平成 15 年度

卒業論文

常微分方程式の境界値問題に対する不等分割近似を用いた差分法

平成 16 年 2 月 5 日

指導教授： 山本　哲朗　教授

早稲田大学　理工学部　情報学科

1g99p122-7　藤田　祐作

目 次

第 1 章

序論

1.1 背景

物理現象、経済現象など様々な現象が微分方程式で記述されうる。しかし、一部の線形微分方程式以外は、解析的に解くことは非常に困難であるため、解を数値的に求める手法が必要不可欠となっている。その代表例として挙げられるのが、差分法（finite difference method:FDM)、有限要素法（finite element method:FEM)、境界要素法（boundary element method:BEM）である。今回、これらの中でもきわめてポピュラーな数値解法である差分法についての研究を行った。差分法は、微分方程式の境界値問題や初期値・境界値問題の解を近似的に解く手法として計算機が登場した当初から利用されているので、数値計算の安定性、数値解の誤差評価などに関する多くの研究があるが、それらは十分とは言えない。従来の収束理論では、数値解の精度を測る物差しは打切り誤差の位数（オーダー）とされてきた。よく知られているように、標準的な差分法として知られている Shortley-Weller 近似（以下 S-W 近似）では、等間隔分点に対する大域打ち切り誤差の位数は 2 次であり、不等分点のそれは 1 次のオーダーであるから、上記理論によって不等分割差分解の精度は等分割差分解より劣ると長い間信じられてきた。しかしながら、1982 年 White,Jr. により 2 点境界値問題に対し差分近似の打ち切り誤差が 1 次であっても差分解が 2 次の精度をもつ事例が見出され、1986 年 Mantauffel-White によって Dirichlet 境界条件を含む混合型 2 点境界値問題

$$-\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{du}{dx}\right)+f\left(x,u,\frac{du}{dx}\right)=0$$

$$\alpha_0 u(a)+\alpha_1 u'(a)=\alpha$$

$$\beta_0 u(b)+\beta_1 u'(b)=\beta$$

に対し S-W 近似と Pearson 近似を併用すれば、差分解の精度は 2 次であることが示された ([12]、定理 3.2、系 3.3 を参照)。しかし、彼らの導いた結果には多くの仮定がなされており、その中には検証不可能な仮定も置かれている。また、Neumann 条件を近似する方法としてよく用いられる仮想分点法はそれらの仮定の一つを満足しないことも分かる。近年、山本哲朗教授により Sturm-Liouville 型作用素とその S-W 近似に対する Green 関数と離散 Green 関数との間に調和な関係が存在することが見出され、その応用として、Manteuffel-White の理論よりも簡明な収束理論が構築されつつある。

1.2　本論文の目的

本論文では、任意分点を用いる差分解は、打ち切り誤差が 1 次であっても 2 次の精度をもつことを数値実験により確かめる。また区間の一部の細分が差分解の精度に及ぼす影響および解曲線の形状に応じて分点を選んだ場合についても検証する。さらに混合条件の近似方法として、仮想分点法と Pearson 型 3 点近似の比較を行う。

1.3　本論文の構成

本論文の構成は以下の通りである。第 2 章では本論文の対象としている常微分方程式の境界値問題に対する解の存在定理につき述べる。第 3 章では等分割と不等分割による差分法の基礎事項につき述べる。第 4 章では第 5 章の数値例として非線形常微分方程式を取り上げたので、その解法として利用した Newton 法を説明する。第 5 章では実際に数値例としていくつかの境界値問題を取り上げ、その数値結果および評価を示す。最後に第 6 章で結論と今後の課題を示す。

第 2 章

初期値問題と境界値問題

2.1 はじめに

常微分方程式の境界値問題の解の存在と一意性の理論は、初期値問題のそれに頼っている部分が多く、境界値問題を解くために適用される計算手法のいくつかも初期値問題を利用している（Shooting 法など）。したがって、境界値問題の前に、準備として初期値問題の解の存在と一意性の理論を取り上げる。

2.2 初期値問題

2.2.1 常微分方程式の初期値問題

微分方程式

$$u' = f(x; u) \tag{2.1}$$

の解 $u(x)$ で、**初期条件**（initial condition）

$$u(a) = \alpha \tag{2.2}$$

をみたすものを求める問題を、**初期値問題**(initial value problem) あるいは**コーシー問題**という。ここで、u, f, α を n 次元のベクトルとすれば、n 次元連立常微分方程式も (2.1) と同様の形式で考えることができる。

2.2.2 解の存在と一意性

この章では、n 次元空間の 2 つの点の距離の大きさとして、最大値ノルム

$$|u - v| \equiv \max_{1 \le k \le n} |u_k - v_k|$$

を用いることにする。初期値問題の解の存在と一意性の定理として次が知られている。

定理 2.1 関数 $f(x; u)$ は

$$R : a \le x \le b,\ |u| < \infty$$

で連続で、u について次の Lipschitz 条件、すなわち

$$|f(x;u) - f(x;v)| \leq K|u - v| \quad (\forall (x;u), (x;v) \in R \ , K \text{ は定数})$$

をみたすとする。このとき
(a)(2.1),(2.2) で与えられる初期値問題は、次の区間

$$[a, b] = \{x | a \leq x \leq b\}$$

で定義される一意な解 $u = u(x;\alpha)$ をもつ。
(b) この解は、α について Lipschitz 連続であり、x に対して一様である。実際

$$u(x;\alpha) - u(x;\beta) \leq e^{K(x-a)}|\alpha - \beta| \quad (\forall (x;\alpha), (x;\beta) \in R)$$

を得る。

2.3 境界値問題

2.3.1 常微分方程式の境界値問題

微分方程式

$$y'' = f(x, y, y') \tag{2.3}$$

の解 $y(x)$ で、区間の両端点において**境界条件**（boundary condition）

$$a_0 y(a) - a_1 y'(a) = \alpha, \ |a_0| + |a_1| \neq 0 \tag{2.4}$$

$$b_0 y(b) + b_1 y'(b) = \beta, \ |b_0| + |b_1| \neq 0$$

をみたすものを求める問題を 2 **点境界値問題**（boundary value problem）という。この場合も y, f, α, β を n 次元ベクトルとすれば、n 次元連立常微分方程式を (2.3) と同様の形式で考えることができる。より複雑な場合として、$x = a_1, a_2, \cdots, a_m$ のように m 個の点が与えられて、その各々で境界条件が指定されている**多点境界値問題**もある。2 点境界値問題の場合、境界条件として

1. $y(a) = \alpha, \ y(b) = \beta$ 第 1 種境界条件（Dirichlet 型境界条件）

2. $y'(a) = \alpha,\ y(b) = \beta$ 第 2 種境界条件（Neumann 型境界条件）

3. $a_0 y(a) - a_1 y'(a) = \alpha,\ b_0 y(b) + b_1 y'b) = \beta$ 第 3 種境界条件

4. $y'(a) = h_1(y(a)),\ y'(b) = h_2(y(b))$ 非線形境界条件

などがあげられる。ここで、α, β, k, l は与えられた実数で、h_1, h_2 は与えられた関数である。

2.3.2 解の存在と一意性

この問題の実際の解の形式的なアプローチは関連のある初期値問題

$$u'' = f(x, u, u') \tag{2.5}$$

$$a_0 u(a) - a_1 u'(a) = \alpha,\ c_0 u(a) - c_1 u'(a) = s$$

を考察することで得られる。ここで、2 つ目の初期条件は 1 つ目のそれとは独立である。このことは、$a_1 c_0 - a_0 c_1 \neq 0$ ならば保証される。したがって、一般性を失うことなしに、c_0, c_1 は

$$a_1 c_0 - a_0 c_1 = 1$$

のように選ばれる。この方法で c_0, c_1 を用意し、(2.5) の解を、s の独立性に注意を向けるために

$$u = u(x; s)$$

で表す。$x = b$ における解を評価することで

$$\phi(s) \equiv b_0 u(b; s) + b_1 u'(b; s) - \beta = 0 \tag{2.6}$$

の式の s を決定する。b, β を含む方程式 (2.6) は一般的に s においての超越方程式である。もし、$s = s^*$ がこの方程式の根ならば、方程式

$$y(x) \equiv u(x; s^*)$$

は境界値問題 (2.3),(2.4) の解であることが期待される。これは多くの場合正しく、実際全ての解はこの方法でたいがい決定されうる。正確にいうと、次のようになる。

定理 2.2 (H.B.Keller[10]) 関数 $f(x, u_1, u_2)$ は

$$R : a \leq x \leq b,\ u_1^2 + u_2^2 < \infty$$

において連続、かつ u_1, u_2 について一様に Lipschitz 条件をみたすとする。このとき、境界値問題 (2.3),(2.4) は、(2.6) の単根である $s = s^{(\nu)}$ と同様の解をもつ。その解は

$$y(x) = y^{(\nu)}(x) \equiv u(x; s^{(\nu)})$$

すなわち、初期データ $s = s^{(\nu)}$ をもつ初期値問題 (2.5) の解である。

定理 2.3 (H.B.Keller[10]) (2.3) において関数 $f(x; u_1, u_2)$ は定理 (2.2) の仮定をみたし、R 上で

$$\frac{\partial f}{\partial u_1} > 0,\ \left|\frac{\partial f}{\partial u_2}\right| \leq M$$

をみたす連続な導関数をもつとする。また (2.4) の係数は

$$a_0 a_1 \geq 0,\ b_0 b_1 \geq 0,\ |a_0| + |b_0| \neq 0$$

をみたすとする。このとき、境界値問題 (2.3),(2.4) は一意な解をもつ。

注意 2.1 上記定理における条件 $\frac{\partial f}{\partial u_1} > 0$ はさらに弱い条件 $\frac{\partial f}{\partial u_1} \geq 0$ で置きかえられることが、最近、山本哲朗により見出されている。($f = f(x, u)$ の場合の証明は T.Yamamoto[8] にある。また、$f = f(x, u, u')$ の場合の証明は未発表である。その証明には、初期値問題は用いず、Green 関数の性質と Schauder（シャウダー）の不動点定理を用いる。)

第 3 章

差分法

3.1　はじめに

この章では、微分方程式の境界値問題を数値的に解く手法として知られている差分法（finite difference method:FDM）について説明する。差分法とは、微分方程式の未知関数の導関数を差分商で置き換え、得られる離散化された差分方程式を解くことでもとの微分方程式の近似解を求める手法である。まず、区間を等分割に選ぶ一般的な差分法について説明した後、不等分割による差分法を紹介する。

3.2　等分割近似を用いた差分法

3.2.1　差分近似

準備として導関数 $f'(x), f''(x)$ の近似の方法を説明する。$f(x)$ が C^2 級のとき、x の近傍 $h > 0$ に対する Taylor 展開は

$$f(x \pm h) = f(x) \pm hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) \pm \frac{h^3}{3!}f^{(3)}(x) + \cdots \tag{3.1}$$

となる。$f(x+h)$ の展開で $f^{(3)}$ 以降を打ち切ると

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) + \frac{h}{2}f''(\epsilon) \quad (x < \epsilon < x+h)$$

一方、$f(x-h)$ の展開で $f^{(3)}$ 以降を打ち切ると

$$\frac{f(x) - f(x-h)}{h} = f'(x) - \frac{h}{2}f''(\epsilon) \quad (x-h < \epsilon < x)$$

を得る。上の 2 式はともに打ち切り誤差が $O(h)$ である。特に、$f(x)$ が C^3 級のとき、(3.1) の $f(x+h)$ と $f(x-h)$ の両辺を引いて、$f^{(4)}(x)$ 以降を打ち切ると

$$\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} = f'(x) + \frac{h^2}{6}f^{(3)}(\epsilon) \quad (x-h < \epsilon < x+h)$$

を得る。この式は打ち切り誤差が $O(h^2)$ である。以上より $f'(x)$ に関して次の差分近似がつくれる。

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$: **1 階の前進差分近似**（$O(h)$ の精度）

$$\frac{f(x) - f(x-h)}{h}$$: **1 階の後退差分近似**（$O(h)$ の精度）

$$\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$: **1 階の中心差分近似**（$O(h^2)$ の精度）

$f(x)$ が C^4 級ならば (3.1) の $f(x+h)$ と $f(x-h)$ の両辺を引いて、$f^{(5)}(x)$ 以降を打ち切ると

$$\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}=f''(x)+\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\epsilon)\quad(x-h<\epsilon<x+h)$$

を得る。よって、$f''(x)$ に関して打ち切り誤差 $O(h^2)$ の差分近似がつくれる。

$$\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{2h}$$: **2 階の中心差分近似**（$O(h^2)$ の精度）

ここで、刻み幅 h が大きいと打ち切り誤差のため近似の精度が悪くなるが、h が小さすぎてもの丸め誤差のため精度が悪くなってしまうことに注意する。

3.2.2 差分方程式

常微分方程式の 2 点境界値問題

$$Ly\equiv -y''+f(x,y,y'),\ a<x<b \tag{3.2}$$

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

に対して、前節の中心差分近似を用いて差分方程式を構築してみよう。L は右辺で定義される微分演算子を表す。ここで、h を正の定数として導関数 y', y'' を中心差分近似すると (3.2) は

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

となる。L_h は右辺で定義される差分演算子を表す。$y(x)$ が C^4 級のとき

$$L_h y(x)-Ly(x)=-\frac{h^2}{12}y^{(4)}(\epsilon)+\frac{h^2}{6}y^{(3)}(\eta)f_z(x,y,\zeta)=O(h^2)$$

$$\epsilon,\eta\in(x-h,x+h),\zeta=y'(x)+\theta\Big(\frac{y(x+h)-y(x-h)}{2}-y'(x)\Big)\quad(0<\theta<1)$$

とかける。ここで 区間 $[a,b]$ を $n+1$ 等分して刻み幅 h を等間隔にとる、つまり

$$h=\frac{b-a}{n+1},\ x_i=a+ih\quad(0\le i\le n+1)$$

とすると、n 元連立非線形方程式

$$L_h^*(Y_i) \equiv -\frac{Y_{i+1}-2Y_i+Y_{i-1}}{h^2}+f\left(x_i, Y_i, \frac{Y_{i+1}-Y_{i-1}}{2h}\right)=0 \quad (i=1,2,\cdots n) \tag{3.3}$$

$$Y_0=\alpha,\ Y_{n+1}=\beta$$

の解 Y_i は、h が十分小さいとき、x_i における厳密解 y_i の近似解であることが期待される。近似解の存在と一意性、および精度について次の定理が知られている。

定理 3.1 (H.B.Keller) $f(x,y,z)$ は定理2.3の仮定に加えて、適当な正定数 K_*, K^* により

$$0<K_*<f_y<K^*,\ (x,y,z)\in D$$

をみたすとする。$h \leq \frac{2}{M}$ のとき、(3.3) の解 $Y_1,\cdots,Y_n$ は一意に存在して

$$\max_{1\leq i\leq n}|y(x_i)-Y_i| \leq \frac{1}{K_*}\max_{1\leq i\leq n}|L_h y(x_i)| \to 0 \quad (h\to 0)$$

特に、$y(x)$ が C^4 級ならば

$$\max_{1\leq i\leq n}|y(x_i)-Y_i| \leq O(h^2)$$

ここで (3.3) を **（有限）差分方程式**、その解 Y_i を **（有限）差分解**という。また

$$\tau_i = L_h y(x_i) = (L_h - L)y(x_i)$$

を $x=x_i$ における L_h（または L_h^*）の**局所離散化誤差**（または**局所打ち切り誤差**）という。

3.2.3 解法

実際に次の 2 点境界値問題

$$u''=p(x)u'+q(x)u+r(x), a<x<b \tag{3.4}$$

$$u(a)=\alpha,\ u(b)=\beta$$

を考え、差分法を適用してみる。$h=\frac{b-a}{n+1}, x_i=a+ih(i=0,1,\cdots,n), p_i=p(x_i), q_i=q(x_i), r_i=r(x_i), u(x_i)$ の近似値を U_i とおき、(3.4) に中心差分近似を適用すると

$$-\frac{U_{i+1}-2U_i+U_{i-1}}{h^2}+p_i\frac{U_{i+1}-U_{i-1}}{2h}+q_iU_i+r_i=0, \quad (i=1,2,\cdots n)$$

すなわち

$$(-1-\frac{hp_i}{2})U_{i-1}+(h^2q_i+2)U_i+(-1+\frac{hp_i}{2})U_{i+1}=-h^2r_i \quad (i=1,2,\cdots,n)$$

となる。ここで

$$\begin{aligned} a_i &= -1-\frac{hp_i}{2} \\ b_i &= h^2q_i+2 \\ c_i &= -1+\frac{hp_i}{2} \\ d_i &= -h^2r_i \end{aligned}$$

とおくと次の差分方程式を得る。

$$aU_{i-1}+bU_i+c_{i+1}U_{i+1}=d_i \quad (i=1,2,\cdots,n) \tag{3.5}$$

$$U_0=\alpha,\ U_{n+1}=\beta$$

(3.5) は未知数 U_i に関する n 元連立一方程式であり、次の行列式で表現できる。

$$AU=v \tag{3.6}$$

ここで A,U,v は次のような行列およびベクトルである。

$$A=\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & O \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ O & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

$$U=\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_{n-1} \\ U_n \end{pmatrix} v=\begin{pmatrix} d_1-\alpha a_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n-\beta c_n \end{pmatrix}$$

このように、境界値問題は連立一次方程式に帰着されるので、適当な数値解法によって解を求めることができる。ここで、係数行列 A は零要素を多く含む 3 重対角行列である。こ

の場合、非零要素以外は計算する必要がなく、メモリに保存する必要もない。したがって次のようなアルゴリズムで容易に解を求めることができる。

$$
\begin{aligned}
& g_1 = b_1; \\
& for(i = 2; i <= n; i = i + 1)\{ \\
& \quad m_i = a_i / g_{i-1}; \\
& \quad g_i = b_i - m_i c_{i-1}; \\
& \}
\end{aligned}
$$

これで (3.6) の係数行列を

$$
\begin{pmatrix}
1 & & & & O \\
m_2 & 1 & & & \\
 & m_3 & 1 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
O & & & m_n & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
g_1 & c_1 & & & O \\
 & g_2 & c_2 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \\
 & & & g_{n-1} & c_{n-1} \\
O & & & & g_n
\end{pmatrix}
$$

と分解したことになる。解 U_i は、次のように求められる。

$$
\begin{aligned}
& for(i = 2; i <= n; i = i + 1) \\
& \quad v_i = v_i - m_i v_{i-1}; \\
& U_n = v_n / g_n; \\
& for(i = n - 1; i >= 1; i = i - 1) \\
& \quad U_i = (v_i - c_i U_{i+1}) / g_i;
\end{aligned}
$$

以上のように、微分方程式の導関数を差分近似して差分方程式をつくり、その差分解をもとの微分方程式の近似解として求める方法を **(有限）差分法**という。

3.2.4 仮想分点法

Neumann 条件の処理法について説明する。次の 2 点境界値問題

$$u'' = p(x)u' + q(x)u + r(x),\ a < x < b \tag{3.7}$$

$$u'(a) = \alpha,\ u(b) = \beta \tag{3.8}$$

を考える。この場合、$x_{-1} = a - h$ を仮の分点 (仮想分点) として導入して、U_1 を u_{-1} の仮想近似値とすると、(3.8) の $u'(a) = \alpha$ を

$$\frac{U_1 - U_{-1}}{2h} = \alpha \text{（中心差分近似）}$$

で近似できる。この式と U_0 における差分方程式

$$-\frac{U_1 - 2U_0 + U_{-1}}{h^2} + p_0\alpha + q_0 U_0 + r_0 = 0$$

から U_{-1} を消去すると

$$(2 + q_0 h^2)U_0 - 2U_1 = -h^2(r_0 + p_0\alpha) - 2h\alpha$$

を得る。ここで

$$\tilde{b_0} = 2 + q_0 h^2$$

$$\tilde{c_0} = -2$$

$$\tilde{d_0} = -h^2(r_0 + p_0\alpha)$$

とおくと、差分方程式は次の $n+1$ 元連立方程式になる。

$$\begin{pmatrix} \tilde{b_0} & \tilde{c_0} & & & O \\ a_1 & b_1 & c_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ O & & & a_n & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_0 \\ U_1 \\ \vdots \\ U_{n-1} \\ U_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{d_0} - 2h\alpha \\ d_1 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n - c_n\beta \end{pmatrix}$$

このように Neumann 条件を含む境界値問題に対して仮想分点を導入して処理する手法を**仮想分点法**という。ここで例えば、$x = b$ で $u'(b) = \beta$ のように Neumann 条件が与えられたときは、仮想分点として $x_{n+2} = b + h$ を導入して上の場合と同様に処理すればよい。

3.3 不等分割近似を用いた差分法

ここでは、前節で説明した等分割近似を用いた差分法をより一般化して、刻み幅を区間ごとに決める不等分割近似を用いた差分法を説明する。

3.3.1 Shortley-Weller 近似

2 点境界値問題

$$Lu(x) \equiv -\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{du}{dx}\right) + q(x)u = f(x),\ a < x < b \tag{3.9}$$

$$u(a) = \alpha,\ u(b) = \beta$$

を考える。ただし、$p \in C^{2,1}[a,b], q, f \in C[a,b], p > 0, q \geq 0$ とする。このとき

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n < x_{n+1} = b$$

$$h_i = x_i - x_{i-1},\quad h = \max_i h_i$$

$$x_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_i + x_{i+1}),\quad x_{i-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_{i-1} + x_i)$$

$$p_{i\pm\frac{1}{2}} = p(x_{i\pm\frac{1}{2}}),\quad q_i = q(x_i),\quad u_i = u(x_i)$$

とする。ここで、$x = x_i$ での 2 階導関数 $\frac{d}{dx}(p(x)\frac{du}{dx})|_{x=x_i}$ の差分近似を

$$\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{du}{dx}\right)_{x=x_i} = \frac{p_{i+\frac{1}{2}}\frac{u_{i+1}-u_i}{h_{i+1}} - p_{i-\frac{1}{2}}\frac{u_i-u_{i-1}}{h_i}}{\frac{h_{i+1}+h_i}{2}}$$

$$+O(h_{i+1} - h_i) + O\left(\frac{h_{i+1}^3 + h_i^3}{h_{i+1} + h_i}\right)$$

より、

$$\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{du}{dx}\right)_{x=x_i} \approx \frac{p_{i+\frac{1}{2}}\frac{u_{i+1}-u_i}{h_{i+1}} - p_{i-\frac{1}{2}}\frac{u_i-u_{i-1}}{h_i}}{\frac{h_{i+1}+h_i}{2}} \tag{3.10}$$

で定義する。このように刻み幅 h_i を区間ごとに決める差分近似を **Shortley-Weller 近似**（以下 S-W 近似）という。(3.10) を (3.9) に適用すると

$$L_h^* U_i = \frac{2}{h_{i+1} + h_i}\left\{\left(-\frac{p_{i-\frac{1}{2}}}{h_i}\right)U_{i-1} + \left(\frac{p_{i+\frac{1}{2}}}{h_{i+1}} + \frac{p_{i-\frac{1}{2}}}{h_i} + \frac{h_{i+1} + h_i}{2}q_i\right)U_i + \left(-\frac{p_{i+\frac{1}{2}}}{h_{i+1}}\right)U_{i+1}\right\}$$

$$= f_i \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

となる。ここで

$$a_i = \frac{p_{i-\frac{1}{2}}}{h_i}$$

$$b_i = \frac{h_{i+1} + h_i}{2}q_i$$

とおくと、次の差分方程式を得る。

$$\frac{2}{h_{i+1}+h_i}(-a_iU_{i-1}+(a_i+a_{i+1}+b_i)U_i-a_{i+1}U_{i+1})=f_i \quad (i=1,2,\cdots,n) \tag{3.11}$$

$$U_0=\alpha,\ U_{n+1}=\beta$$

(3.11) を行列で表現すると

$$H(A+B)U=v \tag{3.12}$$

となる。ここで H,A,B,U,v は次のような行列およびベクトルである。

$$H=\mathrm{diag}\left(\frac{2}{h_1+h_2},\cdots,\frac{2}{h_n+h_{n+1}}\right),\ B=\mathrm{diag}(b_1,\cdots,b_n),$$

$$A=\begin{pmatrix} a_1+a_2 & -a_2 & & & O \\ -a_2 & a_2+a_3 & -a_3 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -a_{n-1} & a_{n-1}+a_n & -a_n \\ O & & & -a_n & a_n+a_{n+1} \end{pmatrix},$$

$$U=\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_{n-1} \\ U_n \end{pmatrix},\ v=\begin{pmatrix} f_1+\frac{2a_1\alpha}{h_1+h_2} \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n+\frac{2a_{n+1}\beta}{h_n+h_{n+1}} \end{pmatrix}$$

また、x_i における L_h^* の局所離散化誤差 τ_i は

$$\begin{aligned} \tau_i &= L_h^*u(x_i)-f(x_i) \\ &= L_h^*u(x_i)-Lu(x_i) \\ &= \begin{cases} O(h) & (h_i\neq h_{i+1}) \\ O(h^2) & (h_i=h_{i+1}) \end{cases} \end{aligned}$$

ゆえに $u=[u_1,\cdots,u_n]^t,\tau=[\tau_1,\cdots,\tau_n]^t$ とおくとき

$$H(A+B)u=v+\tau \tag{3.13}$$

(3.12),(3.13) より

$$H(A+B)(u-U)=\tau$$

行列 A および $A+B$ は既約優対角行列な L 行列であって、$A+B \geq A$ かつ $O \leq (A+B)^{-1} \leq A^{-1}$([1])。よって

$$|u-U| = |(A+B)^{-1}H^{-1}\tau| \leq A^{-1}H^{-1}|\tau| \leq ||\tau||_\infty A^{-1}H^{-1}e \tag{3.14}$$

ただし $|u-U|, |\tau|$ は $u-U, \tau$ の各成分を絶対値でおきかえて得られる列ベクトルを表し e は各成分が 1 の列ベクトルを表す。ここで、$\phi(x)$ を

$$-\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{du}{dx}\right) = 1,\ u(a) = u(b) = 0$$

の解とすれば、

$$\sigma \equiv L_h^*\varphi(x_j) = L_h^*\varphi(x_j) - L\varphi(x_j) = O(h_{j+1} - h_j) \to 0 \quad (h \to 0)$$

であるから、$\varphi = [\varphi_1, \cdots, \varphi_n]^t, \rho = [\rho_1, \cdots, \rho_n]^t$ とおくとき

$$HA\varphi = e + \rho \geq \frac{1}{2}e$$

これより $A^{-1}H^{-1}e \leq 2\varphi < \infty$ を得る。したがって、(3.14) より

$$|u-U| \leq 2||\tau||_\infty \varphi = \begin{cases} O(h) & ((h_1, \cdots, h_{n+1}) \neq (h, \cdots, h)) \\ O(h^2) & (h_1 = \cdots = h_{n+1} = h) \end{cases}$$

であるが、実は $(A+B)^{-1}H^{-1}\tau$ をさらに詳しく調べることにより、どのような分割に対しても

$$\max_i |u_i - U_i| = \begin{cases} O(h^3) & \text{(境界付近)} \\ O(h^2) & \text{(境界付近以外)} \end{cases}$$

となる。

3.3.2 Pearson 近似

前節では 2 階導関数の近似である S-W 近似を説明し、それを用いて差分方程式を構築した。本節では一階導関数の近似について考える。$u(x_i)$ の $h_i, h_{i+1} > 0$ に対する Taylor 展開は

$$u(x_i - h_i) = u(x_i) - h_i u'(x_i) + \frac{1}{2}h_i^2 u''(x_i) - \frac{1}{6}h_i^3 u'''(x_i) + \frac{1}{24}h_i^4 u^{(4)}(\epsilon_i) \tag{3.15}$$

$$u(x_i + h_{i+1}) = u(x_i) + h_{i+1} u'(x_i) + \frac{1}{2}h_{i+1}^2 u''(x_i) + \frac{1}{6}h_{i+1}^3 u'''(x_i) \tag{3.16}$$

$$+\frac{1}{24}h_{i+1}^4 u^{(4)}(\tau_i)$$

となる。(3.15),(3.16) の両辺を引いて $h_{i+1}+h_i$ で割ると $u'(x_i)$ の近似として

$$u'(x_i) \approx \frac{u(x_i+h_{i+1})-u(x_i-h_i)}{h_{i+1}+h_i} \quad (O(h)\text{ の精度})$$

を得る。これは $u(x_i+h_{i+1}), u(x_i-h_i)$ の 2 点を用いて $u'(x_i)$ を近似する一般的な方法であるが、一方で 3 点を用いる方法もある。α_i, β_i を導入し、(3.15),(3.16) より次の式を作る。

$$\begin{aligned}\alpha_i u(x_i-h_i)+\beta_i u(x_i+h_{i+1}) &= (\alpha_i+\beta_i)u(x_i)+(h_{i+1}\beta_i-\alpha_i h_i)u'(x_i)\\ &+ \frac{1}{2}(\alpha_i h_i^2+\beta_i h_{i+1}^2)u''(x_i)+\frac{1}{6}(-h_i^3\alpha_i+h_{i+1}^3\beta_i)u'''(x_i)+\cdots\end{aligned}$$

ここで $h_{i+1}\beta_i-\alpha_i h_i=1,\ \alpha_i h_i^2+\beta_i h_{i+1}^2=0$ となるように α_i, β_i を定めると

$$\begin{aligned}\alpha_i &= \frac{-h_{i+1}}{h_i(h_i+h_{i+1})}\\ \beta_i &= \frac{h_i}{h_i(h_i+h_{i+1})}\end{aligned}$$

となる。これより $u'(x_i)$ に関して次の $O(h^2)$ の近似式が得られる。

$$-\frac{h_{i+1}}{h_i(h_i+h_{i+1})}u(x_i-h_i)+\frac{h_i-h_{i+1}}{h_i h_{i+1}}u(x_i)+\frac{h_i}{h_{i+1}(h_i+h_{i+1})}u(x_i+h_{i+1}) \tag{3.17}$$

$$=u'(x_i)+\frac{1}{6}h_i h_{i+1}u'''(x_i)+O(h^3)\ (x_i-h_i \le x_i \le x_i+h_{i+1})$$

これを **Pearson 近似**という。

3.4 Neumann 条件の処理

3.4.1 仮想分点法

Neumann 条件を含む 2 点境界値問題

$$-\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{du}{dx}\right)+q(x)u=f(x),\ a<x<b \tag{3.18}$$

$$u'(a)=\alpha,\ u(b)=\beta \tag{3.19}$$

を考える。まず、仮の分点 $x_{-1} = x_0 - h_1$ を導入し、U_{-1} を u_{-1} に対する仮想近似値とすると、(3.19) の $u'(a) = \alpha$ を

$$\frac{U_1 - U_{-1}}{2h_1} = \alpha \tag{3.20}$$

で近似できる。また、$(pu')' = pu'' + p'u'$ より U_0 に関する差分方程式は

$$-p_0\frac{U_1 - 2U_0 + U_{-1}}{h_1^2} - p_0'\alpha + q_0U_0 = f_0 \tag{3.21}$$

となる。(3.20),(3.21) より U_{-1} を消去すると

$$\frac{2}{h_1}\left\{\left(\frac{p_0}{h_1} + \frac{h_1q_0}{2}\right)U_0 + \left(-\frac{p_0}{h_1}\right)U_1\right\} = f_0 + p_0'\alpha - 2\frac{p_0\alpha}{h_1}$$

を得る。ここで

$$\tilde{a_0} = \frac{p_0}{h_1}$$
$$\tilde{b_0} = \frac{h_1q_0}{2}$$

とおくと、差分方程式 $H(A+B)U = v$ は次の $n+1$ 元連立一次方程式になる。

$$\begin{pmatrix} \frac{2}{h_1} & & & O \\ & \frac{2}{h_1+h_2} & & \\ & & \ddots & \\ O & & & \frac{2}{h_n+h_{n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{a_0}+\tilde{b_0} & -\tilde{a_0} & & O \\ -a_1 & a_1+a_2+b_1 & -a_2 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots \\ O & & -a_n & a_n+a_{n+1}+b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_0 \\ \vdots \\ U_n \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} f_0 + p_0'\alpha - \frac{2p_0\alpha}{h_1} \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n + \frac{2a_{n+1}\beta}{h_n+h_{n+1}} \end{pmatrix}$$

$x = b$ で $u'(b) = \beta$ のように Neumann 条件が与えられたときは、仮想分点に $x_{n+2} = x_{n+1} + h_{n+1}$ を導入して考えればよい。

3.4.2 Pearson 型 3 点近似

3 点を用いて導関数を近似する Pearson 近似の考えをもとに、仮想分点を用いずに Neumann 条件を処理する方法がある。

$u(x_i)$ の $h_{i+1}, h_{i+2} > 0$ に対する Taylor 展開は

$$u(x_i + h_{i+1}) = u(x_i) + h_i u'(x_i) + \frac{1}{2}h_i^2 u''(x_i) + \frac{1}{6}h_i^3 u'''(x_i) + \frac{1}{24}h_i^4 u^{(4)}(\epsilon_i) \quad (3.22)$$

$$u(x_i + h_{i+1} + h_{i+2}) = u(x_i) + (h_{i+1} + h_{i+2})u'(x_i) + \frac{1}{2}(h_{i+1} + h_{i+2})^2 u''(x_i) \quad (3.23)$$

$$+\frac{1}{6}(h_{i+1} + h_{i+2})^3 u'''(x_i) + \frac{1}{24}(h_{i+1} + h_{i+2})^4 u^{(4)}(\tau_i)$$

となる。β_i,γ_i を導入し、次の式をつくる。

$$\begin{aligned}
\beta_i u(x_i + h_{i+1}) + \gamma_i u(x_i + h_{i+1} + h_{i+2}) &= (\beta_i + \gamma_i)u(x_i) + [\beta_i h_{i+1} + \gamma_i(h_{i+1} + h_{i+2})]u'(x_i) \\
&+ \frac{1}{2}[\beta_i h_{i+1}^2 + \gamma_i(h_{i+1} + h_{i+2})^2]u''(x_i) \\
&+ \frac{1}{6}[\beta_i h_{i+1}^3 + \gamma_i(h_{i+1} + h_{i+2})^3]u'''(x_i) \\
&+ \frac{1}{24}[\beta_i h_{i+1}^4 + \gamma_i(h_{i+1} + h_{i+2})^4](u^{(4)}(\epsilon_i) + u^{(4)}(\tau_i))
\end{aligned}$$

ここで $\beta_i h_{i+1} + \gamma_i(h_{i+1} + h_{i+2}) = 1$, $\beta_i h_{i+1}^2 + \gamma_i(h_{i+1} + h_{i+2})^2 = 0$ となるように β_i, γ_i を定めると

$$\begin{aligned}
\beta_i &= \frac{h_{i+1} + h_{i+2}}{h_{i+1}h_{i+2}} \\
\gamma_i &= \frac{h_{i+1}}{-h_{i+2}(h_{i+1} + h_{i+2})}
\end{aligned}$$

となる。このとき、

$$\alpha_i = -(\beta_i + \gamma_i) = \frac{2h_{i+1} + h_{i+2}}{h_{i+1}(h_{i+1} + h_{i+2})}$$

とおけば $u'(x_i)$ に関して次の近似式を得る。

$$\alpha_i u(x_i) + \beta_i u(x_i + h_{i+1}) + \gamma_i u(x_i + h_{i+1} + h_{i+2}) = u'(x_i) + O(h^2)$$

これを $x = x_0$ に適用すると

$$\alpha u(x_0) + \beta u(x_0 + h_1) + \gamma u(x_0 + h_1 + h_2) = u'(x_0) + O(h^2) \quad (3.24)$$

となる。ただし、

$$\begin{aligned}
\alpha &= \frac{2h_1 + h_2}{h_1(h_1 + h_2)} \\
\beta &= \frac{h_1 + h_2}{h_1 h_2} \\
\gamma &= -\frac{h_1}{h_2(h_1 + h_2)}
\end{aligned}$$

である。(3.24) を用いれば仮想分点 x_{-1} を導入せずに x_0 で与えられる Neumann 条件を処理できる。また h_{i+1} を h_{n+1}、h_{i+2} を h_n でおきかえて $x = x_{n+1}$ に適用すると次の近似式が得られる。

$$\tilde{\alpha}u(x_{n+1}) + \tilde{\beta}u(x_{n+1} - h_{n+1}) + \tilde{\gamma}u(x_{n+1} - h_{n+1} - h_n) = u'(x_{n+1}) + O(h^2) \tag{3.25}$$

ただし、

$$\begin{aligned}
\tilde{\alpha} &= \frac{2h_{n+1} + h_n}{h_{n+1}(h_{n+1} + h_n)} \\
\tilde{\beta} &= -\frac{h_{n+1} + h_n}{h_{n+1}h_n} \\
\tilde{\gamma} &= \frac{h_{n+1}}{h_n(h_n + h_{n+1})}
\end{aligned}$$

である。(3.25) より仮想分点 x_{n+2} を導入せずに x_{n+1} で与えられる Neumann 条件を処理できる。このように (3.24),(3.25) は両端点の $u'(x)$ を 3 点を用いて近似していることから **Pearson 型 3 点近似**ということにする。

第 4 章

Newton法

4.1　はじめに

6 章の数値実験において非線形方程式を扱うため、その反復法として知られている Newton 法について説明する。

4.2　非線形方程式

非線形 2 点境界値問題を差分近似すれば、n 元連立非線形方程式

$$
\begin{cases}
f_1(x_1, x_2, \cdots, x_{n-1}, x_n) = 0 \\
f_2(x_1, x_2, \cdots, x_{n-1}, x_n) = 0 \\
\vdots \\
f_{n-1}(x_1, x_2, \cdots, x_{n-1}, x_n) = 0 \\
f_n(x_1, x_2, \cdots, x_{n-1}, x_n) = 0
\end{cases}
$$

が生じる。この方程式は n 次元 ベクトル

$$
x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix}, F = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix}
$$

を導入することにより

$$
F(x) = 0
$$

と表すことができる。

4.3　縮小写像

反復法は非線形方程式の近似解を、繰り返し計算によって求める手法である。直接法のように有限解で解が求まるとは限らないので、解への収束が問題となる。

方程式

$$
x = g(x) \tag{4.1}
$$

を解く反復

$$
x^{(\nu+1)} = g(x^{(\nu)}),\ \nu = 0, 1, 2, \cdots \tag{4.2}
$$

を考える。縮小写像の原理として次が知られている。

定理 4.1 (縮小写像の原理) 区間 I は完備、すなわち、I の任意のコーシー列は I 内の点に収束すると仮定する。I で定義された $g(x)$ が、次の条件をみたすならば、(4.1) の根は I 内にちょうど 1 つ存在し、反復列 (4.2) の極限として得られる。
(1)$x \in I$ なら $g(x) \in I$
(2)$x, x' \in I$ なら

$$|g(x) - g'(x)| \leq \lambda |x - x'| (\text{Lipschitz 条件})$$

(3)λは定数 (Lipschitz 定数) で $0 \leq \lambda < 1$
条件 (1), (2), (3) をみたす関数 g を縮小写像という。

補助定理 4.1 関数 g が区間 I 上で微分可能で

$$|g'(x)| \leq \lambda (x \in I)$$

ならば、g は Lipschitz 条件をみたし、λ が Lipschitz 定数の一つである

4.4 1変数の Newton 法

まず 1 変数の場合の Newton 法について説明する。関数 $f(x)$ を点 $(x^{(\nu)}, f(x^{(\nu)}))$ における接線 $\tilde{f(x)}$ で近似すると

$$\tilde{f(x)} = f(x^{(\nu)}) + f'(x^{(\nu)})(x - x^{(\nu)})$$

そして $f(x) = 0$ の解を求める代わりに $\tilde{f(x)} = 0$ の解 x を求め、その x を $x^{(\nu+1)}$ とおけば、次の反復スキームが得られる。

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

初期値 $x^{(0)}$ から出発して、$\nu = 0, 1, 2, \cdots$ についての解を反復計算して求める。ここで、

$$g(x) = x - \frac{x}{f'(x)}$$

とおくと、$f'(\alpha) \neq 0$ のとき、$f(\alpha) = 0$ ならば、$g(\alpha) = \alpha$ となり、Newton 法は

$$x^{(\nu+1)} = g(x^{(\nu)})$$

と書ける。f は解 α を含むある区間 I で C^2 級、この区間内で $f'(x) \neq 0$ とすると

$$g'(x) = 1 - \frac{f'(x)^2 - f(x)f''(x)}{f'(x)} = \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)}$$

と表わせて、$f(\alpha) = 0$ より $g'(\alpha) = 0$ となる。ゆえに、g' の連続性から、α を含む適当な区間 $I_1 \subset I$ で $|g'(x)| < 1$ としてよい。補助定理 4.1 より、g は縮小写像になるから、$f(x) = 0$ の解へ収束する。さらに、Taylor 展開より

$$f(\alpha) = f(x^{(\nu)}) + (\alpha - x^{(\nu)})f'(x^{(\nu)}) + \frac{1}{2}(\alpha - x^{(\nu)})^2 f''(\epsilon)$$

と書けるから、

$$\begin{aligned} x^{(\nu+1)} - \alpha &= x^{(\nu)} - \alpha - \frac{f(x^{(\nu)})}{f'(x^{(\nu)})} = \frac{-f(x^{(\nu)}) + (\alpha - x^{(\nu)})f'(x^{(\nu)})}{f'(x^{(\nu)})} \\ &= \frac{f''(\epsilon)}{2f'(x^{(\nu)})}(x^{(\nu)} - \alpha)^2 \end{aligned}$$

したがって、区間 I_1 において $0 < A \leq |f'(x)|, |f''(x)| \leq B$ とすると、

$$|x^{(\nu+1)} - \alpha| \leq \frac{B}{2A}|x^{(\nu)} - \alpha|^2$$

となる。

4.5 n 変数 Newton 法

n 元連立非線形方程式

$$F(x) = 0 \tag{4.3}$$

の解を求める Newton 法を考えてみよう。$F(x)$ が C^2 級であると仮定する。このとき、$F(x)$ を $x^{(k)}$ のまわりで Taylor 展開すると

$$F(x) = F(x^{\nu}) + J(x^{(\nu)})(x - x^{(\nu)}) + O((x - x^{(\nu)})^2) \tag{4.4}$$

となる。ここで、$J(x)$ は $F(x)$ の微分 $\frac{\partial F_i}{\partial x_j}$ を ij 成分とする $n \times n$ 行列で、Jacobi 行列という。(4.4) の 1 次以降を打ち切ったものを $\tilde{F}(x)$ とおくと、(4.3) を近似する式

$$\tilde{F}(x) = F(x^{(\nu)}) + J(x^{(\nu)})(x - x^{(\nu)}) = 0 \tag{4.5}$$

を得る。このとき、(4.5) を x について解き、その x を $x^{(\nu+1)}$ とおけば、次の反復スキームがつくれる。

$$x^{(\nu+1)} = x^{(\nu)} - [J(x^{(\nu)})]^{-1} F(x^{(\nu)}) \tag{4.6}$$

$$J[x^{(\nu)}] = \left[\frac{\partial F_i(x^{(\nu)})}{\partial x_j}\right] (\text{Jacobi 行列})$$

ここで (4.6) の反復解を求めるのに、Jacobi 行列の逆行列 $[J(x^{(\nu)})]^{-1}$ をそのまま計算すると誤差が蓄積され正しく計算が行えない場合があるので、普通は (4.6) の両辺に Jacobi 行列をかけて

$$[J(x^{(\nu)})]y^{(\nu)} = -F(x^{(\nu)}) \quad (y^{(\nu)} = x^{(\nu+1)} - x^{(\nu)})$$

とし、この連立一次方程式を $y^{(\nu)}$ について解き

$$x^{(\nu+1)} = x^{(\nu)} + y^{(\nu)}$$

を計算し反復解を求める。こうすることで $[J(x^{(\nu)})]^{-1}$ の計算を行わなくて済む。最後に n 変数の場合の Newton 法の収束定理を示す。これは、前節の 1 変数の場合と同様の議論をすることで得られる。

定理 4.2 $F_i(x)(1 \le i \le n)$ が C^2 級で、$J(a)$ が正則ならば、(4.3) の解 α の十分近くから出発する Newton 法は α に 2 次収束する。（局所的収束定理）

ここで注意したいことは、Newton 法は解の十分近くに初期値を取ると反復解は非常に速く収束するが（局所的収束性が保証できる）、初期値が解から離れていたりすると反復解が発散する可能性がある（大域的収束性が保証できない）。よって、定理 (4.2) が示すように初期値を解の近傍にとる必要があるが、次元数が大きいと解の存在範囲を特定することが難しくなる。解決法として、例えば、Homotopy 法などによって求めた粗い解を初期値とすることもできる。

第 5 章

数値解の評価

5.1 はじめに

実際に常微分方程式の 2 点境界値問題の数値例をいくつか取り上げ不等分割近似を用いた差分法を適用した。この章では、その数値結果および精度に関する評価を示す。

5.2 評価環境

数値実験のプラットフォームとして、CPU 1000MHz、主記憶量 256MB の計算機を採用した。境界値問題の数値解を計算するプログラムを C 言語で作成し、上記の計算機上で実行した。

5.3 数値例

5.3.1 線形常微分方程式の 2 点境界値問題

まずはじめに、線形常微分方程式の 2 点境界値問題に対して不等分割近似を用いた差分法を適用し、数値実験を行った。例として、境界値問題

$$-\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{du}{dx}\right)+q(x)\frac{du}{dx}+r(x)u=f(x),\ 0<x<1 \tag{5.1}$$

$$u(0)=1,\ u(1)=2$$

を考える。ただし

$$\begin{aligned}p(x)&=x+1\\ q(x)&=1\\ r(x)&=e^x\\ f(x)&=\left\{e^x+\frac{\pi^2}{4}(x+1)\right\}\sin\frac{\pi}{2}x+e^x\end{aligned}$$

とする。刻み幅 h_i として 0.1 の 1/2 倍、1/3 倍、1/4 倍、1/5 倍 の値をランダムに選択したときの数値結果を表 5.1 に示す。なお、一階導関数の近似法として 2 点近似を用いた。ここで $h=(\max_i h_i=0.05)$ とすると、$\max|u_i-U_i|/h^2=2.923809e-002$ となり、$O(h^2)$ 以上の精度の差分解が得られているのが分かる。

表 5.1: 常微分方程式の 2 点境界値問題

x_i	$\|u_i - U_i\|$
3.333333e-002	1.233331e-006
5.333333e-002	1.115869e-005
7.833333e-002	1.996386e-005
1.283333e-001	2.224748e-005
1.616667e-001	2.085812e-005
2.116667e-001	6.170243e-005
2.366667e-001	5.328231e-005
2.616667e-001	4.482432e-005
2.866667e-001	3.631600e-005
3.366667e-001	7.309523e-005
3.700000e-001	7.122093e-005
4.033333e-001	6.908641e-005
4.366667e-001	6.666300e-005
4.566667e-001	5.799456e-005
4.900000e-001	5.488893e-005
5.100000e-001	4.630240e-005
5.300000e-001	3.767800e-005
5.550000e-001	2.925534e-005
5.750000e-001	2.057003e-005
6.250000e-001	3.954866e-005
6.450000e-001	3.154351e-005
6.950000e-001	4.604288e-005
7.200000e-001	3.859962e-005
7.533333e-001	3.277290e-005
8.033333e-001	3.915490e-005
8.283333e-001	3.233948e-005
8.616667e-001	2.565024e-005
9.116667e-001	2.334449e-005
9.366667e-001	1.715071e-005
9.566667e-001	1.179792e-005
9.766667e-001	6.370433e-006

5.3.2 非線形常微分方程式の 2 点境界値問題

非線形常微分方程式の 2 点境界値問題に対して不等分割近似を用いた差分法を適用し、数値実験を行った。例として、境界値問題

$$-u'' + f(x, u, u') = 0,\ 0 < x < 1 \tag{5.2}$$

$$u(0) = u(1) = 0$$

を考える。ただし

$$f(x, u, u') = (\cos \pi x)u' + e^u - \pi^2 \sin \pi x - \pi \cos^2 \pi x - e^{\sin \pi x}$$

とする。ここで差分方程式をつくると

$$\frac{2}{h_{i+1} + h_i}\Big\{\Big(-\frac{\cos \pi x_i}{2} - \frac{2}{h_i}\Big)U_{i-1} + \Big(\frac{1}{h_{i+1}} + \frac{1}{h_i}\Big)U_i + \Big(\frac{\cos \pi x_i}{2} - \frac{2}{h_{i+1}}\Big)U_{i+1}\Big\}$$
$$-\pi^2 \sin \pi x_i - \pi \cos^2 \pi x_i - e^{\sin \pi x_i} = 0,\ U_0 = U_{n+1} = 0$$

となる。ここで、上式の左辺を $F_i(U_1, U_2, \cdots, U_n)$ とおいて、n 元非線形連立方程式

$$F_i(U_1, U_2, \cdots, U_n) = 0\ (i = 1, 2, \cdots, n)$$

を初期値 $U_i^{(0)} = 0\ (i = 1, 2, \cdots, n)$ として Newton 法を用いて解いた。ただし、Newton 法の停止条件を

$$|F| < 1.0 \times 10^{-10}$$

とする。刻み幅 h_i として 0.1 の 1/2 倍、1/3 倍、1/4 倍、1/5 倍 の値をランダムに選択したときの数値結果を表 5.2 に示す。なお、一階導関数の近似法として 2 点近似を用いた。$\max_i |u_i - U_i|/h^2 = 3.997769e-001$ となり、前例と同様 $O(h^2)$ 以上の精度の差分解が得られた。

表 5.2: 非線形常微分方程式の 2 点境界値問題

x_i	$\lvert u_i - U_i \rvert$
3.333333e-002	6.924535e-005
5.333333e-002	3.914424e-005
7.833333e-002	2.548816e-005
1.283333e-001	3.975480e-004
1.616667e-001	4.540152e-004
2.116667e-001	7.565647e-004
2.366667e-001	7.634674e-004
2.616667e-001	7.681769e-004
2.866667e-001	7.706896e-004
3.366667e-001	9.403554e-004
3.700000e-001	9.672242e-004
4.033333e-001	9.868933e-004
4.366667e-001	9.994422e-004
4.566667e-001	9.970141e-004
4.900000e-001	9.980034e-004
5.100000e-001	9.951816e-004
5.300000e-001	9.921450e-004
5.550000e-001	9.860364e-004
5.750000e-001	9.825472e-004
6.250000e-001	8.839897e-004
6.450000e-001	8.819278e-004
6.950000e-001	7.185795e-004
7.200000e-001	7.098059e-004
7.533333e-001	6.591793e-004
8.033333e-001	3.875510e-004
8.283333e-001	3.835818e-004
8.616667e-001	3.187051e-004
9.116667e-001	5.830473e-005
9.366667e-001	5.250331e-005
9.566667e-001	2.909429e-005
9.766667e-001	7.135772e-006

5.3.3 検証 1

一部分で刻み幅を小さくすると、その部分の解の精度が上がるかどうか、また解全体の精度に影響があるかどうか、1 つの例を対象に検証を行った。例として、常微分方程式の 2 点境界値問題を考える。

$$-u'' + f(x, u, u') = 0,\ 0 < x < 1 \tag{5.3}$$

$$u(0) = u(1) = 0$$

ただし

$$f(x, u, u') = (\cos \pi x)u' - 10\pi^2 \sin \pi x - 10\pi \cos^2 \pi x$$

とする。なお、真の解は $u = 10 \sin \pi x$ である。この実験では、刻み幅を小さく取る区間では $h = 0.001$ とし、それ以外の区間では $h = 0.01$ とする。刻み幅の取り方を次のような 3 つの場合に分けて考えてみた。

$$
\begin{aligned}
&(1)\ if(x \leq 0.2)\ h = 0.001;\\
&\quad\ \ else\ h = 0.01;\\
&(2)\ if(0.4 \leq x \leq 0.6)\ h = 0.001;\\
&\quad\ \ else\ h = 0.01;\\
&(3)\ if(x \geq 0.8)\ h = 0.001;\\
&\quad\ \ else\ h = 0.01;
\end{aligned}
$$

(1),(3) は、境界付近で刻み幅を小さく取った場合である。一方、(2) は解の中央付近で刻み幅を小さく取った場合である。数値結果は表 5.3〜5.5 のようになる。(1)〜(3) の解全体の最大誤差および刻み幅を小さく取った区間の最大誤差を、等分割 ($h = 0.01$) の場合のそれらと比較している。数値結果を見ると分かるように、(1),(3) の場合、刻み幅を小さくとった区間の精度が飛躍的に上がった。また、解全体の精度も改善された。一方、(2) の場合は刻み幅を小さく取った区間の精度も解全体の精度も、(1),(3) の場合ほど上がらなかった。 この結果から刻み幅を小さくする箇所によって解に及ぼす影響の度合いが違うことが分かる。特に、本例においては境界付近の刻み幅を小さくとることで解の精度が顕著に上がった。

表 5.3: (1) の場合

	$\max_i \lvert u_i - U_i \rvert$	$\max_{x_i \leq 0.2} \lvert u_i - U_i \rvert$
不等分割	6.040614e-004	4.844895e-006
等分割	9.104650e-004	5.336324e-004

表 5.4: (2) の場合

	$\max_i \lvert u_i - U_i \rvert$	$\max_{0.4 \leq x_i \leq 0.6} \lvert u_i - U_i \rvert$
不等分割	8.931513e-004	8.931513e-004
等分割	9.104650e-004	9.104650e-004

表 5.5: (3) の場合

	$\max_i \lvert u_i - U_i \rvert$	$\max_{x_i \geq 0.8} \lvert u_i - U_i \rvert$
不等分割	6.040685e-005	4.902219e-006
等分割	9.104650e-005	5.566479e-005

5.3.4 検証 2

一般的に、解曲線の立ち上がりが鋭い問題に対しては、等分割による差分法では良い解が得られない。そこで、解曲線の形状に合わせて刻み幅を選んだら解の精度がどうなるか、１つの例を取り上げ実験を行った。次の常微分方程式の 2 点境界値問題

$$-u'' + 2u' - u = f(x),\ 0 < x < 1 \tag{5.4}$$

$$u(0) = -\frac{10}{11},\ u(1) = -10e$$

を考える。ただし

$$f(x) = -\frac{2e^x}{(x-1.1)^3}$$

とする。ここで真の解は、$u = \frac{e^x}{x-1.1}$ なので、解曲線は x が増加するほど曲率が鋭くなり、実際、等分割近似を用いた差分法では x が 1 に近づくにつれ精度が落ちていく（表 5.7 参照）。形状を知るために、まず、等分割近似を用いた差分法を適用し、差分解 U_i を求め、差分商 $\frac{U_i - U_{i-1}}{h}$ をつくる。これは、解曲線の傾きの近似的な値なので解曲線の形状の情報として十分使える。本例では、区間 [0,1] を 10 等分割 ($h = 0.1$) して差分解を求め、差分商 $\frac{U_i - U_{i-1}}{h}(i = 1, \cdots, 10)$ をつくっておく。今回は単純に 10 等分割した区間ごとに、基準の刻み幅 $h(= 0.1)$ をその区間の差分商で割った $h_j = \frac{h}{\left|\frac{U_i - U_{i-1}}{h}\right|}$ を解曲線の形状を考慮に入れた刻み幅として採用した。このように刻み幅を決めることで、解曲線の傾きが鋭い（差分商の値が大きい）区間ほど刻み幅を小さくとることができる。この刻み幅を用いて差分法を適用すると表 5.6 のような結果になる。$x = 0.0, 0.1, \cdots, 0.9$ 付近の差分解の精度を示している。最大誤差は 5.825970e-004 となり同じ分割数を等分割した場合（表 5.7）の最大誤差 4.573600e-003 より精度が改善された。

表 5.6: 解曲線の形状に応じて刻み幅を選んだ場合

x_j	h_j	$\|u_j - U_j\|$
3.163072e-002	3.163072e-002	2.440546e-005
1.265229e-001	3.163072e-002	1.065170e-004
2.020232e-001	2.516679e-002	1.762680e-004
3.010621e-001	1.980777e-002	2.718298e-004
4.084255e-001	1.533763e-002	3.789022e-004
5.011633e-001	1.159222e-002	4.655150e-004
6.025573e-001	8.449507e-003	5.426371e-004
7.015779e-001	5.824736e-003	5.825970e-004
8.006656e-001	3.669917e-003	5.537329e-004
9.014734e-001	1.976624e-003	3.950906e-004

表 5.7: 等分割の場合

x_i	h_i	$\|u_i - U_i\|$
3.831418e-003	3.831418e-003	9.075380e-006
1.034483e-001	3.831418e-003	2.707174e-004
2.030651e-001	3.831418e-003	5.870478e-004
3.026820e-001	3.831418e-003	9.664733e-004
4.022989e-001	3.831418e-003	1.418275e-003
5.019157e-001	3.831418e-003	1.952201e-003
6.015326e-001	3.831418e-003	2.576857e-003
7.011494e-001	3.831418e-003	3.293237e-003
8.007663e-001	3.831418e-003	4.062887e-003
9.003831e-001	3.831418e-003	4.573584e-003

5.3.5 仮想分点法と Pearson 型 3 点近似の比較

混合条件の近似方法である仮想分点法と Pearson 型 3 点近似の比較を次の 2 つの例に対して行った。

例 1.

$$-u'' + p(x)u' + q(x)u = r(x),\ 0 < x < 1 \tag{5.5}$$

$$u'(0) = 1,\ u'(1) = -4$$

ただし、$p(x) = -x, q(x) = 5, r(x) = 20x^3 + 4x$ とする。

例 2.

$$-\frac{d}{dx}\left(p(x)\frac{du}{dx}\right) + q(x)\frac{du}{dx} + r(x)u = f(x),\ 0 < x < 1 \tag{5.6}$$

$$\frac{\pi}{2}u(0) - u'(0) = 0,\ u'(1) = 0$$

ただし、$p(x) = x + 1,\ q(x) = 1,\ r(x) = e^x,\ f(x) = \left\{e^x + \frac{\pi^2}{4}(x+1)\right\}\sin\frac{\pi}{2}x + e^x$ とする。

ここで、境界条件を仮想分点法または Pearson 型 3 点近似で処理するか、一階導関数を 2 点近似または Pearson 近似で近似するかで 4 通りの場合を実験した。結果は表 5.8,5.9 のようになる。結果を見ると分かるように、例 1,2 とも境界条件を Pearson 型 3 点近似で処理するより仮想分点法で処理した方が差分解の精度が良かった。一方、一階導関数の近似に関しては、例 1 では 2 点近似より Pearson 近似の方が精度が良かったが、例 2 ではその逆になった。理論上では 2 点近似は $O(h)$ の精度で 3 点近似は $O(h^2)$ の精度なので、3 点近似の方が良い精度の解が得られると予想されるが、数値結果はそれを必ずしも反映するものではなかった。

表 5.8: 仮想分点法と Pearson 型 3 点近似の比較（例 1）

境界条件の処理法	一階導関数の近似法	$\max_i \lvert u_i - U_i \rvert$
仮想分点法	2 点近似	1.181131e-005
仮想分点法	Pearson 近似	1.156415e-005
Pearson 型 3 点近似	2 点近似	8.953589e-005
Pearson 型 3 点近似	Pearson 近似	4.151049e-005

表 5.9: 仮想分点法と Pearson 型 3 点近似の比較（例 2）

境界条件の処理法	一階導関数の近似法	$\max_i \lvert u_i - U_i \rvert$
仮想分点法	2 点近似	2.541493e-006
仮想分点法	Pearson 近似	4.283405e-006
Pearson 型 3 点近似	2 点近似	6.474340e-006
Pearson 型 3 点近似	Pearson 近似	1.053097e-005

第 6 章

結論と今後の課題

6.1 結論と今後の課題

本研究では、線形・非線形常微分方程式の 2 点境界値問題を対象にして、不等分割近似を用いた差分法を適用し、数値実験を行った。線形・非線形常微分方程式に対してはどちらも $O(h^2)$ 以上の精度の解を得ることができた。また、一部分の細分が解に与える影響および形状に応じて刻み幅を選んだ場合を取り上げた。注意したいことは、これらはあくまで実験的なものなので、得られた結果、方法は本例でのみ有効であると思っていただきたい。実際、問題によっては、一部分で刻み幅を小さくとったらその部分の精度も解全体の精度も下がってしまうことや、細分した区間の解の精度は下がるが、解全体の精度は改善される場合もあった。しかし、興味深い問題ではあるので、今後も研究の対象とする価値は十分ある。最後に、Neumann 条件を仮想分点法と Pearson 型 3 点近似で処理した場合を取り上げた。仮想分点法を用いた方が良い精度の解が得られたが、これは特定の例題についての結果であるので、一般的に成り立つかどうかは今後の課題にしておきたい。一方で、一階導関数を 2 点近似した方が良いのか、3 点近似した方が良いのか、この優劣をつけることはできなかった。この検証も今後の課題としておきたい。

謝辞

本論文の作成にあたり、テーマ設定から研究内容の指針まで数々の御助言と御指導を下さいました山本哲朗教授に、深く感謝致します。また、卒業論文、発表の注意事項などの御指導を下さいました、修士課程2年生の阿口　誠司氏、小笹　耕平氏に、深く感謝致します。また、学部生の井上　陽介氏、佐藤　裕介氏、嶋田　陽介氏のおかげでゼミの時間を有意義に過ごさせて頂きましたことを、深く感謝致します。最後に、本論文に御指導, 御協力を頂いた皆様に心から深く感謝致します。どうもありがとうございました。

参考文献

[1] 山本哲朗：数値解析入門 [増訂版], サイエンス社 2003

[2] 俣野　博：微分方程式　, 岩波書店 1993

[3] 三井　斌友：微分方程式の数値解法　, 岩波書店 1993

[4] 森　正武・杉原　正顕・室田　一雄：数値計算の基礎, 岩波書店 1993

[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 2003

[6] 洲之内　治男・石渡　恵美子：数値計算 [新訂版], サイエンス社 2002

[7] T.Yamamoto：Harmonic relations between Green's functions and Green's matrices for boundary value problem　, 京都大学数理解析研究所 講究録 2000

[8] T.Yamamoto：Harmonic relations between Green's functions and Green's matrices for boundary value problem　, 京都大学数理解析研究所 講究録 2002

[9] T.Yamamoto：Harmonic relations between Green's functions and Green's matrices for boundary value problem　, 京都大学数理解析研究所 講究録 2004（掲載予定）

[10] H.B.Keller：Numerical Methods for Two-Point Boundary Value Problem,Blaisdell 1968

[11] C.E.Pearson：On a differential equation of boundary layer type, J.Math.Phys.47(1968),134-154

[12] T.A.Manteuffel and A.B.White,Jr.：The numerical solution of second-order boundary value problems on nonuniform meshes,Math.of Comp.47(1986),511-535