

第1章 Introduction 微分方程式の導出

1.1 常微分方程式

Malthus の法則によると、時刻 t における人口を $u(t)$ と書くとき、時刻 Δt あたりの $u(t)$ の増加量は $u(t)$ に比例する。すなわち、

$$u(t + \Delta t) - u(t) = \alpha u(t) \Delta t \quad (1.1.1)$$

という差分方程式で表される。両辺を Δt で割って $\Delta t \rightarrow 0$ という極限をとると、

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t} = u'(t)$$

より、

$$u'(t) = \alpha u(t)$$

という常微分方程式を得る。この一般解は

$$u(t) = Ce^{\alpha t} \quad (C \text{ は積分定数})$$

となる。従って初期値を $u(0) = u_0$ とすると、

$$u(t) = u_0 e^{\alpha t} \quad (1.1.2)$$

と書ける。

上の差分方程式 (1.1.1) を直接解くこともできる。そのためには

$$u(t + \Delta t) = (1 + \alpha \Delta t) u(t)$$

と変形すれば良い。このとき $u(n\Delta t)$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) は等比数列 (geometric sequence) となり、

$$u(n\Delta t) = (1 + \alpha \Delta t)^n u_0$$

となる。とくに $t = n\Delta t$ とすると、

$$u(t) = (1 + \alpha \Delta t)^{\frac{t}{\Delta t}} u_0$$

となり、 $\Delta t \rightarrow 0$ という極限をとると、 $(1 + \alpha \Delta t)^{\frac{t}{\Delta t}} = \left\{ (1 + \alpha \Delta t)^{\frac{1}{\alpha \Delta t}} \right\}^{\alpha t} \rightarrow e^{\alpha t}$ より、

$$u(t) = u_0 e^{\alpha t}$$

となって, (1.1.2) に一致する.

上記の計算では差分方程式で極限をとって得られた微分方程式の解と, 差分方程式の解の極限とが一致した. つまり, 離散時間の方程式を解くことで, 微分方程式の近似解を得ることができた. 数値計算ではこのように離散時間の方程式を解くことで, 微分方程式の近似解を得ることを目標とする.

Logistic 方程式

ある環境における限界人工を K とするとき, Malthus の法則を

$$u(t + \Delta t) - u(t) = \alpha u(t)(K - u(t))\Delta t \quad (1.1.3)$$

と改良した差分方程式を考えることができる [Verhulst 1845]. 再び, 両辺を Δt で割って $\Delta t \rightarrow 0$ という極限をとると,

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(t + \Delta t) - u(t)}{\Delta t} = u'(t)$$

より

$$u'(t) = \alpha u(t)(K - u(t)) \quad (1.1.4)$$

という微分法方程式を得る. これを Logistic 方程式という.

この一般解は

$$\begin{aligned} \frac{du}{u(K-u)} = \alpha dt & \quad \therefore \frac{1}{K} \int \left(\frac{1}{u} + \frac{1}{K-u} \right) du = \alpha \int dt \\ \frac{1}{K} \log \left| \frac{u}{K-u} \right| = \alpha t + C & \quad \therefore \frac{u}{K-u} = Ce^{K\alpha t} \\ \therefore u = \frac{KCe^{K\alpha t}}{1 + Ce^{K\alpha t}} \end{aligned}$$

と求まる. とくに $u(0) = u_0$ とおくと,

$$C = \frac{u_0}{K - u_0} e^{-K\alpha t}$$

より,

$$u = \frac{Ku_0 e^{K\alpha t}}{K - u_0 + u_0 e^{K\alpha t}} \quad (1.1.5)$$

と書ける.

上で出てきた差分方程式は $u_n = u(n\Delta t)$ とおくと,

$$u_{n+1} = u_n + \alpha u_n (K - u_n) \Delta t$$

という漸化式だとみなせる。この漸化式を解くのは難しいが、解の定性的な議論は可能である。

1.2 偏微分方程式

Random walk と熱方程式

時刻 t における数直線上の点 x での粒子の存在確率を $u(t, x)$ とするとき、時刻 $t + \Delta t$ での確率が

$$u(t + \Delta t, x) = \frac{1}{2}\{u(t, x - \Delta x) + u(t, x + \Delta x)\}$$

で与えられるとする。(例えば、 x が Δx の整数倍にのみ粒子が存在するとして、それらがランダムに隣の点に移動するような状況を考えるとよい。) テイラー展開

$$\begin{aligned} u(t + \Delta t, x) &= u(t, x) + \Delta t u_t(t, x) + \dots \\ u(t, x \pm \Delta x) &= u(t, x) \pm \Delta x u_x(t, x) + \frac{1}{2}(\Delta x)^2 u_{xx}(t, x) + \dots \end{aligned}$$

を代入すると

$$(\Delta t)u_t = \frac{1}{2}(\Delta x)^2 u_{xx} + (\text{高次の項})$$

となる。従って $\frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t} = D > 0$ (一定) として $\Delta t, \Delta x \rightarrow 0$ とすると、

$$u_t(t, x) = D u_{xx}(t, x) \quad (1.2.1)$$

という偏微分方程式を得る。これを熱方程式または拡散方程式という。

同様に2次元平面内の random walk を考えることにより、

$$u(t + \Delta t, x, y) = \frac{1}{4} \{u(t, x - \Delta x, y) + u(t, x + \Delta x, y) + u(t, x, y - \Delta y) + u(t, x, y + \Delta y)\}$$

という差分方程式から

$$u_t(t, x, y) = D(u_{xx}(t, x, y) + u_{yy}(t, x, y)) \quad (1.2.2)$$

という偏微分方程式を得る。これは2次元の熱方程式と呼ばれる。とくにこの定常状態（時間によらない解）として

$$u_{xx}(t, x, y) + u_{yy}(t, x, y) = 0 \quad (1.2.3)$$

という偏微分方程式を得るが、これは Laplace 方程式と呼ばれる方程式である。

波動方程式

質点とばねが交互に1列につながった物理系を考える。

n 番目の質点の変位を $u_n(t)$ とおく。質点1つあたりの質量を m 、バネ定数を k とすると、 n 番目の質点の運動方程式は

$$mu''(t) = k(-(u_n - u_{n-1}) + (u_{n+1} - u_n)) \quad \therefore mu''(t) = k(u_{n-1} - 2u_n + u_{n+1})$$

となる。ここで $u_n(t) = u(t, n\Delta x)$ とおくと、テイラー展開より

$$u_{n\pm 1}(t) = u(t, x \pm \Delta x) = u(t, x) \pm \Delta x u_x(t, x) + \frac{1}{2}(\Delta x)^2 u_{xx}(t, x) + \dots$$

となり、これをもとの式に代入すると

$$mu_{tt}(t, x) = k(\Delta x)^2 u_{xx}(t, x)$$

を得る。 $\frac{k(\Delta x)^2}{m} = c > 0$ (一定) とおいて $\Delta x \rightarrow 0$ とすると

$$u_{tt}(t, x) = cu_{xx}(t, x) \quad (1.2.4)$$

という偏微分方程式を得る。これは波動方程式と呼ばれる。

第2章 常微分方程式の初期値問題

2.1 基本定理

Theorem 2.1.1 (Cauchy). 1階微分方程式の初期値問題

$$y'(x) = f(x, y), \quad y(a) = b \quad (2.1.1)$$

において, $x = a, y = b$ の近傍で関数 $f(x, y)$ が連続かつ有界ならば, $x = a$ の近傍において (2.1.1) に解が存在する.

Theorem 2.1.2 (Lipschitz). (2.1.1) において, $x = a, y = b$ の近傍で関数 $f(x, y)$ が i) 連続かつ, ii) ある定数 $L > 0$ が存在して $|f(x, y_1) - f(x, y_2)| < L|y_1 - y_2|$ を満たすならば, $x = a$ の近傍において (2.1.1) に解が一意に存在する.

例 2.1.1.

$$\frac{dy}{dx} = \sqrt{y}, \quad y(0) = 0$$

は Lipschitz 条件を満たしていない. 解は $y = \frac{1}{4}x^2$ の他にも $y = 0$ など無数にある.

2.2 Euler 法

数値解は近似的なものなので真の解と区別するために, 真の解を $y(x)$ と小文字で, 数値解を $Y(x)$ と大文字で書く. また, h を区間幅 (きざみ幅) とし, $x_i = a + hi, y(x_i) = y_i, Y(x_i) = Y_i$ などと書く.

テーラー展開により

$$y(x+h) = y(x) + hf(x, y) + O(h^2)$$

が成り立つ. ただし $O(h)$ はランダウ記号で $\lim_{h \rightarrow 0} \frac{O(h)}{h} < \infty$ という意味である. 従って次のように近似計算できることが分かる.

$$\begin{aligned} Y_0 &= y_0 \\ Y_{i+1} &= Y_i + hf(x_i, Y_i) \end{aligned}$$

オイラー法は簡単だが, 誤差が大きいことが知られている.

2.3 Runge-Kutta 法 (2次)

ルンゲ・クッタ法は2,3,4次のものが有名である。特に4次のものは精度がよく、最も使われている数値計算法である。まずは簡単のため2次のを学ぶ。

$$y(x+h) = y(x) + h\alpha k_1 + h\beta k_2 + O(h^3)$$

ただし

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x, y) \\ k_2 &= f(x+hp, y+hqk_1) \end{aligned}$$

が成り立つように定数 α, β, p, q を決める。2変数のテーラー展開の公式より、

$$\begin{aligned} k_2 &= f(x, y) + hp f_x(x, y) + hq k_1 f_y(x, y) + O(h^2) \\ &= f(x, y) + hp f_x(x, y) + hq f(x, y) f_y(x, y) + O(h^2) \end{aligned}$$

となるので、

$$y(x+h) = y(x) + h(\alpha + \beta)f(x, y) + h^2\beta(pf_x(x, y) + qf(x, y)f_y(x, y)) + O(h^3) \quad (2.3.1)$$

が成り立つようにすれば良い。

一方

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(x) + O(h^3)$$

において、

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

なので、

$$y(x+h) = y(x) + hf(x, y) + \frac{h^2}{2}(f_x(x, y) + f(x, y)f_y(x, y)) + O(h^3) \quad (2.3.2)$$

が成り立つ。

(2.3.1)(2.3.2) を比較して

$$\alpha + \beta = 1, \quad \beta p = \frac{1}{2}, \quad \beta q = \frac{1}{2}$$

を得る. 特に $\alpha = \beta = \frac{1}{2}$, $p = q = 1$ のとき Heun (ホイン) 法ともいう.

Heun 法のアルゴリズムは

$$\begin{aligned} Y_0 &= y_0 \\ Y_{i+1} &= Y_i + \frac{h}{2}f(x_i, Y_i) + \frac{h}{2}f(x_i + h, Y_i + hf(x_i, Y_i)) \end{aligned}$$

で与えられる.

同じことだがこれを

$$\begin{aligned} Y_0 &= y_0 \\ k_1 &= f(x_i, Y_i) \\ k_2 &= f(x_i + h, Y_i + hk_1) \\ Y_{i+1} &= Y_i + \frac{h}{2}(k_1 + k_2) \end{aligned}$$

と書くこともある.

例題

$$y' = 2xy, \quad y(0) = 1$$

に対して, 刻み幅 $h = 0.1$ でオイラー法とホイン法を適用せよ.

2.4 Runge-Kutta 法 (3 次)

$$y(x+h) = y(x) + h\alpha k_1 + h\beta k_2 + \gamma k_3 + O(h^4)$$

ただし

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x, y) \\ k_2 &= f(x + hp, y + hqk_1) \\ k_3 &= f(x + hr, y + hsk_2 + htk_1) \end{aligned}$$

が成り立つように定数 $\alpha, \beta, \gamma, p, q, r, s, t$ を決める. 2変数のテーラー展開の公式より,

$$\begin{aligned} k_2 &= f(x, y) + h(pf_x + qk_1f_y) + \frac{h^2}{2}(p^2f_{xx} + 2pqk_1f_{xy} + q^2k_1^2f_{yy}) + O(h^3) \\ &= f + h(pf_x + qff_y) + \frac{h^2}{2}(p^2f_{xx} + 2pqff_{xy} + q^2f^2f_{yy}) + O(h^3) \\ k_3 &= f(x, y) + h(rf_x + (sk_1 + tk_2)f_y) + \frac{h^2}{2}\{r^2f_{xx} + 2r(sk_2 + tk_1)f_{xy} + (sk_2 + tk_1)^2f_{yy}\} + O(h^3) \\ &= f + h(rf_x + sff_y + tff_y) \\ &\quad + \frac{h^2}{2}\{r^2f_{xx} + 2psf_xf_y + 2qsf_y^2 + 2rsff_{xy} + s^2f^2f_{yy} + 2rtff_{xy} + 2stf^2f_{yy} + t^2f^2f_{yy}\} + O(h^3) \end{aligned}$$

となるので,

$$\begin{aligned} y(x+h) &= y(x) + h(\alpha + \beta + \gamma)f(x, y) + h^2\{(\beta p + \gamma r)f_x + (\beta q + \gamma s + \gamma t)ff_y\} \\ &\quad + \frac{h^3}{2}\{(\beta p^2 + \gamma r^2)f_{xx} + 2(\beta pq + \gamma rs + \gamma rt)ff_{xy} + (\beta q^2 + \gamma s^2 + 2\gamma st + \gamma t^2)f^2f_{yy} \\ &\quad + 2\gamma psf_xf_y + 2\gamma qsf_y^2\} + O(h^4) \end{aligned}$$

が成り立つようにすれば良い.

一方

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(x) + \frac{h^3}{6}y'''(x) + O(h^4)$$

において,

$$\begin{aligned} y'(x) &= f(x, y(x)) \\ y''(x) &= f_x(x, y) + f(x, y)f_y(x, y) \\ y'''(x) &= f_{xx} + 2f_{xy}f + f_{yy}f^2 + f_yf_x + f_y^2f \end{aligned}$$

なので,

$$\begin{aligned} y(x+h) &= y(x) + hf(x, y) + \frac{h^2}{2}(f_x + ff_y) \\ &\quad + \frac{h^3}{6}(f_{xx} + 2ff_{xy} + f^2f_{yy} + f_xf_y + ff_y^2) + O(h^4) \end{aligned}$$

が成り立つ.

$y(x+h)$ 同士を比較して

$$\begin{aligned} \alpha + \beta + \gamma &= 1 \\ \beta p + \gamma r &= \frac{1}{2}, \quad \beta q + \gamma s + \gamma t = \frac{1}{2} \\ \beta p^2 + \gamma r^2 &= \frac{1}{3}, \quad \beta pq + \gamma rs + \gamma rt = \frac{1}{3}, \quad \beta q^2 + \gamma s^2 + 2st\gamma + \gamma t^2 = \frac{1}{3}, \quad \gamma ps = \frac{1}{6}, \quad \gamma qs = \frac{1}{6} \end{aligned}$$

を得る.

Kutta は特に

$$\alpha = \gamma = \frac{1}{6}, \beta = \frac{2}{3}, p = q = \frac{1}{2}, r = 1, s = 2, t = -1$$

と選んだ.

Kutta のアルゴリズムは

$$\begin{aligned} Y_0 &= y_0 \\ k_1 &= f(x_i, Y_i) \\ k_2 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, Y_i + \frac{h}{2}k_1\right) \\ k_3 &= f(x_i + h, Y_i + 2hk_2 - hk_1) \\ Y_{i+1} &= Y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 4k_2 + k_3) \end{aligned}$$

で与えられる.

2.5 Runge-Kutta 法 (4次)

同様にして

$$\begin{aligned} Y_0 &= y_0 \\ k_1 &= f(x_i, Y_i) \\ k_2 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, Y_i + \frac{h}{2}k_1\right) \\ k_3 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, Y_i + \frac{h}{2}k_2\right) \\ k_4 &= f(x_i + h, Y_i + hk_3) \\ Y_{i+1} &= Y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \end{aligned}$$

がさらに精度の良い近似を与えることが分かる (計算は非常にややこしい). これを 4 次の Runge-Kutta 法という.

2.6 高階または連立微分方程式の数値解法

2 階常微分方程式

$$y'' = f(x, y, y')$$

は連立1階常微分方程式

$$\begin{cases} y' = z \\ z' = f(x, y, z) \end{cases}$$

と同値な方程式である.

本節では連立1階常微分方程式の初期値問題

$$\begin{cases} y' = f(x, y, z) \\ z' = g(x, y, z) \\ y(0) = y_0, z(0) = z_0 \end{cases}$$

を考える.

2.6.1 Euler 法

Euler 法のアルゴリズムは

$$\begin{aligned} Y_0 &= y_0, Z_0 = z_0 \\ Y_{i+1} &= Y_i + hf(x_i, Y_i, Z_i) \\ Z_{i+1} &= Y_i + hg(y_i, Y_i, Z_i) \end{aligned}$$

で与えられる.

$$\begin{aligned} y(x+h) &= y(x) + hf(x, y, z) + O(h^2) \\ z(x+h) &= z(x) + hg(x, y, z) + O(h^2) \end{aligned}$$

が成り立つ.

2.6.2 Runge-Kutta 法 (2次)

Heun 法のアルゴリズムは

$$\begin{aligned} Y_0 &= y_0, Z_0 = z_0 \\ k_1 &= f(x_i, Y_i, Z_i) \\ l_1 &= g(x_i, Y_i, Z_i) \\ k_2 &= f(x_i + h, Y_i + hk_1, Z_i + hl_1) \\ l_2 &= g(x_i + h, Y_i + hk_1, Z_i + hl_1) \\ Y_{i+1} &= Y_i + \frac{h}{2}k_1 + \frac{h}{2}k_2 \\ Z_{i+1} &= Z_i + \frac{h}{2}l_1 + \frac{h}{2}l_2 \end{aligned}$$

で与えられる.

$$y(x+h) = y(x) + \frac{h}{2}k_1 + \frac{h}{2}k_2 + O(h^3) \quad (2.6.1)$$

$$z(x+h) = z(x) + \frac{h}{2}l_1 + \frac{h}{2}l_2 + O(h^3) \quad (2.6.2)$$

が成り立つ.

Proof.

$$k_1 = f(x, y, z)$$

$$l_1 = g(x, y, z)$$

$$k_2 = f(x+h, y+hk_1, z+hl_1)$$

$$= f(x, y, z) + hf_x(x, y, z) + hk_1f_y(x, y, z) + hl_1f_z(x, y, z) + O(h^2)$$

$$= f(x, y, z) + hf_x(x, y, z) + hf(x, y, z)f_y(x, y, z) + hg(x, y, z)f_z(x, y, z) + O(h^2)$$

を (2.6.1) の右辺に代入して

$$(2.6.1) \text{ の右辺} = y + hf + \frac{h^2}{2}(f_x + f \cdot f_y + g \cdot f_z) + O(h^3)$$

一方,

$$(2.6.1) \text{ の左辺} = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2}y''(x) + O(h^3)$$

$$= y(x) + hf + \frac{h^2}{2}(f_x + f_y \cdot y' + f_z \cdot z') + O(h^3)$$

$$= y(x) + hf + \frac{h^2}{2}(f_x + f \cdot f_y + g \cdot f_z) + O(h^3)$$

よって (2.6.1) は成り立つ. (2.6.2) も同様.

□

2.6.3 Runge-Kutta 法 (4次)

Runge-Kutta 法 (4次) のアルゴリズムは

$$\begin{aligned}
 Y_0 &= y_0, \quad Z_0 = z_0 \\
 k_1 &= f(x_i, Y_i, Z_i) \\
 l_1 &= g(x_i, Y_i, Z_i) \\
 k_2 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, Y_i + \frac{h}{2}k_1, Z_i + \frac{h}{2}l_1\right) \\
 l_2 &= g\left(x_i + \frac{h}{2}, Y_i + \frac{h}{2}k_1, Z_i + \frac{h}{2}l_1\right) \\
 k_3 &= f\left(x_i + \frac{h}{2}, Y_i + \frac{h}{2}k_2, Z_i + \frac{h}{2}l_2\right) \\
 l_3 &= g\left(x_i + \frac{h}{2}, Y_i + \frac{h}{2}k_2, Z_i + \frac{h}{2}l_2\right) \\
 k_4 &= f(x_i + h, Y_i + hk_3, Z_i + hl_3) \\
 l_4 &= g(x_i + h, Y_i + hk_3, Z_i + hl_3) \\
 Y_{i+1} &= Y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\
 Z_{i+1} &= Z_i + \frac{h}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4)
 \end{aligned}$$

で与えられる。このように、連立系でも数値計算の方法はほとんど変わらない。

例題

$a, b, c, d > 0$ に対し

$$\begin{aligned}
 \frac{dx}{dt} &= x(a - by) \\
 \frac{dy}{dt} &= -y(c - dx)
 \end{aligned}$$

を Lotka-Volterra の方程式という。 x が被捕食者、 y が捕食者のモデルである。

$$c \log x - dx + a \log y - by = k \quad (\text{定数})$$

という保存量がある。解軌道 $(x(t), y(t))$ はこの軌道上を周回する。このことを数値計算により確かめよ。

例題 FitzHugh-南雲方程式：

$$\frac{du}{dt} = c(-v + u - \frac{u^3}{3} + I(t)) \quad (2.6.3)$$

$$\frac{dv}{dt} = u - bv + a \quad (2.6.4)$$

ただし $I(t)$ は

$$I(t) = \begin{cases} I_0 & (0 \leq (t \bmod T) \leq w \text{ のとき}) \\ 0 & (\text{それ以外}) \end{cases}$$

で与えられる周期的なパルスとし, $a = 0.7, b = 0.8, c = 10$ とする. 振幅 I_0 , パルスの波長 w , 周期 T をいろいろ変えて, 微分方程式の解の振る舞いを調べよ.

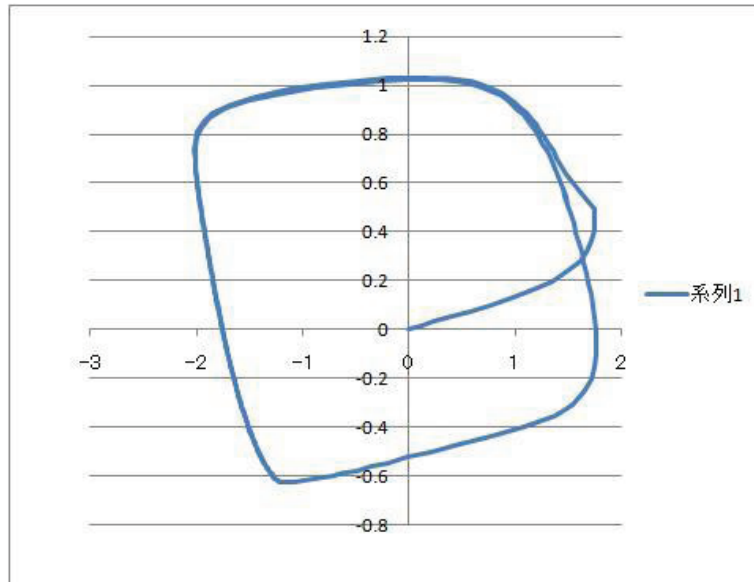


図 2.1: $I_0 = 0.5, T = 3, w = 0.3$

2.6.4 3次元

ローレンツ方程式

$$\begin{aligned} \frac{dx(t)}{dt} &= p(-x + y) \\ \frac{dy(t)}{dt} &= -xz + rx - y \\ \frac{dz(t)}{dt} &= xy - bz \end{aligned}$$

(p, r, b は定数) は大気変動モデルの研究の中から, 1962年に E. N. Lorenz が発見した方程式である. Lorenz は

$$p = 10, r = 28, b = \frac{8}{3}$$

とした。ローレンツ方程式の解の軌道は複雑であり、初期値に敏感に依存する。このことは「バラフライ効果」（すなわち、蝶のはばたき程度の小さな攪乱が遠くの場所の気象に影響を与えるかもしれないということ）の語源となった。

ローレンツ方程式は

$$\begin{aligned}\frac{dx(t)}{dt} &= f(t, x, y, z) \\ \frac{dy(t)}{dt} &= g(t, x, y, z) \\ \frac{dz(t)}{dt} &= h(t, x, y, z)\end{aligned}$$

という形の1階3連立の常微分方程式なので、Runge-Kutta法(4次)のアルゴリズムは

$$\begin{aligned}X_0 &= x_0, Y_0 = y_0, Z_0 = z_0 \\ k_1 &= f(t_i, X_i, Y_i, Z_i) \\ l_1 &= g(t_i, X_i, Y_i, Z_i) \\ m_1 &= h(t_i, X_i, Y_i, Z_i) \\ k_2 &= f\left(t_i + \frac{h}{2}, X_i + \frac{h}{2}k_1, Y_i + \frac{h}{2}l_1, Z_i + \frac{h}{2}m_1\right) \\ l_2 &= g\left(t_i + \frac{h}{2}, X_i + \frac{h}{2}k_1, Y_i + \frac{h}{2}l_1, Z_i + \frac{h}{2}m_1\right) \\ m_2 &= h\left(t_i + \frac{h}{2}, X_i + \frac{h}{2}k_1, Y_i + \frac{h}{2}l_1, Z_i + \frac{h}{2}m_1\right) \\ k_3 &= f\left(t_i + \frac{h}{2}, X_i + \frac{h}{2}k_2, Y_i + \frac{h}{2}l_2, Z_i + \frac{h}{2}m_2\right) \\ l_3 &= g\left(t_i + \frac{h}{2}, X_i + \frac{h}{2}k_2, Y_i + \frac{h}{2}l_2, Z_i + \frac{h}{2}m_2\right) \\ m_3 &= h\left(t_i + \frac{h}{2}, X_i + \frac{h}{2}k_2, Y_i + \frac{h}{2}l_2, Z_i + \frac{h}{2}m_2\right) \\ k_4 &= f(t_i + h, X_i + hk_3, Y_i + hl_3, Z_i + hm_3) \\ l_4 &= g(t_i + h, X_i + hk_3, Y_i + hl_3, Z_i + hm_3) \\ m_4 &= h(t_i + h, X_i + hk_3, Y_i + hl_3, Z_i + hm_3) \\ X_{i+1} &= X_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ Y_{i+1} &= Y_i + \frac{h}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4) \\ Z_{i+1} &= Z_i + \frac{h}{6}(m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4)\end{aligned}$$

で与えられる。

3次元の平面への投影図

数値計算により得られた結果を与えられた方向で2次元に投影して、可視化することを考える。そのためには点 $\mathbf{x} = (x, y, z)$ を $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ と直交する平面に正射影した点を $\mathbf{x}' = (x', y', z')$ とするとき、 \mathbf{x}' を平面内の直交座標系で表示する必要がある。

中心を原点 O 、北極を z 軸の正の方向、 x 軸を赤道のある一点とする半径 R の球面において、緯度 (latitude) を φ 、経度 (longitude) を θ となる点は、

$$(n_1, n_2, n_3) = R(\cos \varphi \cos \theta, \cos \varphi \sin \theta, \sin \varphi) \quad (2.6.5)$$

と表される。 \mathbf{n} を法線とし、原点を含む平面 α は

$$\alpha: \cos \varphi \cos \theta x + \cos \varphi \sin \theta y + \sin \varphi z = 0.$$

α は直交する2つの単位ベクトル

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_1 &= (-\sin \theta, \cos \theta, 0) \\ \mathbf{p}_2 &= (-\sin \varphi \cos \theta, -\sin \varphi \sin \theta, \cos \varphi) \end{aligned}$$

によって張られる ($\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ の取り方には任意性がある)。作り方より

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{p}_1 = \mathbf{n} \cdot \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 = 0, \quad \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_2 \cdot \mathbf{p}_2 = 1,$$

が成り立つ。

さて、点 \mathbf{x} を \mathbf{n} により平面 α に正射影すると、

$$\mathbf{x}' = \mathbf{x} - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{n})\mathbf{n}$$

となるが、 \mathbf{x}' は平面 α 内のベクトルなので、

$$\mathbf{x}' = q_1 \mathbf{p}_1 + q_2 \mathbf{p}_2 \quad (q_1, q_2 \text{ は実数}) \quad (2.6.6)$$

と表示できる。この (q_1, q_2) が求める座標である。 q_1, q_2 を計算しよう。(2.6.6) の両辺に $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ をかけると、

$$\mathbf{x}' \cdot \mathbf{p}_1 = q_1, \quad \mathbf{x}' \cdot \mathbf{p}_2 = q_2$$

となるので、

$$\begin{aligned} q_1 &= \mathbf{x}' \cdot \mathbf{p}_1 \\ &= \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}_1 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{n} \cdot \mathbf{p}_1) \\ &= \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}_1 \\ q_2 &= \mathbf{x}' \cdot \mathbf{p}_2 \\ &= \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}_2 - (\mathbf{x} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{n} \cdot \mathbf{p}_2) \\ &= \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}_2 \end{aligned}$$

を得る.

以上をまとめると, 射影方向 $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ に対し,

$$R = \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}$$

$$\varphi = \arcsin\left(\frac{n_3}{R}\right)$$

$$\theta = \begin{cases} \arccos\left(\frac{n_1}{R \cos \varphi}\right) & (n_2 \geq 0 \text{ のとき}) \\ -\arccos\left(\frac{n_1}{R \cos \varphi}\right) & (n_2 < 0 \text{ のとき}) \end{cases}$$

とおくとき, 点 $\mathbf{x} = (x, y, z)$ を \mathbf{n} と直交する平面に正射影した点の,

$$\mathbf{p}_1 = (-\sin \theta, \cos \theta, 0)$$

$$\mathbf{p}_2 = (-\sin \varphi \cos \theta, -\sin \varphi \sin \theta, \cos \varphi)$$

により張られる座標 (q_1, q_2) は

$$q_1 = \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}_1$$

$$q_2 = \mathbf{x} \cdot \mathbf{p}_2$$

により与えられるということが分かった.

このことを用いた描画機能は, 例えば gnuplot には備わっているが, Excel には標準ではないようである. 以下の図は Excel で簡単な実装を行ったものである.

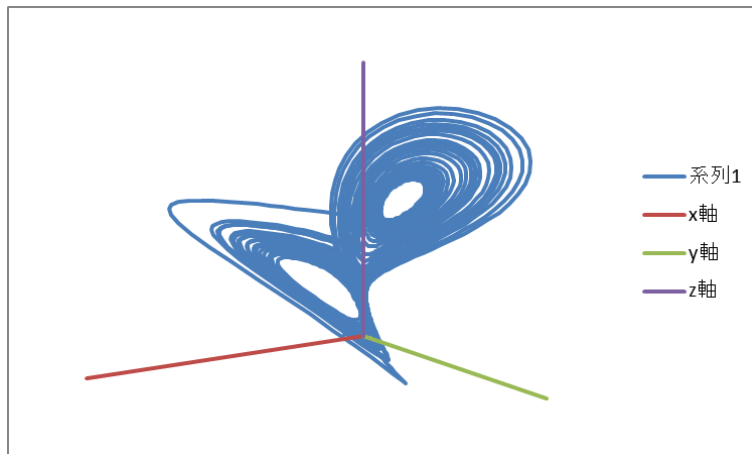


図 2.2: $x_0 = 2.1, y_0 = 1.1, z_0 = 3, \mathbf{n} = (2, 3, 4)$

第3章 連立方程式

3.1 連立1次方程式の反復解法

連立1次方程式 $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ に対して，適当な初期ベクトル \mathbf{x}^0 から出発して，ベクトル列 $\{\mathbf{x}^k\}$ を作り，真の解 \mathbf{x} に収束させる解法を一般に反復法という．通常， \mathbf{x}^k と \mathbf{x}^{k+1} が十分近くなったら計算を終了する．

Jacobi 法

\mathbf{x}^k から \mathbf{x}^{k+1} を

$$\begin{cases} a_{11}x_1^{k+1} + a_{12}x_2^k + \cdots + a_{1n}x_n^k & = b_1 \\ a_{21}x_1^k + a_{22}x_2^{k+1} + \cdots + a_{2n}x_n^k & = b_2 \\ & \vdots \\ a_{n1}x_1^k + a_{n2}x_2^k + \cdots + a_{nn}x_n^{k+1} & = b_n \end{cases}$$

によって計算する方法． A が狭義優対角行列：

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

ならば Jacobi 法は真の解に収束することが知られている．

Gauss-Seidel 法

\mathbf{x}^k から \mathbf{x}^{k+1} を

$$\begin{cases} a_{11}x_1^{k+1} + a_{12}x_2^k + \cdots + a_{1n}x_n^k & = b_1 \\ a_{21}x_1^{k+1} + a_{22}x_2^{k+1} + \cdots + a_{2n}x_n^k & = b_2 \\ & \vdots \\ a_{n1}x_1^{k+1} + a_{n2}x_2^{k+1} + \cdots + a_{nn}x_n^{k+1} & = b_n \end{cases}$$

によって計算する方法．Jacobi 法と同様に A が狭義優対角行列ならば真の解に収束することが知られている．

SOR 緩和法

\mathbf{x}^k から \mathbf{y}^{k+1} を Gauss-Seidel 法と同じ式：

$$\begin{cases} a_{11}y_1^{k+1} + a_{12}x_2^k + \cdots + a_{1n}x_n^k & = b_1 \\ a_{21}y_1^{k+1} + a_{22}y_2^{k+1} + \cdots + a_{2n}x_n^k & = b_2 \\ & \vdots \\ a_{n1}y_1^{k+1} + a_{n2}y_2^{k+1} + \cdots + a_{nn}y_n^{k+1} & = b_n \end{cases}$$

で求め、 \mathbf{x}^{k+1} を

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \omega(\mathbf{y}^{k+1} - \mathbf{x}^k)$$

によって計算する方法。 ω ($0 < \omega < 2$) を緩和係数といい、 $\omega = 1.9$ くらいにとることが多い (ようである)。

3.2 連立非線形方程式

連立方程式

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

に対する反復法を考える。

1変数の Newton 法

$$f(x) = 0$$

を考える。 x^0 を適当にとり、 x^k から x^{k+1} を次のように定める方法を Newton 法という。1次までのテーラー展開を考えると、

$$f(x) \simeq f(x^k) + f'(x^k)(x - x^k) = 0$$

を得る。これを利用して x^k から x^{k+1} を

$$f(x^k) + f'(x^k)(x^{k+1} - x^k) = 0$$

すなわち

$$x^{k+1} = x^k - \frac{f(x^k)}{f'(x^k)}$$

によって定める。

多変数の Newton 法

$f_i(\mathbf{x})$ ($i = 1, 2, \dots, n$) を縦に並べたベクトルを $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ とかく。

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0$$

を考える。 \mathbf{x}^0 を適当にとり、 \mathbf{x}^k から \mathbf{x}^{k+1} を次のように定める方法を Newton 法という。 1 次までのテーラー展開を考えると、

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) \simeq \mathbf{f}(\mathbf{x}^k) + J(\mathbf{x}^k)(\mathbf{x} - \mathbf{x}^k) = 0$$

ただし

$$J(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\mathbf{x}) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(\mathbf{x}) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(\mathbf{x}) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(\mathbf{x}) & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(\mathbf{x}) & \frac{\partial f_n}{\partial x_2}(\mathbf{x}) & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}$$

を得る。 $J(\mathbf{x})$ は Jacobi 行列と呼ばれる。 x^k から x^{k+1} を連立 1 次方程式

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}^k) + J(\mathbf{x}^k)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k) = 0,$$

すなわち、

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \left(J(\mathbf{x}^k) \right)^{-1} \mathbf{f}(\mathbf{x}^k)$$

によって定める。これを成分で書くと

$$\begin{bmatrix} x_1^{k+1} \\ x_2^{k+1} \\ \vdots \\ x_n^{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1^k \\ x_2^k \\ \vdots \\ x_n^k \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1}(\mathbf{x}^k) & \frac{\partial f_1}{\partial x_2}(\mathbf{x}^k) & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n}(\mathbf{x}^k) \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1}(\mathbf{x}^k) & \frac{\partial f_2}{\partial x_2}(\mathbf{x}^k) & \cdots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n}(\mathbf{x}^k) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1}(\mathbf{x}^k) & \frac{\partial f_n}{\partial x_2}(\mathbf{x}^k) & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n}(\mathbf{x}^k) \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} f_1(\mathbf{x}^k) \\ f_2(\mathbf{x}^k) \\ \vdots \\ f_n(\mathbf{x}^k) \end{bmatrix}$$

となる。

3.3 固有値・固有ベクトル

$$A\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$$

をみたす 0 でないベクトル \mathbf{x} が存在するとき、 λ を固有値、 \mathbf{x} を固有ベクトルと言った。 固有値は特性方程式 $|A - \lambda I| = 0$ を解けば求まるがこの数値計算は非常に精度が悪い。

累乘法

最大固有値 λ が実数と分かっているとき、 λ および対応する固有ベクトルの一つを次のように求められる。 $\mathbf{x}^{k+1} = A\mathbf{x}^k$ とすると $\{\mathbf{x}^k\}$ は固有値 λ の固有ベクトルに収束する。正確には発散を考慮して、

$$\mathbf{y}^{k+1} = A\mathbf{x}^k, \quad \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{y}^{k+1}/y_1^{k+1}$$

($y_1^{k+1} = 0$ のときは適当な y_i^{k+1} に代える。) と定めると、固有値 λ の固有ベクトル $\mathbf{x}^* = \lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{x}^k$ に収束する。固有値は $A\mathbf{x}^* = \lambda\mathbf{x}^*$ より簡単に求まる。

QR法

n 次実行列 A に対し、直交行列 Q と上三角行列 R により $A = QR$ と分解できることが知られている (QR 分解)。

これを用いて行列 A_1, A_2, A_3, \dots を

$$\begin{aligned} A_k &= Q_k R_k \\ A_{k+1} &= R_k Q_k \end{aligned}$$

と定める。このとき A_k と A の固有値は等しく、また (適当な仮定の下で) A_k の対角成分は固有値に収束することが知られている。

第4章 差分法

4.1 差分

$$\begin{aligned} f(x+h) &= f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x) + O(h^5) \\ f(x-h) &= f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{6}f^{(3)}(x) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x) + O(h^5) \end{aligned}$$

より,

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + O(h^2) \quad (4.1.1)$$

$$\frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} = f''(x) + O(h^2) \quad (4.1.2)$$

が成り立つ。これらを中心差分という。

一方

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) + O(h) \quad (4.1.3)$$

を前進差分

$$\frac{f(x) - f(x-h)}{h} = f'(x) + O(h) \quad (4.1.4)$$

後退差分という。

偏微分に関しても

$$\frac{f(x+h, y) - f(x-h, y)}{2h} \doteq f_x(x, y) \quad (4.1.5)$$

$$\frac{f(x+h, y) - 2f(x, y) + f(x-h, y)}{h^2} \doteq f_{xx}(x, y) \quad (4.1.6)$$

$$\frac{f(x+h, y+k) - f(x+h, y) - f(x, y+k) + f(x, y)}{hk} \doteq f_{xy}(x, y) \quad (4.1.7)$$

などと近似できる。

まとめ

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2) \quad (4.1.8)$$

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2) \quad (4.1.9)$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h) \quad (\text{前進差分}) \quad (4.1.10)$$

$$f'(x) = \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + O(h) \quad (\text{後退差分}) \quad (4.1.11)$$

が成り立つ.

4.2 常微分方程式の境界値問題への応用

2 階 ODE の境界値問題

$$y''(x) = f(x, y, y'), \quad a < x < b \quad (4.2.1)$$

$$y(a) = \alpha, y(b) = \beta \quad (4.2.2)$$

を考える.

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} + O(h^2)$$

$$y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + O(h^2)$$

を代入すると,

$$\begin{aligned} \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + O(h^2) &= f(x, y, \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h}) + O(h^2) \\ &= f(x, y, \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h}) + O(h^2) f_z(x, y, \zeta) \\ &\quad (\zeta = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h}, \\ &\quad f_z(z+k) = f_z(z)k + O(k^2) \text{ を用いた}) \end{aligned}$$

となる. よって,

$$-\frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + f(x, y, \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h}) = O(h^2)$$

が成立する. $O(h^2)$ を無視することによって得られる n 元非線形連立方程式

$$-\frac{Y_{j+1} - 2Y_j + Y_{j-1}}{h^2} + f(x_j, Y_j, \frac{Y_{j+1} - Y_{j-1}}{2h}) = 0 \quad (1 \leq j \leq n) \quad (4.2.3)$$

$$Y_0 = \alpha, Y_{n+1} = \beta \quad (4.2.4)$$

を差分方程式という.

例 1 線形 2 点境界値問題 :

$$\begin{aligned} y'' &= p(x)y' + q(x)y + r(x) \\ y(a) &= \alpha, \quad y(b) = \beta \end{aligned}$$

に対して, $h = \frac{b-a}{n+1}$, $x_j = a + hj$ とおくと, 差分方程式は

$$\begin{aligned} &-\frac{Y_{j+1} - 2Y_j + Y_{j-1}}{h^2} + p(x_j)\frac{Y_{j+1} - Y_{j-1}}{2h} + q(x_j)Y_j + r(x_j) = 0 \\ \Leftrightarrow &(-1 - \frac{1}{2}hp(x_j))Y_{j-1} + (2 + h^2q(x_j))Y_j + (-1 + \frac{1}{2}hp(x_j))Y_{j+1} = -h^2r(x_j) \end{aligned}$$

($j = 1, 2, \dots, n$) となる. ただし $j = 1, n$ のときは

$$\begin{aligned} (2 + h^2q(x_1))Y_1 + (-1 + \frac{1}{2}hp(x_1))Y_2 &= -h^2r(x_1) + (1 + \frac{1}{2}hp(x_1))\alpha \\ (-1 - \frac{1}{2}hp(x_n))Y_{n-1} + (2 + h^2q(x_n))Y_n &= -h^2r(x_n) + (1 - \frac{1}{2}hp(x_n))\beta \end{aligned}$$

である. よって n 元線形連立方程式

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} 2 + h^2q(x_1) & -1 + \frac{1}{2}hp(x_1) & & & \\ -1 - \frac{1}{2}hp(x_2) & 2 + h^2q(x_2) & -1 + \frac{1}{2}hp(x_2) & & \\ & \dots & & & \\ & & & -1 - \frac{1}{2}hp(x_n) & 2 + h^2q(x_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix} \\ &= -h^2 \begin{bmatrix} r(x_1) \\ r(x_2) \\ \vdots \\ r(x_n) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (1 + \frac{1}{2}hp(x_1))\alpha \\ 0 \\ \vdots \\ (1 - \frac{1}{2}hp(x_n))\beta \end{bmatrix} \end{aligned}$$

を得る.

例えば

$$\begin{aligned} y'' &= -xy' + 5y - 20x^3 - 4x \\ y(0) &= 0, \quad y(1) = 0 \end{aligned}$$

(真の解は $y = x - x^5$) なら差分方程式は

$$\begin{bmatrix} 2 + 5h^2 & -1 - \frac{1}{2}hx_1 & & & \\ -1 + \frac{1}{2}hx_2 & 2 + 5h^2 & -1 - \frac{1}{2}hx_2 & & \\ & \dots & & & \\ & & & -1 + \frac{1}{2}hx_n & 2 + 5h^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix} = h^2 \begin{bmatrix} 20x_1^3 + 4x_1 \\ 20x_2^3 + 4x_2 \\ \vdots \\ 20x_n^3 + 4x_n \end{bmatrix}$$

例 2 (Neumann 条件の処理)

線形 2 点境界値問題 :

$$\begin{aligned} y'' &= p(x)y' + q(x)y + r(x) \\ y'(a) &= \alpha, \quad y(b) = \beta \end{aligned}$$

のように境界での微分の値が与えられているものを Neumann 条件という. この場合 $x_{-1} = a - h$ を導入して

$$\frac{Y_1 - Y_{-1}}{2h} = \alpha \iff Y_{-1} = Y_1 - 2h\alpha$$

と近似する. 差分方程式は基本的に上の場合と同じで

$$\left(-1 - \frac{1}{2}hp(x_j)\right)Y_{j-1} + (2 + h^2q(x_j))Y_j + \left(-1 + \frac{1}{2}hp(x_j)\right)Y_{j+1} = -h^2r(x_j)$$

($j = 0, 1, 2, \dots, n$) となるが, $j = 0$ のときは

$$\left(-1 - \frac{1}{2}hp(x_0)\right)Y_{-1} + (2 + h^2q(x_0))Y_0 + \left(-1 + \frac{1}{2}hp(x_0)\right)Y_1 = -h^2r(x_0)$$

となり, 上の近似式を用いると

$$\begin{aligned} \left(-1 - \frac{1}{2}hp(x_0)\right)(Y_1 - 2h\alpha) + (2 + h^2q(x_0))Y_0 + \left(-1 + \frac{1}{2}hp(x_0)\right)Y_1 &= -h^2r(x_0) \\ \iff (2 + h^2q(x_0))Y_0 - 2Y_1 &= -h^2r(x_0) - (2hh^2p(x_0))\alpha \end{aligned}$$

を得る. よって $n + 1$ 元線形連立方程式

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} 2 + h^2q(a) & -2 & & & \\ -1 - \frac{1}{2}hp(x_1) & 2 + h^2q(x_1) & -1 + \frac{1}{2}hp(x_1) & & \\ & \dots & & & \\ & & & -1 - \frac{1}{2}hp(x_n) & 2 + h^2q(x_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Y_0 \\ Y_1 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix} \\ &= -h^2 \begin{bmatrix} r(x_0) \\ r(x_1) \\ \vdots \\ r(x_n) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -(2h + h^2p(x_0))\alpha \\ 0 \\ \vdots \\ (1 - \frac{1}{2}hp(x_n))\beta \end{bmatrix} \end{aligned}$$

を得る.

4.3 偏微分方程式への応用

例として Laplace 方程式と呼ばれる次の偏微分方程式を考える。

$$\begin{cases} u_{xx} + u_{yy} = 0 & ((x, y) \in D) \\ u(x, y) = f(x, y) & ((x, y) \in \partial D) \end{cases}$$

ただし $u = u(x, y)$ は未知関数であり, D は xy 平面上の領域, ∂D は D の境界, $f(x, y)$ は ∂D 上で与えられた関数とする。

x, y 座標についての差分間隔をそれぞれ h, k とすると, $u(x, y)$ の 2 階中心差分を用いて

$$\begin{aligned} u_{xx}(x, y) &\doteq \frac{u(x+h, y) - 2u(x, y) + u(x-h, y)}{h^2} \\ u_{yy}(x, y) &\doteq \frac{u(x, y+k) - 2u(x, y) + u(x, y-k)}{k^2} \end{aligned}$$

と近似できる。よって差分方程式および境界条件は

$$\frac{U_{i-1,j} - 2U_{i,j} + U_{i+1,j}}{h^2} + \frac{U_{i,j-1} - 2U_{i,j} + U_{i,j+1}}{k^2} = 0 \quad ((x_i, y_i) \text{ が } D \text{ の内部のとき})$$

$$U_{i,j} = f(x_i, y_j) \quad ((x_i, y_j) \text{ が } D \text{ の境界のとき})$$

となる。 $((x_i, y_j)$ が境界上にとれないときは, さらに近似する必要がある.)

今, D として正方形 $D = [0, \pi] \times [0, \pi]$ をとり, 境界条件を

$$f(x, 0) = f(x, \pi) = 0, \quad f(0, y) = \sin y, \quad f(\pi, y) = 2 \sin y$$

とする。 $h = k = \frac{\pi}{n}$ とすると, 差分方程式および境界条件は

$$U_{i-1,j} + U_{i+1,j} + U_{i,j-1} + U_{i,j+1} - 4U_{i,j} = 0 \quad (i, j = 1, 2, \dots, n-1)$$

$$U_{i,0} = U_{i,n} = 0, \quad U_{0,j} = \sin \frac{\pi j}{n}, \quad U_{n,j} = 2 \sin \frac{\pi j}{n}$$

となる。これを行列で表わすと, $(n-1)^2$ 次正方行列 A を用いて

$$A\mathbf{u} = \mathbf{b}$$

ただし

$$\begin{aligned}
 u &= (U_{1,1}, U_{1,2}, \dots, U_{1,n-1}, U_{2,1}, U_{2,2}, \dots, U_{n-1,n-1})^t; \\
 A &= \begin{pmatrix} B & I & & \\ I & B & I & \\ & & \ddots & \\ & & & I & B \end{pmatrix} \\
 B &= \begin{pmatrix} -4 & 1 & & \\ 1 & -4 & 1 & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 & -4 \end{pmatrix}, \quad I = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}; \\
 \mathbf{b} &= -(U_{1,0} + U_{0,1}, U_{0,2}, \dots, U_{0,n-1} + U_{0,n}, U_{2,0}, 0, \dots, U_{n,n-1} + U_{n-1,n})^t
 \end{aligned}$$

となる.

4.3.1 Laplace 方程式の導出及び解析

流体からの導出

2次元流体の速度場 $(u(x, y), v(x, y))$ があり, 渦なし:

$$v_x - u_y = 0$$

かつ非圧縮:

$$u_x + v_y = 0$$

を満たすとする. このとき, 第1の式から速度ポテンシャル ϕ が存在して

$$\phi_x = u, \quad \phi_y = v$$

となり, 第2の式から流れの関数 ψ が存在して

$$\psi_x = -v, \quad \psi_y = u$$

がなりたつ. また ϕ, ψ はともにラプラス方程式

$$\Delta\phi = 0, \quad \Delta\psi = 0$$

を満たす.

境界が円の場合の解析解

Ω を原点を中心とする半径 r の円とする.

$$\Delta\phi(x, y) = 0 \text{ in } \Omega, \quad \phi(x, y) = w(x, y) \text{ on } \partial\Omega$$

を考える. 上記の関係式を使うことにより ϕ に対して, u, v, ψ が定まる.

ϕ, ψ は Cauchy-Riemann の関係式:

$$\phi_x = \psi_y, \quad \phi_y = -\psi_x$$

を満たすので, 複素関数

$$f(z) = f(x + iy) = \phi(x, y) + i\psi(x, y)$$

は複素微分可能であり, Cauchy の積分公式により

$$f(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{f(\zeta)}{\zeta - z} d\zeta$$

が成り立つ. $\phi(x, y)$ はこの実部になる. 極座標を用いて $z = r_0 e^{i\theta_0}$, $\zeta = r e^{i\theta}$ と書くと,

$$f(z) = \frac{r^2 - r_0^2}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\phi(r, \theta) + i\psi(r, \theta)}{r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos(\theta - \theta_0)} d\theta$$

となり, 実部をとると,

$$\phi(r_0, \theta_0) = \frac{r^2 - r_0^2}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{w(r, \theta)}{r^2 + r_0^2 - 2rr_0 \cos(\theta - \theta_0)} d\theta$$

を得る. (**Poisson** の公式)

非線形連立常微分方程式

例として Lotka-Vortella 方程式の境界値問題

$$\begin{aligned}y'(x) &= y(a - bz) \\z'(x) &= -z(c - dy) \\y(a) &= \alpha, \quad y(b) = \beta\end{aligned}$$

($a, c, d > 0$ は定数) を考える. 区間 $a \leq x \leq b$ を n 等分し, $h = \frac{b-a}{n}$, $x_i = a + hi$ とおく. さらに近似解を $Y_i = Y(x_i)$, $Z_i = Z(x_i)$ ($i = 0, 1, \dots, n$) と書く.

境界条件より,

$$Y_0 = \alpha, \quad Y_n = \beta$$

$1 \leq i \leq n-1$ のとき, 中心差分により

$$\begin{aligned}\frac{Y_{i+1} - Y_{i-1}}{2h} &= Y_i(a - bZ_i) \\ \frac{Z_{i+1} - Z_{i-1}}{2h} &= -Z_i(c - dY_i)\end{aligned}$$

また境界においては $z'(x)$ を前進差分および後退差分で近似すると,

$$\begin{aligned}\frac{Z_1 - Z_0}{h} &= -Z_0(c - dY_0) \\ \frac{Z_n - Z_{n-1}}{h} &= -Z_n(c - dY_n)\end{aligned}$$

以上により $2n+2$ 個の変数に関する $2n+2$ 連立非線形方程式を得た.

これに対するニュートン法は以下のようなになる.

ベクトル

$$Y = (Y_0, Y_1, \dots, Y_n, Z_0, Z_1, \dots, Z_n)^T \quad (T \text{ は転置})$$

Y を次のように更新する.

$$Y := Y + J^{-1}F$$

第5章 有限要素法

5.1 2階 ODE

以下では,

$$\begin{aligned} y'' + q(x)y &= f(x) \\ y(a) &= \alpha, \quad y(b) = \beta \end{aligned}$$

の近似解を有限要素法 (finite element method) により, $y(x) = \sum_{j=0}^n y_j \varphi_j(x)$ (y_j は定数) の形で求める. 有限要素法は解を有限個の簡単な関数の和の形で表現する. 有限要素法の公式を求めるには, 微分方程式を積分方程式に直してから変形する.

1) $[a, b]$ を $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$ と分割.

2)

$$\varphi_i(x) = \begin{cases} \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} & x \in [x_{i-1}, x_i] \\ \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} & x \in [x_i, x_{i+1}] \\ 0 & \text{それ以外, または区間外} \end{cases}$$

とおく.

3) $v(x)$ を $v(a) = v(b) = 0$ を満たす 1 階微分可能な関数とする (このような関数をテスト関数という). 部分積分を用いて

$$\begin{aligned} 0 &= \int_a^b (y''(x) + q(x)y(x) - f(x))v(x)dx \\ &= \int_a^b (-y'(x)v'(x) + q(x)y(x)v(x) - f(x)v(x))dx \end{aligned}$$

を得る. ここで $y(x) = \sum_{j=0}^n y_j \varphi_j(x)$, $v(x) = \varphi_i(x)$ ($i = 1, 2, \dots, n-1$) とおくと,

$$\begin{aligned} 0 &= \int_a^b \left\{ -\sum_{j=0}^n y_j \varphi_j'(x) \varphi_i'(x) + q(x) \sum_{j=0}^n y_j \varphi_j(x) \varphi_i(x) - f(x) \varphi_i(x) \right\} dx \\ &= \sum_{j=0}^n y_j \int_a^b \{ -\varphi_i'(x) \varphi_j'(x) + q(x) \varphi_i(x) \varphi_j(x) \} dx - \int_a^b f(x) \varphi_i(x) dx \end{aligned}$$

4) よって

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \int_a^b \{ -\varphi_i'(x) \varphi_j'(x) + q(x) \varphi_i(x) \varphi_j(x) \} dx \\ f_i &= \int_a^b f(x) \varphi_i(x) dx \end{aligned}$$

とおくと, $n-1$ 元連立方程式

$$\sum_{j=0}^n a_{ij} y_j = f_i \quad (i = 1, 2, \dots, n-1) \quad (5.1.1)$$

を得る. ただし境界条件より, $y_0 = \alpha, y_n = \beta$ である. これから y_j が定まり, $y(x) = \sum_{j=0}^n y_j \varphi_j(x)$ が近似解となる.

例 5.1.1. $u'' - u = -5 \sin \pi x$ ただし $u(0) = u(1) = 0$ の場合.
きざみ幅を $h = \frac{1}{n}$ とする.

$$a_{ij} = \int_0^1 \{ -\varphi_i'(x) \varphi_j'(x) - \varphi_i(x) \varphi_j(x) \} dx$$

は $1 \leq i \leq n-1$ に対して,

$$\begin{aligned} a_{ii} &= \int_{-h}^h \left(-\frac{1}{h^2} - \frac{x^2}{h^2} \right) dx = \left[-\frac{x}{h^2} - \frac{x^3}{3h^2} \right]_{-h}^h \\ &= -\frac{2}{h} - \frac{2h}{3} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a_{i,i\pm 1} = a_{i\pm 1,i} &= \int_0^h \left(\frac{1}{h^2} - \frac{x}{h} \cdot \left(1 - \frac{x}{h} \right) \right) dx = \left[\frac{x}{h^2} - \frac{x^2}{2h} + \frac{x^3}{3h^2} \right]_0^h \\ &= \frac{1}{h} - \frac{h}{2} + \frac{h}{3} = \frac{1}{h} - \frac{h}{6} \end{aligned}$$

となり,

$$f_i = \int_0^1 f(x)\varphi_i(x)dx$$

は $f(x)$ を $f(x_{i-1}), f(x_i), f(x_{i+1})$ のみ用いて台形で近似して計算すると,

$$\begin{aligned} f_i &= \int_{-h}^0 \left(\frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h}x + f(x_i) \right) \left(\frac{x}{h} + 1 \right) dx \\ &\quad + \int_0^h \left(\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h}x + f(x_i) \right) \left(-\frac{x}{h} + 1 \right) dx \\ &= \left[\frac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{h} \frac{x^3}{3h} + (2f(x_i) - f(x_{i-1})) \frac{x^2}{2h} + f(x_i)x \right]_{-h}^0 \\ &\quad + \left[\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} \frac{x^3}{3h} + (f(x_{i+1}) - 2f(x_i)) \frac{x^2}{2h} + f(x_i)x \right]_0^h \\ &= (f(x_i) - f(x_{i-1})) \frac{h}{3} - (2f(x_i) - f(x_{i-1})) \frac{h}{2} + f(x_i)h \\ &\quad - (f(x_{i+1}) - f(x_i)) \frac{h}{3} + (f(x_{i+1}) - 2f(x_i)) \frac{h}{2} + f(x_i)h \\ &= \frac{h(f(x_{i-1}) + 4f(x_i) + f(x_{i+1}))}{6} \end{aligned}$$

となる. あとは (5.1.1) を用いて計算すればよい.

5.2 Poisson 方程式

有界領域 Ω , 境界 Γ における偏微分方程式

$$\begin{aligned} u_{xx}(x, y) + u_{yy}(x, y) &= f(x, y) \quad (x, y) \in \Omega \\ u(x, y) &= g(x, y) \quad (x, y) \in \Gamma \end{aligned}$$

の近似解を $u(x, y) = \sum_{j=1}^n u_j \varphi_j(x, y)$ の形で求める.

1) Ω を有限個の 3 角形 E_1, E_2, \dots に分割.

3 角形の頂点で Ω の内部にあるものを P_1, \dots, P_m とし, Γ 上にあるものを P_{m+1}, \dots, P_n とする. $P_i = (x_i, y_i)$ とおく.

2) $\varphi_i(x, y)$ を P_i で 1, P_i を頂点に持たない 3 角形上では 0 となる連続な区分 1 次関数とする.

3) $v(x, y)$ をテスト関数 (1階微分可能で $v(x, y) = 0$ ($(x, y) \in \Gamma$ をみたす関数) とする. x, y でそれぞれ部分積分することにより,

$$\begin{aligned} 0 &= \iint_{\Omega} (u_{xx}(x, y) + u_{yy}(x, y) - f(x, y))v(x, y) dx dy \\ &= \int \left\{ \int u_{xx} v dx \right\} dy + \int \left\{ \int u_{yy} v dy \right\} dx - \iint_{\Omega} f v dx dy \\ &= \iint_{\Omega} (-u_x(x, y)v_x(x, y) - u_y(x, y)v_y(x, y) - f(x, y)v(x, y)) dx dy \end{aligned}$$

ここで $u(x) = \sum_{j=1}^n u_j \varphi_j(x, y)$, $v(x, y) = \varphi_i(x, y)$ ($i = 1, 2, \dots, m$) とおくと,

$$\begin{aligned} 0 &= \iint_{\Omega} - \sum_{j=1}^n u_j \{ (\varphi_j(x, y))_x (\varphi_i(x, y))_x + (\varphi_j(x, y))_y (\varphi_i(x, y))_y \} - f(x, y) \varphi_i(x, y) dx dy \\ &= \sum_{j=1}^n u_j \iint_{\Omega} \{ -(\varphi_j(x, y))_x (\varphi_i(x, y))_x - (\varphi_j(x, y))_y (\varphi_i(x, y))_y \} dx dy - \iint_{\Omega} f(x, y) \varphi_i(x, y) dx dy \end{aligned}$$

4) よって

$$\begin{aligned} a_{ij} &= \iint_{\Omega} \{ -(\varphi_j(x, y))_x (\varphi_i(x, y))_x - (\varphi_j(x, y))_y (\varphi_i(x, y))_y \} dx dy \\ f_i &= \iint_{\Omega} f(x, y) \varphi_i(x, y) dx dy \end{aligned}$$

とおくと, m 元連立方程式 $\sum_{j=1}^n a_{ij} u_j = f_i$ ($i = 1, 2, \dots, m$) を得る. ただし境界条件より, $u_i = g(x_i, y_i)$ ($m+1 \leq i \leq n$) である.