2(u_{i,j+1}{}^{(k)}+u_{i,j-1}{}^{(k+1)})\right\}-u_{i,j}{}^{(k)}\right] \tag{4.33}$$

こうすると、(4.33) 式の [ ] 内の量は $u_{i,j}{}^{(k)}$ から 1 回の繰り返し計算によって、$u_{i,j}{}^{(k+1)}$ を求めるときの $u_{i,j}{}^{(k)}$ の補正量と見ることができる。あるいは、$u_{i,j}{}^{(k+1)}-u_{i,j}{}^{(k)}=[\ \ ]$ とすると、[ ] 内の量は $u_{i,j}{}^{(k+1)}-u_{i,j}{}^{(k)}$ の

誤差とみなすことができる。そこで、この補正量 [ ] を強制的に大きくして、より速く解が収束するように、[ ] に適当な係数 ω をかけた

$$u_{i,j}{}^{(k+1)} = u_{i,j}{}^{(k)} + \omega\left[\frac{1}{2(h^2+k^2)}\left\{k^2(u_{i+1,j}{}^{(k)} + u_{i-1,j}{}^{(k+1)}) + h^2(u_{i,j+1}{}^{(k)} + u_{i,j-1}{}^{(k+1)})\right\} - u_{i,j}{}^{(k)}\right] \tag{4.34}$$

と表すことができる。この ω を緩和係数といい、うまく選ぶと効率よく計算できることが確かめられている。この (4.34) 式による反復法を SOR 法という。また計算速度を高めるための ω の最適値 ω_0 は、例えば、格子番号 $i = 0, 1, 2, \cdots, m; \quad j = 0, 1, 2, \cdots, n$ で格子間隔 $h = k$ の場合、次式で与えられることが知られている。

$$\omega_0 = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - (\mu/2)^2}}, \qquad \mu = \cos\frac{\pi}{m} + \cos\frac{\pi}{n} \tag{4.35}$$

この理論を用いて、実際に数値計算した結果とプログラムソースを付録 7 に示す。

5　最後に

以上、偏微分方程式の解析を行ってきたが、精度の違いによって、計算値に差異が発生するなど、数値解析は安易に使用しても必要とする正確な結果が得られないことがよく理解できた。

今回の研修により、偏微分方程式解析の１つである差分法について理解できた。しかし、その他の解法として境界要素法と有限要素法などがあり、今後の研究活動で必要になるので、引き続き学習したい。

6　謝辞

本研修において、終始暖かい激励と指導を頂いた橋本敬助教授に心から感謝致します。また、本研修を進める上で様々な助言を与えてくださった本多卓也教授に深く感謝致します。　本研修では、今までに使用したことがないアプリケーションによる作成を試みたために、思うように結果が出せず、多くの皆様方に大変ご迷惑をお掛けしました。この研修で得た知識を修士論文など、今後必ず役立たせていきます。最後になりましたが、研修中悩んでいる私に、励ましとともにご指導頂いた、本多研究室の南晃様、填原幹次郎様、林準也様に心から感謝し、謝辞とさせていただきます。

参考文献

[1] 小島寛之、「ゼロから学ぶ微分積分」講談社（2001）

[2] 名取亮、「新コンピュータサイエンス講座ー数値計算法」オーム社（1998）

[3] 藤野清次、「数値計算の基礎ー数値解法を中心にー」サイエンス社（1999）

[4] 伊理正夫、藤野和建、「数値計算の常識」共立出版株式会社（2001）

[5] 登坂宣好、大西和榮 、「偏微分方程式の数値シミュレーション」東京大学出版会（1993）

[6] 新濃清志、船田哲男、「数値計算の基礎ー理論と PAD,PASCAL,C ー」培風館（1999）

[7] 田代嘉宏、「応用数学要論シリーズ 3 微分方程式要論」森北出版株式会社（1998）

[8] 石原繁、浅野重初「理工系の基礎 微分積分 増補版」裳華房（1997）

[9] 藤野清次、「数値計算の基礎ー数値解法を中心にー」サイエンス社（1999）

[10] 河西朝雄、「C 言語用語ハンドブック」株式会社ナツメ出版（1989）

[11] Samuel P.Harbison,Guy L.Steele Jr., 斎藤信男訳「詳説 C 言語」ソフトバンク株式会社（1992）

[12] 竹本宣弘、荒実、「C による数値計算」浅倉書店（1993）

[13] W.H.Press,B.P.Flannery,S.A.Teukolsky,W.T.Vetterling「Numerical Recipes in C[日本語版]」技術評論社（1993）

[14] 篠原能材、数値解析の基礎日新出版（1997）

[15] 山崎郭滋、偏微分方程式の数値解析入門森北出版株式会社（1993）

[16] 戸川隼人、科学技術計算ハンドブック-基礎篇 C 言語版（1992）

[17] 柴田優、C 言語と基礎数値計算工学図書株式会社（1998）

[18] 磯田和男、大野豊、新版数値計算ハンドブックオーム社（1990）

[19] ナミール-オーシャン、鈴木郁朗 訳、$C/C++$ 言数値計算アルゴリズムブック海文堂出版株式会社（1997）

7　付録 数値解析結果とプログラムソース

= 1 = ラグランジュ補間公式による計算

= 2 = ニュートン法による非線形方程式の計算

= 3 = 複合台形公式による数値積分

= 4 = 常微分方程式の数値解法

= 5 = ロトカ-ボルテラ式の数値解析

= 6 = 熱伝導方程式の数値解析

= 7 = 楕円型方程式の数値解析