Poisson 方程式に対する差分解

桂田 祐史

2003 年 11 月 19 日, 2010 年 2 月 11 日, 2024 年 8 月 28 日

目 次

第1章　はじめに

1.1　執筆再開に際しての言葉

この文書は 20 年以上前に書き始めて、しばらくしたところで執筆停止して放置していたが、つい最近、MATLAB で差分法プログラムを書いたので (桂田 [1], それと準備中の Neumann 境界値問題バージョン [2], 1 次元の場合 [3]) その内容をこれからこの文書に取り入れる予定である。

実は個人的には、最近はすっかり差分法とは縁がなく、FreeFem++ で書いた有限要素法プログラムを用いている。元々私にとっての数値計算は私なりの目的があって (それについては後で書く予定)、そのためには有限要素法の方が差分法よりも便利だからである。授業でも FreeFem++ を紹介して、それを利用することを推奨しているのだが、学生の中にはそれを用いず、慣れている (？) Python を使ったプログラムでシミュレーションをして、それでレポートを書く人が出て来た。私は、プログラミング言語はツールであって、自分の目的に対して便利なものを選べば良いと考えているので、Python を使うことを拒むつもりは全くないのだけれど、提出されたプログラムに正しいものが 1 つもなくて (Neumann 境界値問題解くために Dirichlet 境界値問題のプログラムを使っている— まともにシミュレーションできるはずがない)、ちょっと困ってしまった。それでしばらくネットを散策してみたのだけれど、使いやすいプログラムが見つからなかった。これはちょっと意外であった。そこで差分法による叩き台プログラムを提示してみる気になった。今書くのならばまずは MATLAB で、と考えて MATLAB プログラムを書いた次第である。

1.2　この文書の目標

(準備中)

1.3　参考文献の案内

1.3.1　係数行列の性質について

Poisson 方程式の境界値問題を差分法により離散化して差分方程式を作り、$AU = \boldsymbol{f}$ という形の連立 1 次方程式としてまとめて、それを解いて元の問題の近似解を求めるわけだが、係数行列 A の性質はきちんと調べておくべきである。
山本 [4] は非常によくまとめられている。その §3.3 の内容を紹介する。
(山本には、他にも山本 [5], [6], [7] などの著作があり、どれも参考になる。)

Poisson 方程式の Dirichlet 境界値問題の差分方程式の係数行列を A とする。

(i) A は既約である。

(行列の既約性については、付録 B で説明する。)

(ii) A は強優対角である。すなわち、まず優対角

$$\forall i \quad |a_{ii}| \geq \sum_{\substack{1\leq j\leq n\\ j\neq i}} |a_{ij}|\,.$$

であり、さらに

$$\exists i \quad |a_{ii}| > \sum_{\substack{1\leq j\leq n\\ j\neq i}} |a_{ij}|\,.$$

が成り立つ (強優対角という言葉は Serre [8] に出て来るそうだ)。

(iii) 対角成分はすべて正: $\forall i\ a_{ii} > 0$

(iv) A は Z 行列である: $\forall i, j\ [i \neq j \Rightarrow a_{ij} \leq 0]$.

(iii), (iv) が成り立つとき、A は L 行列であるという。

次の定理が成り立つ。

- 「既約強優対角行列は正則 (非特異) である。」
- 「既約強優対角な L 行列 (つまり (i), (ii), (iii), (iv) が成立) の逆行列の要素は全て正である。つまり $A^{-1} > O$.」

A が正則な Z 行列で、$A^{-1} > 0$ であるとき、A は M 行列という。

結局、Poisson 方程式の Dirichlet 境界値問題の差分方程式の係数行列 A は、ここに書いた全ての性質を満たすわけである。既約、強優対角、対角成分はすべて正, Z 行列、L 行列、正則、M 行列。

また、[4] の §3.3 には書いていないが (当たり前すぎる？もちろん著者はご存知のはず)、条件 (ii) と (iii) に Gerschgorin の円定理を適用すると、固有値が非負であることが分かり、正則性から固有値が正であることも分かる。A は実対称であるから、いわゆる正定値である。

ただし、A が Neumann 境界値問題の差分方程式の係数行列である場合は、(i) 既約, (iii) 対角成分はすべて正, (iv) Z 行列である、は同様に成立するが、(ii) は成立せず単に優対角であるだけである。後で見るように (証明しなくても直観的に分かるように) A は特異であり、したがって M 行列でもない。固有値は非負であるが、0 は固有値であるから、半正定値ではあるが、正定値ではない。

第2章　差分解の厳密解への収束証明

この章の記述は John [9] による (少し古めかしいかもしれない)。田端 [10] も参考になる。熱方程式と同様に、最大値原理を使うのが鍵となる。

2.1　差分方程式

Ω は $\mathbf{R}^2$ の有界領域、Γ をその境界、$f\colon\Omega\to\mathbf{R}$, $\varphi\colon\Gamma\to\mathbf{R}$ が与えられているとき、Poisson 方程式の境界値問題

$$-\triangle u = f \quad (\text{in } \Omega), \tag{2.1}$$

$$u = \varphi \quad (\text{on } \Gamma) \tag{2.2}$$

を考える。

正数 h を固定し、$\mathbf{R}^2$ に幅 h の格子を導入して、

$$G \overset{\text{def.}}{=} \overline{\Omega} \text{ に属する格子点の全体}, \tag{2.3}$$

$$G_i \overset{\text{def.}}{=} \{P\in G; P \text{ とその上下左右の格子点 } \in \overline{\Omega}\}, \tag{2.4}$$

$$G_b \overset{\text{def.}}{=} G\setminus G_i \tag{2.5}$$

とおく。G_i の点を内部格子点、G_b の点を境界格子点と呼ぶ。

もちろん $G_i\subset\Omega$. 正方形領域等を格子で切る場合は $G_b\subset\Gamma$ とできるが、一般には駄目。

U が G で定義されているとき、G_i 上の関数 LU を

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

で定める。

$\varphi\colon\Gamma\to\mathbf{R}$ の近似となっている $\tilde\varphi\colon G_b\to\mathbf{R}$ を適当に選ぶ (具体的な取り方は後述)。

以下、方程式

$$-LU(P)=f(P) \quad (P\in G_i), \tag{2.6}$$

$$U(P)=\tilde\varphi(P) \quad (P\in G_b) \tag{2.7}$$

を考える。この方程式を差分方程式と呼び、その解 $\{U(P)\}_{P\in G}$ が存在するとき、それを差分解と呼ぶ。

(2.6) を $U(P)$ について解くと

$$U(P)=\frac{1}{4}\sum_{Q\sim P}U(Q)+\frac{h^2}{4}f(P)$$

となる。ただし「Q は P の上下左右の格子点である」ということを $Q\sim P$ と表した。

2.2 差分方程式に関する最大値原理

補題 2.2.1 (離散最大値原理) U が $-LU = f$ (on G_i) の解で、$f(P) < 0$ $(\forall P \in G_i)$ であれば、U は G_i で最大値 ($= \max_G U$) を取り得ない。

証明 U が $P_0 \in G_i$ で最大値 M を取ったと仮定しよう。

$$M = \max_{P \in G} U(P) = U(P_0) = \frac{1}{4} \sum_{Q \sim P} U(Q) + \frac{h^2}{4} f(P_0) \le \frac{1}{4} \sum_{Q \sim P} M + \frac{h^2}{4} f(P_0) < M.$$

これは矛盾である。ゆえに U は G_i で最大値を取り得ない。 ■

命題 2.2.2 U が差分方程式 $-LU = f$ (on G_i) の解ならば、

$$\max_{P \in G} |U(P)| \le \max_{P \in G_b} |U(P)| + \frac{d^2}{4} \max_{P \in G_i} |f(P)|.$$

ただし $d \overset{\text{def.}}{=} G$ の直径 $= \sup_{x,y \in G} |x - y|$.

証明 まず

$$U(P) \le \max_{P \in G_b} |U(P)| + \frac{d^2}{4} \max_{P \in G_i} |f(P)| \quad (P \in G) \tag{2.8}$$

を示そう。U が最大値を G_b で取る場合は何も証明する必要はない。U が $P_0 \in G_i$ で最大値を取ったと仮定する:

$$\max_{P \in G} U(P) = U(P_0).$$

P_0 では U と同じ値で、差分作用素 $-L$ を施すと負の値を取るような補助関数 $\overline{U}$ を作ろう。ε を定数として、

$$\overline{U}(P) \overset{\text{def.}}{=} U(P) + \varepsilon \overline{PP_0}^2$$

とおく。

$$\frac{(x+h)^2 - 2x^2 + (x-h)^2}{h^2} + \frac{(y+h)^2 - 2y^2 + (y-h)^2}{h^2} = 4$$

に注意すると、($\overrightarrow{P_0P} = (x, y)$ として使って)

$$-L\overline{U}(P) = -(LU(P) + 4\varepsilon) = f(P) - 4\varepsilon$$

が成り立つことがわかる。

そこで、$f(P) - 4\varepsilon < 0$ $(P \in G)$ となるように、つまり

$$\varepsilon > \max_{P \in G_i} \frac{1}{4} f(P) \tag{2.9}$$

であるように ε を取ると、$\overline{U}$ は G_i で最大値を取り得ないことが分かる (実際、$\tilde{f} = f - 4\varepsilon$ とおくと、G_i の上で $-L\overline{U} = \tilde{f}$, $\tilde{f} < 0$ が成り立つので、上の補題が適用できる)。

ゆえに、$\overline{U}(P_0)$ は $\max_G \overline{U} = \max_{G_b} \overline{U}$ よりも真に小さいので、

$$\max_{P\in G} U(P) = U(P_0) = \overline{U}(P_0)$$
$$< \max_{P\in G_b} \overline{U}(P) = \max_{P\in G_b}\left(U(P) + \varepsilon \overline{P_0P}^2\right) \le \max_{P\in G_b} U(P) + \varepsilon d^2.$$

この式は (2.9) を満たす任意の ε について成立するので、実は

$$\varepsilon = \max_{P\in G_i} \frac{1}{4} f(P)$$

についても成立する。代入すると

$$\max_{P\in G} U(P) \le \max_{P\in G_b} U(P) + \frac{d^2}{4}\max_{P\in G_i} f(P) \le \max_{P\in G_b} U(P) + \frac{d^2}{4}\max_{P\in G_i} |f(P)|.$$

すなわち (2.8) が証明できた。U の代わりに $-U$ について議論すれば、

$$\max_{P\in G}(-U(P)) \le \max_{P\in G_b}(-U(P)) + \frac{d^2}{4}\max_{P\in G_i}|f(P)| \quad (P\in G)$$

が得られるので、二つをまとめると所望の不等式を得る。■

系 2.2.3 差分方程式 (2.6), (2.7) の解は一意である。

証明 U が

$$-LU(P) = 0 \quad (P\in G_i), \quad U(P) = 0 \quad (P\in G_b)$$

を満たすとする。上の記号で $f = 0$, $\tilde{\varphi} = 0$ ということだから、

$$\max_{P\in G} |U(P)| \le 0 + 0 = 0.$$

これから $U \equiv 0$. ゆえに差分方程式の解は一意である。■

差分方程式は、適当な $A \in M(n; \mathbf{R})$, $b \in \mathbf{R}^n$ によって $Ax = b$ の形に書けることに注意すると、この系から差分方程式が常に可解であることも分かる。

2.3 誤差評価

u は 4 階までの微分係数が Ω で存在して有界とする。

$$E(P) \overset{\text{def.}}{=} U(P) - u(P)$$

とおく。明らかに

$$LE(P) = LU(P) - Lu(P) = -f(P) - Lu(P).$$

Taylor の定理から、

$$-Lu(P) = -\triangle u(P) - \frac{h^2}{12}\overline{u}_{xxxx} - \frac{h^2}{12}\overline{u}_{yyyy} = f(P) - \frac{h^2}{12}(\overline{u}_{xxxx} + \overline{u}_{yyyy})$$

ただし

$$\overline{u}_{xxxx} = P \text{ の近くの二点における } u_{xxxx} \text{ の平均値},$$
$$\overline{u}_{yyyy} = P \text{ の近くの二点における } u_{yyyy} \text{ の平均値}.$$

ゆえに
$$|-Lu(P)-f(P)|\le\frac{u_4h^2}{6},\quad u_4\overset{\text{def.}}{=}\sup_{|\alpha|=4,x\in\Omega}|D^\alpha u(x)|.$$
ゆえに
$$\tilde f(P)\overset{\text{def.}}{=}-LE(P)$$
とおくとき、
$$|\tilde f(P)|\le\frac{u_4h^2}{6}\quad(P\in G).$$
さて、E は
$$LE(P)=\tilde f(P)\quad(P\in G_i),\quad E(P)=u(P)-\tilde\varphi(P)\quad(P\in G_b)$$
の解であるから、
$$\max_{P\in G}|E(P)|\le\max_{P\in G_b}|E(P)|+\frac{d^2}{4}\max_{P\in G_i}|\tilde f(P)|\le\max_{P\in G_b}|\varphi(P)-\tilde\varphi(P)|+\frac{u_4d^2h^2}{24}.$$
例えば $G_b\subset\Gamma$ のように選べるときは、$P\in G_b$ に対して、$\widetilde\varphi(P)=\varphi(P)$ とできるので、
$$\max_{P\in G}|U(P)-u(P)|\le\frac{u_4d^2h^2}{24}=O(h^2)\quad(h\to 0).$$

2.4 近似境界データ $\tilde\varphi$ の定め方

$P_0\in G_b$ に対し、$\widetilde\varphi(P_0)$ をどう定めるか。

方法 I (P_0 の近くの点における φ の値を採用) 実は

$$\exists Q\in\Gamma\quad\text{s.t.}\quad\overline{QP_0}\le h. \tag{2.10}$$

が成り立つので、このような Q を一つ適当に選んで、$\widetilde\varphi(P)=\varphi(Q)$ とおけばよい。

以下 (2.10) を証明する。もしも $P_0\in\Gamma$ ならば $Q=P_0$ でよい。$P_0\notin\Gamma$ の場合を考えよう。$P_0\in\overline\Omega$ であったから $P_0\in\Omega$ である。$P_0\in G_b$ で、G_b の定義から、$Q\sim P_0$ となる Q のうち少なくとも一つ P_1 は $\overline\Omega$ に属さない。線分 P_0P_1 において、$P_0\in\Omega$, $P_1\notin\overline\Omega$ であるから、その線分上の点 Q で $Q\in\Gamma$ であるものがある。このとき $\overline{P_0Q}<h$.

この場合、
$$\max_{P\in G_b}|u(P)-\widetilde\varphi(P)|=O(h).$$

方法 II P_0 の上下左右の格子点のうち、P_0 をはさんで向かい合う 2 点 P_1, P_2 が

$$P_1\in G_i,\quad P_2\notin G$$

を満たすとする。このような P_1, P_2 が常に存在するわけではないが (これは図を描いて考えれば明らか)、Γ が滑らかで、格子が十分細かければ、これが成り立つことが期待できる (証明できるかな…)。

すると
$$\exists Q\in\text{線分 }P_0P_3\cap\Gamma.$$
こういう Q を適当に選んでおいて、
$$\varphi(P_0)=\frac{\theta U(P_1)+\varphi(Q)}{1+\theta},\quad\theta=\frac{\overline{P_0Q}}{h}$$

とおく。

この場合、

$$\max_{P \in G_b} |u(P) - \widetilde{\varphi}(P)| = O(h^2).$$

第3章　正方形領域における数値実験

この節の内容は、菊地・山本 [11]、森・杉原・室田 [12] などが参考になる。

3.1　ターゲット問題

2 次元正方形領域 $\Omega = (0,1)\times(0,1)$ における Poisson 方程式の Dirichlet 境界値問題

$$
\begin{aligned}
&(3.1) \qquad -\triangle u(x,y) \;\equiv\; -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)u(x,y) = f(x,y) \quad ((x,y)\in\Omega),\\
&(3.2) \qquad u(x,y) \;=\; g(x,y) \quad ((x,y)\in\Gamma)
\end{aligned}
$$

を考える。ただし Γ は Ω の境界で、$f\colon \Omega\to\mathbf{R}$, $g\colon\Gamma\to\mathbf{R}$ は与えられているとする。

3.2　差分法による離散化

正方形領域の各辺を N 等分して格子に区切ることにして、次のようにおく。

$$
\begin{aligned}
h &= \frac{1}{N},\\
x_i &= ih \quad (0\le i\le N),\\
y_j &= jh \quad (0\le j\le N),\\
u_{i,j} &= u(x_i,y_j) \quad (0\le i\le N,\ 0\le j\le N),\\
f_{i,j} &= f(x_i,y_j) \quad (1\le i\le N-1,\ 1\le j\le N-1)
\end{aligned}
$$

$u_{i,j}$ の近似値 $U_{i,j}$ を次の方程式の解として定義する。

$$(3.3)\ -\left[\frac{U_{i+1,j}-2U_{i,j}+U_{i-1,j}}{h^2}+\frac{U_{i,j+1}-2U_{i,j}+U_{i,j-1}}{h^2}\right]=f_{i,j}\quad ((x_i,y_j)\in\Omega \text{ となる } (i,j)),$$

$$(3.4)\ U_{i,j}=g(x_i,y_j)\quad ((x_i,y_j)\in\Gamma \text{ となる } (i,j))$$

3.3　連立1次方程式の行列、ベクトル表現

(ここは森・杉原・室田 [12] による。)
U_ℓ $(1\le \ell\le n \overset{\text{def.}}{=} (N-1)^2)$ を

$$U_\ell = U_{i,j},\quad \ell=(N-1)j+i$$

によって定めて、

$$\vec U \overset{\text{def.}}{=} (U_1,U_2,\cdots,U_n)^T$$

とおく。言い換えると

$$\vec U = (U_{11},U_{12},\cdots,U_{1,N-1},U_{21},U_{22},\cdots,U_{2,N-1},\cdots,U_{N-1,1},U_{N-1,2},\cdots,U_{N-1,N-1}).$$

すると (3.3), (3.4) は

$$A\vec{U}=\vec{b} \tag{3.5}$$

の形に表わされる。ここで

$$A=\begin{pmatrix} C & I & & & \\ I & C & I & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & I & C & I \\ & & & I & C \end{pmatrix}, \tag{3.6}$$

ただし

$$C:=\begin{pmatrix} -4 & 1 & & & \\ 1 & -4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -4 & 1 \\ & & & 1 & -4 \end{pmatrix}\in M(N-1;\mathbf{R}),\quad I:=I_{N-1}=(N-1)\,\text{次単位行列}. \tag{3.7}$$

m 次正方行列 J_m を

$$J_m:=\begin{pmatrix} 0 & 1 & & \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

で定義すると、

$$C=-4I_{N-1}+J_{N-1}$$

と表される。さらに Kronecker 積 (テンソル積) $\otimes$ を用いると[1]、

$$A=-4I_{N-1}\otimes I_{N-1}+J_{N-1}\otimes I_{N-1}+I_{N-1}\otimes J_{N-1} \tag{3.8}$$

と表現できる (MATLAB などでは Kronecker 積が用意されていて、簡単に A が用意できる)。

余談 3.3.1 (こう書くともっと素敵さ) 初めて (3.8) を見たときはとても感心したのであるが、今はもう一息と思っている。次のように書くべきである。

折角だから、一般化して書く。$\Omega:=(a,b)\times(c,d)$ を x 方向に N_x 等分、y 方向に N_y 等分して解く場合、

$$\begin{aligned} &h_x:=\frac{b-a}{N_x},\quad h_y:=\frac{d-c}{N_y},\\ &x_i:=a+ih_x\quad (i=0,1,\dots,N_x),\quad y_j:=c+jh_y\quad (j=0,1,\dots,N_y),\\ &m:=N_x-1,\quad n:=N_y-1,\\ &\omega:=\{1,\dots,m\}\times\{1,\dots,n\},\\ &f_{ij}:=f(x_i,y_j)\quad ((i,j)\in\omega) \end{aligned}$$

---

[1]

$$A\otimes B:=\begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdots & a_{mn}B \end{pmatrix}\quad (A=(a_{ij})\in\mathbf{R}^{m\times n},\quad B\in\mathbf{R}^{k\times\ell}).$$

とおくと差分方程式は

$$-\left(\frac{U_{i+1,j}-2U_{i,j}+U_{i-1,j}}{h_x^2}+\frac{U_{i,j+1}-2U_{i,j}+U_{i,j-1}}{h_y^2}\right)=f_{ij}\quad ((i,j)\in\omega).$$

格子点 (x_i,y_j) $((i,j)\in\omega)$ を

$$(x_1,y_1),(x_2,y_1),\ldots,(x_m,y_1),(x_1,y_2),(x_2,y_2),\ldots,(x_m,y_2),\ldots,(x_1,y_n),(x_2,y_n),\ldots,(x_m,y_n).$$

のように並べること、つまり (x_i,y_j) が

$$\varphi(i,j):=(j-1)(N_x-1)+i$$

番目であると番号づけすることを、「I 方向に」番号づけするという。

$\ell=\varphi(i,j)$ のとき、

$$i=(\ell \bmod m)+1,\quad j=(\ell\ \mathrm{div}\ m)+1$$

である。

$\ell=\varphi(i,j)$ とするとき、$U_\ell:=U_{i,j}$, $f_\ell:=U_{i,j}$ と書くことにすると、差分方程式は

$$A\begin{pmatrix}U_1\\U_2\\\vdots\\U_{mn}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}f_1\\f_2\\\vdots\\f_{mn}\end{pmatrix}$$

と表される。ただし

$$A:=I_n\otimes\left[\frac{1}{h_x^2}(2I_m-J_m)\right]+\left[\frac{1}{h_y^2}(2I_n-J_n)\right]\otimes I_m. \tag{3.9}$$

ここで $\frac{1}{h_x^2}(2I_m-J_m)$ と $\frac{1}{h_y^2}(2I_n-J_n)$ は、それぞれ (a,b) 上の微分作用素 $-\frac{d^2}{dx^2}$ と (c,d) 上の微分作用素 $-\frac{d^2}{dy^2}$ の差分近似を表す係数行列である。■

問 $\vec{b}\in\mathbf{R}^n$ の成分を求めよ (場合分けして書くか、計算するプログラムを作れ)。

MATLAB 互換の Octave による計算例

```
oyabun% octave
GNU Octave, version 2.0.16 (sparc-sun-solaris2.6).
Copyright (C) 1996, 1997, 1998, 1999, 2000 John W. Eaton.
This is free software with ABSOLUTELY NO WARRANTY.
For details, type `warranty'.

octave:1> n=4
n = 4
octave:2> I=eye(n)
I =

  1  0  0  0
  0  1  0  0
  0  0  1  0
  0  0  0  1

octave:3> B=diag(ones(n-1,1),1)+diag(ones(n-1,1),-1)
B =

  0  1  0  0
  1  0  1  0
  0  1  0  1
  0  0  1  0

octave:4> A = - 4 * kron(I,I) + kron(B,I) + kron(I,B)
A =

  -4   1   0   0   1   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   1  -4   1   0   0   1   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   1  -4   1   0   0   1   0   0   0   0   0   0   0   0   0
   0   0   1  -4   0   0   0   1   0   0   0   0   0   0   0   0
   1   0   0   0  -4   1   0   0   1   0   0   0   0   0   0   0
   0   1   0   0   1  -4   1   0   0   1   0   0   0   0   0   0
   0   0   1   0   0   1  -4   1   0   0   1   0   0   0   0   0
   0   0   0   1   0   0   1  -4   0   0   0   1   0   0   0   0
   0   0   0   0   1   0   0   0  -4   1   0   0   1   0   0   0
   0   0   0   0   0   1   0   0   1  -4   1   0   0   1   0   0
   0   0   0   0   0   0   1   0   0   1  -4   1   0   0   1   0
   0   0   0   0   0   0   0   1   0   0   1  -4   0   0   0   1
   0   0   0   0   0   0   0   0   1   0   0   0  -4   1   0   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   1   0   0   1  -4   1   0
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   1   0   0   1  -4   1
   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   1   0   0   1  -4

octave:5> quit
```

3.3.1 ポアソン方程式に対する差分法 revisited

(2016 年某月某日、久しぶりにポアソン方程式に対する差分法を扱う学生が出て来て、この文書を見返して気づいたこと。)

$i=N_1-1$, $i=1$, $j=N_y-1$, $j=1$ の場合の (x_i,y_j) に対応する方程式はどの行にあるのか、非同次方程式の場合は連立 1 次方程式はどうなるか、説明を補足した方がいいかも。前者は「熱方程式に対する差分法 I」(桂田 [13]) を読めば分かるはず (と思いたい)。

以下、係数行列

$$A=I_{N_y-1}\otimes\frac{1}{h_x^2}(2I_{N_x-1}-J_{N_x-1})+\frac{1}{h_y^2}(2I_{N_y-1}-J_{N_y-1})\otimes I_{N_x-1}$$

の性質について少し述べる。

A は既約かつ優対角 ($|a_{ii}| \ge \sum_{\substack{1\le j\le n\\ j\ne i}} |a_{ij}|$) かつ

$$|a_{11}| > \sum_{\substack{1\le j\le n\\ j\ne 1}} |a_{1j}|$$

を満たすから、既約優対角行列である (既約性の証明は、定義を知っていればすぐ分かると思われるが、桂田 [14] には一応書いてある)。ゆえに A は正則である。

一方 A が対称であることは明らかで、A の固有値が実数であることが分かる。さらに Gerschgorin の定理から、固有値は非負であることが分かるが、上で示したように A は正則であるから、0 は A の固有値ではない。ゆえに A の固有値はみな正であり、A は正値対称行列である。

なお、A の固有値は次のように具体的に求めることが出来る。

まず準備として、$K_N = 2I_N - J_N$ の固有ベクトルは

$$\boldsymbol{u}_1 := \begin{pmatrix} \sin x_1 \\ \sin x_2 \\ \vdots \\ \sin x_N \end{pmatrix}, \boldsymbol{u}_2 := \begin{pmatrix} \sin 2x_1 \\ \sin 2x_2 \\ \vdots \\ \sin 2x_N \end{pmatrix}, \cdots, \boldsymbol{u}_k := \begin{pmatrix} \sin kx_1 \\ \sin kx_2 \\ \vdots \\ \sin kx_N \end{pmatrix}, \cdots, \boldsymbol{u}_N := \begin{pmatrix} \sin Nx_1 \\ \sin Nx_2 \\ \vdots \\ \sin Nx_N \end{pmatrix}.$$

対応する固有値は...

$K_N := 2I_N - J_N$ の固有値を $\lambda_i^{(N)}$ $(i = 1, \dots, N)$ とおくとき、A の固有値は

$$\frac{1}{h_x^2}\lambda_i^{(N_x-1)} + \frac{1}{h_y^2}\lambda_j^{(N_y-1)} \quad (1 \le i \le N_x - 1,\ 1 \le j \le N_y - 1)$$

である。

3.4 定常反復法による連立1次方程式の解法 (計算手順の復習)

$A\vec{x} = \vec{b}$ を同値な方程式

$$\vec{x} = M\vec{x} + \vec{c}$$

の形の方程式に変形し、これを逐次近似法で解く。

これは次の原理に基づく。適当な初期ベクトル $\vec{x}^{(0)}$ を選んで、漸化式

$$\vec{x}^{(k+1)} = M\vec{x}^{(k)} + c$$

によってベクトル列 $\{\vec{x}^{(k)}\}_{k\in\mathbf{N}}$ を定義するとき、

$$\rho(M) \stackrel{\text{def.}}{=} \max\{|\lambda|; \lambda \text{ は } M \text{ の固有値}\} < 1$$

であれば、$\lim_{k\to\infty} x^{(k)}$ が存在し、それは方程式の解になる。そこで十分大きな k に対して $x^{(k)}$ を近似解として採用することができる。

A, b を与えられたとき、M, c をどう定めるかは色々な方法がある (以下に代表的なものを 3 つあげ、計算手順のみ解説する)。注意すべきは、それらの方法は一般に通用するものではなく、A がある種の良い性質を持っている場合にのみ適用できるということである。

次小節の準備として、$A\vec{x}=\vec{b}$ の第 i 行

$$\sum_{j=1}^{n} a_{i,j}x_j = b_i$$

について、$a_{ii} \neq 0$ と仮定して、x_i について解いた式を書いておく:

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j\neq i} a_{ij}x_j\right).$$

3.4.1 Jacobi 法

ベクトル列 $x^k = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \cdots, x_n^{(k)})^T$ $(k = 0, 1, 2, \cdots)$ を

$$\texttt{for (}i\texttt{ = 1; }i\texttt{ <= }n\texttt{; }i\texttt{++)}$$
$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j\neq i} a_{ij}x_j^{(k)}\right)$$

という漸化式で生成する反復法が Jacobi 法である。

3.4.2 Gauss-Seidel 法

ベクトル列 $x^k = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \cdots, x_n^{(k)})^T$ $(k = 0, 1, 2, \cdots)$ を

$$\texttt{for (}i\texttt{ = 1; }i\texttt{ <= }n\texttt{; }i\texttt{++)}$$
$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right)$$

という漸化式で生成する反復法が Gauss-Seidel 法である。

3.4.3 SOR 法

ベクトル列 $x^k = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \cdots, x_n^{(k)})^T$ $(k = 0, 1, 2, \cdots)$ を

$$\texttt{for (}i\texttt{ = 1; }i\texttt{ <= }n\texttt{; }i\texttt{++) }\{$$
$$y_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k)}\right);$$
$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega\left(y_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}\right);$$
$$\}$$

という漸化式で生成する反復法が SOR 法である。ここで ω は $0 < \omega < 2$ を満たす定数であり、緩和パラメーターと呼ばれる。$\omega = 1$ のとき、SOR 法は Gauss–Seidel 法に一致する。

変数の内容を上書きすることが可能な C のようなプログラミング言語では次のように簡単なコードで実現できる。

```
for (i = 1; i <= n; i++) {
```
$$y = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\mathrm{x}[j] - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}\mathrm{x}[j]\right);$$
$$\mathrm{x}[i] = \mathrm{x}[i] + \omega\,(y - \mathrm{x}[i])\,;$$
```
}
```

(3.6), (3.7) で定義される A の場合、理論的に完全な解析が可能で、結果は以下のようになる。「最適の」ω は

$$\omega_0 = \frac{2}{1+\sin(\pi/N)} \tag{3.10}$$

であり、そのとき「収束率」は

$$\frac{1-\sin(\pi/N)}{1+\sin(\pi/N)}$$

に等しい (森・杉原・室田 [12])。

このように最適値が分かることは滅多になく、実際には実験的に最適値の見当をつけるしかない。しかし N が大きくなったときに、最適値がどのように変化するか、その場合、どの程度の収束の速さが期待できるのか、大いに参考になるだろう。

3.5 連立方程式 (3.3), (3.4) を SOR 法により解く

(3.3) を U_{ij} について解くと

$$U_{ij} = \frac{1}{4}\left(U_{i+1,j} + U_{i-1,j} + U_{i,j+1} + U_{i,j-1} + h^2 f_{i,j}\right) \quad (1 \le i \le N-1,\ 1 \le j \le N-1).$$

右辺には $U_{i,j}$ ($i = 0$ or $i = N$ or $j = 0$ or $j = N$) が現れるが、これは未知数ではなく、境界条件から $g(x_i, y_j)$ に等しい。

余談 3.5.1 $f \equiv 0$ のとき (つまり u が調和関数のとき)、U_{ij} が上下左右の格子点での値 $U_{i+1,j}$, $U_{i-1,j}$, $U_{i,j+1}$, $U_{i,j-1}$ の平均に等しい、という式になる。これは調和関数の性質をよく表わしていると言える[2]。■

従って SOR 法の反復計算は次のようになる。

```
for (i = 1; i < N; i++)
  for (j = 1; j < N; j++) {
```
$$y = \frac{1}{4}\left(h^2 f_{ij} + \mathrm{U}[i+1][j] + \mathrm{U}[i-1][j] + \mathrm{U}[i][j+1] + \mathrm{U}[i][j-1]\right);$$
$$\mathrm{U}[i][j] = \mathrm{U}[i][j] + \omega\,(y - \mathrm{U}[i][j])\,;$$
```
  }
```

実はこの方法は (U の適当な初期値が分かっていない場合を除いて) あまり効率的とは言えないが、プログラムが大変書きやすいため、それなりに利用されることが多い。

[2]Laplace 方程式を定常版熱伝導方程式と考えると、「各点の温度が周囲の平均温度に等しい」と解釈できる。あるいは「調和関数の球面平均の定理」を見よ。

3.6 SOR 法によるサンプル・プログラム

前小節で説明した方法によるプログラムを示す。

```
/*
 * poisson-by-sor.c
 *   正方形領域 Ω=(0,1)×(0,1) における Poisson 方程式
 *    -△u=f in Ω, u=g on Γ=∂Ω
 *   を SOR 法で解く。(2012/12/11)
 *
 * gcc -I/usr/local/include -o poisson-by-sor poisson-by-sor.c -L/usr/local/lib -lmatrix -lm
 * 入手: curl -O https://m-katsurada.sakura.ne.jp/program/fdm/poisson-by-sor.c
 */

#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <matrix.h>

double f(double, double);
double g(double, double);
double Square(double);

int main()
{
  int N, n, i, j, k, MaxIter;
  matrix U, F;
  double h, h2, omega, x, y, U_GS, Delta_U;

  printf("N: "); scanf("%d", &N);
  h = 1.0 / N; h2 = h * h;
  n = (N - 1) * (N - 1);
  U = new_matrix(N + 1, N + 1);
  F = new_matrix(N + 1, N + 1);

  /* f の値を事前に計算して記憶しておく */
  for (i = 1; i < N; i++)
    for (j = 1; j < N; j++)
      F[i][j] = f(i * h, j * h);

  /* 特に情報がないので、初期値は 0 にしておく */
  for (i = 1; i < N; i++)
    for (j = 1; j < N; j++)
      U[i][j] = 0.0;

  /* 境界条件から境界上にある格子点での値は分かる */
  for (i = 0; i <= N; i++) {
    x = i * h;
    U[i][0] = g(x, 0.0); U[i][N] = g(x, 1.0);
  }
  for (j = 0; j <= N; j++) {
    y = j * h;
    U[0][j] = g(0.0, y); U[N][j] = g(1.0, y);
  }

  /* SOR 法の緩和パラメーターの選択 (とりあえず) */
  omega = 1.6;

  /* SOR 法の反復計算 */
  MaxIter = 10000;
  for (k = 1; k <= MaxIter; k++) {
    Delta_U = 0.0;
    /* SOR 反復 */
    for (i = 1; i < N; i++)
```

```
      for (j = 1; j < N; j++) {
        U_GS = (h2 * F[i][j]
                + U[i+1][j] + U[i-1][j] + U[i][j+1] + U[i][j-1]) / 4;
        U[i][j] += omega * (U_GS - U[i][j]);
        /* 修正量を計算する */
        Delta_U += Square(U_GS - U[i][j]);
      }
    Delta_U = omega * sqrt(Delta_U);
    printf("反復回数=%d, 修正量=%g\n", k, Delta_U);
    if (Delta_U < 1.0e-10)
      break;
  }
  return 0;
}

double Square(double x)
{
  return x * x;
}

double f(double x, double y)
{
  return 0.0;
}

double g(double x, double y)
{
  return x * x - y * y;
}
```

なお、$f \equiv 0$, $g(x,y) = x^2 - y^2$ としてあるので、厳密解は $u(x,y) = x^2 - y^2$ である。

3.7 課題

- 「収束」したときの差分解 U_{ij} が厳密解 u_{ij} に近いことを観察せよ。誤差の N に関する挙動を調べよ。予想外のことが起こった場合は、f や g を変えて実験せよ。
- 修正量 $\varepsilon_k \overset{\text{def.}}{=} \|U^{(k+1)} - U^{(k)}\|$ が「等比数列的」であることを観察せよ。
- N を変化したとき、最適な ω がどう変わるか実験により調べて、理論値 (3.10) と比較せよ。

余裕があれば次もやってみよ。

- (3.5) の $\vec{b}$ を求めることによって、連立 1 次方程式を定常反復法以外の直接法 (例えば消去法) あるいは非定常反復法 (CG 法の系統) で解くプログラムを作成し、計算に要する CPU time を比較せよ。
  $\cdots$ 色々と細かい工夫が可能である。消去法を用いる場合は、半バンド幅 N の帯行列と考えて A を記憶することでメモリーを節約できる。CG 法を用いる場合は、A を記憶するために 5 本ないし (対称性を利用して) 3 本のベクトルを用意すれば十分である。また前処理を施すことも考えられる。

3.8 消去法によるサンプル・プログラム

以下に掲げるプログラムは連立 1 次方程式を解く部分が非効率的であるが、参考までに。

```
/*
 * poisson.c
 *  (2001/12/9)
 *  curl -O https://m-katsurada.sakura.ne.jp/program/fdm/poisson.c
 */

/*
C     **    FINITE DIFFERENCE METHOD    **
C     **   FOR BOUNDARY VALUE PROBLEM   **
C     **    OF 2-D POISSON EQUATION     **
C     N : NO. OF DIVISIONS IN ONE DIRECTION
C     H : MESH SIZE
C     A : COEFFICIENT MATRIX
C     F : FREE TERM & SOLUTION VECTOR
*/

#include <stdio.h>
#include <matrix.h>

void gauss(matrix, vector, int);

int main()
{
    int i,j,n,nn,ij,ij1,ij2;
    double h,h2;
    vector f;
    matrix a;

    /* INPUT */
    printf("INPUT : N ="); scanf("%d", &n);
    if (n <= 1) return 0;
    nn = (n-1) * (n-1);

    /* */
    if ((a = new_matrix(nn, nn)) == NULL) {
        fprintf(stderr, "cannot allocate a matrix\n");
        exit(1);
    }
    if ((f = new_vector(nn)) == NULL) {
        fprintf(stderr, "cannot allocate a vector\n");
        exit(1);
    }

    /* INITIAL CLEAR */
    for (i = 0; i < nn; i++)
        for (j = 0; j < nn; j++)
            a[i][j] = 0.0;

    /* COEFFICIENT MATRIX */
    h = 1.0 / n;
    h2 = h * h;
    for (i = 1; i < n; i++) {
        for (j = 1; j < n; j++) {
            ij = (n-1) * (j-1) + i - 1;
            ij1 = ij - (n-1);
            ij2 = ij + (n-1);
            a[ij][ij] = 4.0 / h2;
            if (i != 1) a[ij][ij-1] = - 1.0 / h2;
            if (j != 1) a[ij][ij1] = - 1.0 / h2;
            if (i != n-1) a[ij][ij+1] = - 1.0 / h2;
            if (j != n-1) a[ij][ij2] = - 1.0 / h2;
        }
    }
```

```
    /* FREE TERM */
    for (i = 0; i < nn; i++)
        f[i] = 1.0;
    /* CALCULATION */
    gauss(a,f,nn);
    /* OUTPUT */
    printf(" MESH SIZE=%12.4e\n", h);
    printf(" ** NODAL VALUES OF SOLUTION **\n");
    for (i = 0; i < 5; i++)
        printf("  I     U(I)    ");
    printf("\n");
    for (i = 0; i < nn; i++) {
        printf("%3d%12.4e ", i, f[i]);
        if (i % 5 == 4) printf("\n");
    }
    printf("\n");
    return 0;
}

void gauss(matrix a, vector f, int n)
{
    int i,j,k,nm1;
    double aa;
    nm1 = n - 1;
    /* FORWARD ELIMINATION */
    for (i = 0; i < nm1; i++) {
        for (j = i + 1; j < n; j++) {
            aa = a[j][i] / a[i][i];
            for (k = i + 1; k < n; k++)
                a[j][k] = a[j][k] - aa * a[i][k];
            f[j] = f[j] - aa * f[i];
        }
    }
    /* BACKWARD SUBSTITUTION */
    f[nm1] = f[nm1] / a[nm1][nm1];
    for (i = n - 2; i >= 0; i--) {
        for (j = i + 1; j < n; j++)
            f[i] = f[i] - a[i][j] * f[j];
        f[i] = f[i] / a[i][i];
    }
}
```

第4章　円盤、円環における差分法

4.1　展望

以前は極座標変換をすれば良い、つまり 2 次元であれば

$$x = r\cos\theta, \quad y = r\sin\theta$$

によって、円盤領域 $\{(x,y)\in\mathbf{R}^2; x^2+y^2<R^2\}$ を長方形領域 $\{(r,\theta)\in\mathbf{R}^2; r\in[0,R),\ \theta\in[0,2\pi]\}$ に写像して、そちらで差分方程式を立てて解くことでうまく行くと信じていた。しかし実際に熱方程式や波動方程式を解くプログラムを作成して実験してみて、安定性の問題が生じることが分かった。それからは Shortley-Weller 近似や、有限要素法にもアンテナを張っている。

4.2　差分近似について

4.2.1　2 次元の場合

$$\triangle u = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial\theta^2}.$$

$r\neq 0$ において、$\triangle u$ を差分近似することは簡単であるが、$r=0$ における取り扱いには注意が必要である。

$$\triangle u(0) = 4\frac{u_{\mathrm{mean}} - u(0)}{(\Delta r)^2} + O(\Delta r^2)$$

が成り立つ。ただし u_{mean} は $r=\Delta r$ における u の平均値を表わす。(詳しくは桂田 [15] の 9 章を見よ。)

$r=0$ がない場合は、$R=\log r$ と変数変換すると

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial u}{\partial r}$$

は

$$e^{2R}\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial R^2}.$$

4.2.2　3 次元の場合

$$\triangle u = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\cot\theta}{r}\frac{\partial u}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial\theta^2} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 u}{\partial\phi^2}.$$

$$\triangle u(0) = 6\frac{u_{\mathrm{mean}} - u(0)}{(\Delta r)^2} + O(\Delta r^2)$$

ただし u_{mean} は $r = \Delta r$ における u の平均値を表わす。

$r = 0$ がない場合は、$u = w/r$ と従属変数の変数変換を行なうと

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial u}{\partial r}$$

は

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial^2 w}{\partial r^2}$$

に変換される。

4.3 2次元円盤領域における Poisson 方程式の Dirichlet 境界値問題

$\Omega = \{(x,y) \in \mathbf{R}^2; x^2+y^2 < R^2\}$, $f\colon \Omega \to \mathbf{R}$ が与えられたとき、

$$-\triangle u = f \quad \text{in } \Omega, \tag{4.1}$$

$$u = 0 \quad \text{on } \Gamma := \partial\Omega \tag{4.2}$$

を解くことを考える。

$N_r, N_\theta \in \mathbf{N}$ に対して、

$$h_r := \frac{R}{N_r}, \quad h_\theta := \frac{2\pi}{N_\theta}, \quad \omega := \{1,2,\cdots,N_r-1\} \times \{0,1,\cdots,N_\theta-1\}$$

とおき、

$$r_i := ih_r \quad (i = 0,1,\ldots,N_r), \quad \theta_j := jh_\theta \quad (j = 0,1,\ldots,N_\theta - 1)$$

とおく。なお、

$$\theta_{-1} = \theta_{N_\theta-1}, \quad \theta_{N_\theta} = \theta_0 = 0$$

と約束する。

(4.1) は極座標変換すると

$$-\left(u_{rr} + \frac{1}{r}u_r + \frac{1}{r^2}u_{\theta\theta}\right) = f$$

になるので、対応する差分方程式として

$$-\left[\frac{U_{i+1,j} - 2U_{ij} + U_{i-1,j}}{h_r^2} + \frac{1}{r_i}\frac{U_{i+1,j} - U_{i-1,j}}{2h_r} + \frac{1}{r_i^2}\frac{U_{i,j+1} - 2U_{ij} + U_{i,j-1}}{h_\theta^2}\right] = f_{ij} \quad ((i,j) \in \omega)$$

が得られる。これから

$$\left(\frac{2r_i^2}{h_r^2} + \frac{2}{h_r^2}\right)U_{ij} - \left(\frac{r_i^2}{h_r^2} + \frac{r_i}{2h_r}\right)U_{i+1,j} - \left(\frac{r_i^2}{h_r^2} - \frac{r_i}{2h_r}\right)U_{i-1,j} - \frac{1}{h_\theta^2}U_{i,j+1} - \frac{1}{h_\theta^2}U_{i,j-1} = r_i^2 f_{ij}.$$

すなわち

$$(a_i + 2d)\,U_{ij} - b_i U_{i+1,j} - c_i U_{i-1,j} - dU_{i,j+1} - dU_{i,j-1} = r_i^2 f_{ij} \quad ((i,j) \in \omega),$$

ただし

$$b_i := \frac{r_i^2}{h_r^2} + \frac{r_i}{2h_r}, \quad c_i := \frac{r_i^2}{h_r^2} - \frac{r_i}{2h_r}, \quad a_i := b_i + c_i, \quad d := \frac{1}{h_\theta^2}$$

とおいた。一方原点 $(0,0)$ での値 U_0 は、

$$\frac{1}{h_r^2}\left(U_0 - \frac{1}{N_\theta}\sum_{j=0}^{N_\theta-1} U_{1,j}\right) = f_0.$$

$$e := \frac{1}{N_\theta h_r^2}$$

とおくと、

$$N_\theta e U_0 - e\sum_{j=0}^{N_\theta-1} U_{1,j} = f_0.$$

これは行列とベクトルによる方程式

$$(\Lambda + \Theta)\boldsymbol{U} = \boldsymbol{f}$$

で表される。

$$\Theta := \left(\begin{array}{c|cccc|c|ccccc}
0 & 0 & \cdots & & 0 & & & & & & \\ \hline
0 & 2d & -d & & -d & & & & & & \\
0 & -d & 2d & \ddots & & & & & & & \\
\vdots & & \ddots & \ddots & -d & & & & & & \\
0 & -d & & -d & 2d & & & & & & \\ \hline
 & & & & & \ddots & & & & & \\ \hline
 & & & & & & 2d & -d & & & -d \\
 & & & & & & -d & 2d & -d & & \\
 & & & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & & & & & & -d & 2d & -d \\
 & & & & & & -d & & & -d & 2d
\end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|ccc}
0 & \mathbf{0}^T & & \\ \hline
\mathbf{0} & D & & \\
 & & \ddots & \\
 & & & D
\end{array}\right),$$

$$\Lambda := \left(\begin{array}{c|ccc|ccc|ccc|ccc|ccc}
N_\theta e & -e & \cdots & -e & & & & & & & & & & & & \\ \hline
-c_1 & a_1 & & & -b_1 & & & & & & & & & & & \\
\vdots & & \ddots & & & \ddots & & & & & & & & & & \\
-c_1 & & & a_1 & & & -b_1 & & & & & & & & & \\ \hline
 & -c_2 & & & a_2 & & & -b_2 & & & & & & & & \\
 & & \ddots & & & \ddots & & & \ddots & & & & & & & \\
 & & & -c_2 & & & a_2 & & & -b_2 & & & & & & \\ \hline
 & & & & & & & \ddots & & & & & & & & \\
 & & & & & & & & \ddots & & & & & & & \\
 & & & & & & & & & \ddots & & & & & & \\ \hline
 & & & & & & & -c_{m-1} & & & a_{m-1} & & & -b_{m-1} & & \\
 & & & & & & & & \ddots & & & \ddots & & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & -c_{m-1} & & & a_{m-1} & & & -b_{m-} \\ \hline
 & & & & & & & & & & -c_m & & & a_m & & \\
 & & & & & & & & & & & \ddots & & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & & & -c_m & & & a_m
\end{array}\right.$$

$$m := N_r - 1, \quad N := (N_r - 1)N_\theta + 1,$$

$$\Theta(2:N, 2:N) = I_m \otimes D,$$

$$\Lambda(2:N, 2:N) = \begin{pmatrix} a_1 & -b_1 & & & \\ -c_2 & a_2 & -b_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -c_{m-1} & a_{m-1} & -b_{m-1} \\ & & & -c_m & a_m \end{pmatrix} \otimes I_{N_\theta}$$

付 録A　1次元Poisson方程式

A.1　同次 Dirichlet 境界条件

$$-u''(x) = f(x) \quad (x \in (0,1)), \quad u(0) = u(1) = 0.$$

Green 関数による解は

$$u(x) = \int_0^1 G(x,y) f(y)\,dy, \quad G(x,y) := \begin{cases} y(1-x) & (0 \le y \le x \le 1) \\ x(1-y) & (0 \le x \le y \le 1). \end{cases}$$

Fourier 級数による解は

$$u(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{b_n}{n^2\pi^2} \sin n\pi x, \quad b_n := 2\int_0^1 f(x) \sin n\pi x\,dx \quad (n \in \mathbf{N}).$$

固有値、固有関数は

$$\lambda_n = n^2\pi^2, \quad \varphi_n(x) = \sin n\pi x \quad (n \in \mathbf{N}).$$

$N \in \mathbf{N}$ に対して、$h := 1/N$ とおくと、素直に作った差分方程式は

$$\text{(A.1)} \qquad \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{N-2}) \\ f(x_{N-1}) \end{pmatrix}.$$

$$\begin{aligned} &\sin n\pi x_{j+1} - 2\sin n\pi x_j + \sin n\pi x_{j-1} \\ &\quad = \sin n\pi(x_j + h) - 2\sin n\pi x_j + \sin n\pi(x_j - h) \\ &\quad = \sin n\pi x_j \cos n\pi h + \cos n\pi x_j \sin n\pi h - 2\sin n\pi x_j + \sin n\pi x_j \cos n\pi h - \cos n\pi x_j \sin n\pi h \\ &\quad = 2(\cos n\pi h - 1)\sin n\pi x_j \\ &\quad = -4\sin^2(n\pi h/2)\sin n\pi x_j \end{aligned}$$

であるから

$$-\frac{1}{h^2}\left(\sin n\pi x_{j+1} - 2\sin n\pi x_j + \sin n\pi x_{j-1}\right) = \frac{4\sin^2(n\pi h/2)}{h^2} \sin n\pi x_j.$$

$$\mu_n = \frac{4\sin^2(n\pi h/2)}{h^2}, \quad \boldsymbol{v}_n := \begin{pmatrix} \sin n\pi x_1 \\ \sin n\pi x_2 \\ \vdots \\ \sin n\pi x_{N-2} \\ \sin n\pi x_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin\dfrac{n\pi}{N} \\ \sin\dfrac{2n\pi}{N} \\ \vdots \\ \sin\dfrac{(N-1)n\pi}{N} \end{pmatrix} \quad (n = 1, 2, \dots, N-1)$$

とおき、(A.1) の左辺の行列を A とすると、

$$A\boldsymbol{v}_n = \mu_n \boldsymbol{v}_n, \quad \boldsymbol{v_n} \neq \boldsymbol{0}, \quad 0 < \mu_1 < \mu_2 < \cdots < \mu_{N-1}$$

が成り立つ[1]。$\boldsymbol{v}_n$ は、実対称行列 A の固有値 μ_n (相異なる) に属する固有ベクトルであり、互いに直交するので、直交基底をなす。(固有関数は、離散化する前と同じ $\sin n\pi x$ で、そのうち独立なものは $n = 1, 2, \cdots, N-1$ の $N-1$ 個だけ、というのが理解しやすいかもしれない)。『熱方程式に対する差分法』[2] を見よ。

```
% 1 次元 Laplacian (Dirichlet 境界条件) の固有値のテスト
function [a,p]=LD_eigen(N)
  e=ones(N-1,1);
  a=spdiags([-e,2*e,-e],-1:1,N-1,N-1);
  h=1/N;
  x=(h:h:(N-1)*h)';
  p=zeros(N-1,N-1);
  for n=1:N-1
    p(:,n)=sin(n*pi*x);
  end
  d=p'*a*p;
  for i=1:N-1
    for j=1:N-1
      if abs(d(i,j)) < 1e-12
        d(i,j)=0;
      endif
    end
  end
  d
```

```
> LD_eigen(8);
d =

   0.60896    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000
   0.00000    2.34315    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000
   0.00000    0.00000    4.93853    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000
   0.00000    0.00000    0.00000    8.00000    0.00000    0.00000    0.00000
   0.00000    0.00000    0.00000    0.00000   11.06147    0.00000    0.00000
   0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000   13.65685    0.00000
   0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000   15.39104

octave-3.2.2.exe:6:C:\cygwin\home\mk
>
```

A.2 同次 Neumann 境界条件

$$-u''(x) = f(x) \quad (x \in (0,1)), \quad u'(0) = u'(1) = 0.$$

[1] $Nh = 1$ ゆえ $0 < \dfrac{1 \cdot \pi h}{2} < \dfrac{2 \cdot \pi h}{2} < \cdots < \dfrac{(N-1)\pi h}{2} < \dfrac{\pi}{2}$ に注意せよ。

[2] http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/labo/text/heat-fdm-1.pdf

これは解の一意性がない (定数だけの不定さがある)。とりあえず一つ解を求めるということで考える。Fourier 級数を用いると

$$u(x)=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{a_n}{n^2\pi^2}\cos n\pi x,\quad a_n=2\int_0^1 f(x)\cos n\pi x\,dx\quad (n\in\mathbf{N}).$$

(この解は $\displaystyle\int_0^1 u(x)\,dx=0$ という性質を持つ。その条件の下で一意性がある。) 固有値・固有関数は

$$\lambda_n=n^2\pi^2,\quad \varphi_n(x)=\cos n\pi z\quad (n=0,1,2,\dots).$$

仮想格子点の技法を用いると、差分方程式は

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -2 & & & \mbox{\Large 0} \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ \mbox{\Large 0} & & & -2 & 2 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_{N-1}) \\ f(x_N)\end{pmatrix}.$$

あるいは (最初と最後の成分に 1/2 をかけて)

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \mbox{\Large 0} \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ \mbox{\Large 0} & & & -1 & 1 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} f(x_0)/2 \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_{N-1}) \\ f(x_N)/2\end{pmatrix}. \tag{A.2}$$

$$\begin{aligned}&\cos n\pi x_{j+1}-2\cos n\pi x_j+\cos n\pi x_{j-1}\\ &\quad=\cos n\pi x_j\cos n\pi h-\sin n\pi x_j\sin n\pi h-2\cos n\pi x_j+\cos n\pi x_j\cos n\pi h+\sin n\pi x_j\sin n\pi h\\ &\quad=2(\cos n\pi h-1)\cos n\pi x_j\\ &\quad=-4\sin^2(n\pi h/2)\cos n\pi x_j\end{aligned}$$

であるから

$$-\frac{1}{h^2}\left(\cos n\pi x_{j+1}-2\cos n\pi x_j+\cos n\pi x_{j-1}\right)=\frac{4\sin^2(n\pi h/2)}{h^2}\cos n\pi x_j.$$

ゆえに

$$\mu_n=\frac{4\sin^2(n\pi h/2)}{h^2},\quad \boldsymbol{u}_n:=\begin{pmatrix}\cos n\pi x_0\\ \cos n\pi x_1\\ \vdots\\ \cos n\pi x_{N-1}\\ \cos n\pi x_N\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1\\ \cos\dfrac{n\pi}{N}\\ \cos\dfrac{2n\pi}{N}\\ \vdots\\ \cos\dfrac{(N-1)n\pi}{N}\\ \cos\dfrac{Nn\pi}{N}\end{pmatrix}\qquad (n=0,1,2,\dots,N)$$

とおき、(A.2) の左辺の行列を A とおくと、

$$A\boldsymbol{u}_n = \mu_n \boldsymbol{u}_n, \quad \boldsymbol{u_n} \neq \boldsymbol{0}, \quad 0 = \mu_0 < \mu_1 < \mu_2 < \cdots < \mu_{N-1} < \mu_N = \frac{4}{h^2}$$

が成り立つ[3]。$\boldsymbol{u}_n$ は、実対称行列 A の固有値 μ_n (相異なる) に属する固有ベクトルであり、互いに直交するので、直交基底をなす。(固有関数は、離散化する前と同じ $\cos n\pi x$ で、そのうち独立なものは $n = 0, 1, 2, \cdots, N$ の $N+1$ 個だけ、というのが理解しやすいかもしれない)。『熱方程式に対する差分法』[4] を見よ。

```
% LN_eigen.m --- 1次元 Laplacian (Neumann境界条件) の固有値のテスト
function [a,p]=LN_eigen(N)
  e=ones(N+1,1);
  d=2*e; d(1)=1; d(N+1)=1;
  a=spdiags([-e,d,-e],-1:1,N+1,N+1);
  h=1/N;
  x=(0:h:1)';
  p=zeros(N+1,N+1);
  for n=0:N
    p(:,n+1)=cos(n*pi*x);
  end
  d=p'*a*p;
  for i=1:N+1
    for j=1:N+1
      if abs(d(i,j)) < 1e-12
        d(i,j)=0;
      endif
    end
  end
  d
```

```
> LN_eigen(8);
d =

   0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000
   0.00000    0.60896    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000
   0.00000    0.00000    2.34315    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000
   0.00000    0.00000    0.00000    4.93853    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000
   0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    8.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000
   0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000   11.06147    0.00000    0.00000    0.00000
   0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000   13.65685    0.00000    0.00000
   0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000   15.39104    0.00000
   0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000    0.00000   32.00000

octave-3.2.2.exe:5:C:\cygwin\home\mk
```

A.3 周期境界条件

$$-u''(x) = f(x) \quad (x \in (-\pi, \pi)), \quad u(-\pi) = u(\pi), \quad u'(-\pi) = u'(\pi).$$

[3] $Nh = 1$ ゆえ $0 = \dfrac{0 \cdot \pi h}{2} < \dfrac{1 \cdot \pi h}{2} < \dfrac{2 \cdot \pi h}{2} < \cdots < \dfrac{(N-1)\pi h}{2} < \dfrac{N\pi h}{2} = \dfrac{\pi}{2}$ に注意せよ。

[4] http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/labo/text/heat-fdm-1.pdf

この問題についても解の一意性は成り立たない。

$$a_n := \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\cos nx\,dx, \quad b_n := \frac{1}{\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\sin nx\,dx$$

とおく。まず

$$\int_{-\pi}^{\pi} f(x)\,dx = -\int_{-\pi}^{\pi} u''(x)\,dx = -\left[u'(x)\right]_{-\pi}^{\pi} = -\left(u'(\pi) - u'(-\pi)\right) = 0$$

であるから、$a_0 = 0$. このことに注意すると、

$$u(x) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2}\left(a_n\cos nx + b_n\sin nx\right) \quad (x \in [-\pi, \pi])$$

とおくとき、

$$-u''(x) = \sum_{n=1}^{\infty}\left(a_n\cos nx + b_n\sin nx\right) = f(x) \quad (x \in [-\pi, \pi])$$

が成り立つことが分かる。

$N \in \mathbf{N}$ に対して、$h := 2\pi/N$ とおく。自然に差分方程式を作って

$$\text{(A.3)} \qquad \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & -1 \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ -1 & & & -1 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_{N-2}) \\ f(x_{N-1}) \end{pmatrix}.$$

これまでと同様に

$$-\frac{1}{h^2}\left(\cos nx_{j+1} - 2\cos nx_j + \cos nx_{j-1}\right) = \frac{4\sin^2(nh/2)}{h^2}\cos nx_j,$$
$$-\frac{1}{h^2}\left(\sin nx_{j+1} - 2\sin nx_j + \sin nx_{j-1}\right) = \frac{4\sin^2(nh/2)}{h^2}\sin nx_j.$$

ゆえに

$$\mu_n := \frac{4\sin^2(nh/2)}{h^2}, \quad \boldsymbol{u}_n := \begin{pmatrix} \cos nx_0 \\ \cos nx_1 \\ \vdots \\ \cos nx_{N-1} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{v}_n := \begin{pmatrix} \sin nx_0 \\ \sin nx_1 \\ \vdots \\ \sin nx_{N-1} \end{pmatrix}$$

とおき、(A.3) の左辺の行列を A とおくと、

$$A\boldsymbol{u}_n = \mu_n\boldsymbol{u}_n, \quad A\boldsymbol{v}_n = \mu_n\boldsymbol{v}_n,$$
$$0 = \mu_0 < \mu_2 < \cdots < \mu_{[(N+1)/2]} = \frac{1}{h^2}.$$

が成り立つ[5]。

$0 \le n \ll N$ のとき

$$\mu_n \risingdotseq n^2$$

であることを注意しておく。

$$\mu_0 = 0, \quad \boldsymbol{v}_0 = \mathbf{0}$$

であって、μ_0 の固有ベクトルは $\boldsymbol{u}_0$ の定数倍のみである。N が偶数ならば μ_j $(1 \le j \le N/2)$ は二重の固有値である。N が奇数ならば μ_j $(1 \le j \le N-1/2)$ は二重の固有値で、$\mu_{(N+1)/2}$ は....

[5] $Nh = 2\pi$ ゆえ、$0 = \dfrac{0\cdot h}{2} < \dfrac{1\cdot h}{2} < \cdots < \dfrac{N/2\cdot h}{2} = \dfrac{\pi}{2}$

付 録B　行列の既約性

色々な議論を別の文献任せにすると割り切るとしても、出て来る言葉の定義が分からないのは気持ちが悪いので、行列の既約性の定義を速習しておこう。

既約という言葉が出て来ない数値解析、線形代数のテキストも少なくない。

載っているテキストとして、山本 [5], [4], 齊藤 [16], 伊理 [17], [18], を紹介しておく。

行列の既約性は、まず可約であることを定義して、既約であるとは可約でないこと、と定義してあるテキストが多い。ここでは [4] の説明を採用する (実質的に他のテキストにも書いてあるが、その書き方が一番敷居が低いと思われる)。

$n \geq 2$ とするとき、n 次正方行列 $A = (a_{ij})$ については、次のように特徴づけられる。

$a_{ij} \neq 0$ なる要素が存在するとき、「i から j に至る道 $i \to j$ がある」ということにする。任意の i, j $(i \neq j)$ に対して、i から j への道の列 $i \to i_1$, $i_1 \to i_2$, $\cdots$, $i_k \to j$ が存在するとき、そのときに限り、A は既約である。

念のため: $(1,1)$ 行列 (つまりスカラー) a については、a が既約 $\overset{\text{def.}}{\Leftrightarrow}$ $a \neq 0$.

既約性の判定には、成分が 0 であるか、そうでないかしか関係しない。0 でない数を $*$ と書くことにする。また行列の成分で何も書かないところは 0 とする。

例 B.0.1 三重対角行列

$$K = (k_{ij}) = \begin{pmatrix} * & * & & & \\ * & * & * & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & * & * & * \\ & & & * & * \end{pmatrix}$$

は既約である。実際、対角線の 1 つ上が非零であるから

$$1 \to 2 \to \cdots \to n-1 \to n.$$

対角線の 1 つ下が非零であるから

$$1 \leftarrow 2 \leftarrow \cdots \leftarrow n-1 \leftarrow n.$$

ゆえに

$$1 \leftrightarrow 2 \leftrightarrow \cdots \leftrightarrow n-1 \leftrightarrow n.$$

例 B.0.2 K_1, K_2 が上の例のような三重対角行列とするとき、

$$A = \begin{pmatrix} K_1 & -I \\ -I & K_2 \end{pmatrix}$$

は既約である。まず対角ブロックを見ることで

$$1 \leftrightarrow 2 \leftrightarrow \cdots n-1 \leftrightarrow n,$$

$$n+1 \leftrightarrow n+2 \leftrightarrow \cdots 2n-1 \leftrightarrow 2n.$$

右上にある $-I$ によって、$\{1,2,\cdots,n\}$ から $\{n+1,n+2,\cdots,2n\}$ への道がある (例えば $a_{1,n+1} \neq 0$ より $1 \to n+1$)。

また、左下にある $-I$ によって、$\{n+1,n+2,\cdots,2n\}$ から $\{1,2,\cdots,n\}$ への道がある (例えば $a_{n+1,1} \neq 0$ より $n+1 \to 1$)。

ゆえに $\{1,2,\cdots,2n\}$ の各点から各点への道がある。ゆえに A は既約である。

ブロックの数が増えた

$$A = \begin{pmatrix} K_1 & -I & & & & \\ -I & K_2 & & & & \\ & -I & K_3 & -I & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -I & K_{m-1} & -I \\ & & & & -I & K_m \end{pmatrix}$$

の場合も、同様の議論で A が既約であることを示せる。■

以上の議論から、Poisson 方程式の Dirichlet 境界値問題、Neumann 境界値問題の差分法に現れる係数行列はともに既約であることが分かる。

参考文献

[1] 桂田祐史：2 次元 Poisson 非同次 Dirichlet 境界値問題を解く差分法プログラム (MATLAB), https://m-katsurada.sakura.ne.jp/labo/text/poisson2d-nonhomo.pdf (2024/8/24).

[2] 桂田祐史：2 次元 Poisson 非同次 Neumann 境界値問題を解く差分法プログラム (MATLAB), 準備中 (色々なことが分かってきてまとまらないので) (2024/8/25).

[3] 桂田祐史：1 次元の Poisson 方程式, https://m-katsurada.sakura.ne.jp/labo/text/poisson1d.pdf (2024/8/25).

[4] 山本哲朗：境界値問題と行列解析, 朝倉書店 (2014/11/10).

[5] 山本哲朗(てつろう)：数値解析入門 [新訂版], サイエンス社 (2003/6/1), 1976 年初版発行の定番本の待望の改訂版.

[6] 山本哲朗：2 点境界値問題の数理, コロナ社 (2006).

[7] 山本哲朗：行列解析の基礎 — Advanced 線形代数, サイエンス社 (2010/12/25), 電子版が 2019/3/10 に発行されている.

[8] Serre, D.: *Matrices: Theory and Applications, Second Edition*, Springer (2002/8/21).

[9] John, F.: *Lectures on Advanced Numerical Analysis*, Gordon and Breach, Science Publishers, Inc. (1967), 邦訳: F. ジョン著, 藤田宏・名取亮訳, 数値解析講義, 産業図書 (1975).

[10] 田端正久：偏微分方程式の数値解法, 岩波書店 (2010), もともとは岩波講座応用数学の「微分方程式の数値解法 II」(1994) であった。

[11] 菊地文雄, 山本昌宏：微分方程式と計算機演習, 山海堂 (1991).

[12] 森正武, 杉原正顯(まさあき), 室田一雄(むろた かずお)：線形計算, 岩波講座 応用数学, 岩波書店 (1994).

[13] 桂田祐史：熱方程式に対する差分法 I — 区間における熱方程式 —, https://m-katsurada.sakura.ne.jp/labo/text/heat-fdm-1.pdf (1998 年〜).

[14] 桂田祐史：連立 1 次方程式 III, https://m-katsurada.sakura.ne.jp/labo/text/linear-eq-3.pdf (2002〜).

[15] 桂田祐史：熱方程式に対する差分法 II — 円盤における熱方程式 —, https://m-katsurada.sakura.ne.jp/labo/text/heat-fdm-2.pdf (1998〜).

[16] 齊藤宣一：数値解析入門, 東京大学出版会 (2012/10/23), 基本的な数値計算法に対する現代的な優れた教科書.『誤植の訂正、内容の補足説明をしてあるノート「数値解析入門」補講』が http://www.infsup.jp/saito/materials/na_book_appendix1.pdf で公開されている。

[17] 伊理正夫（いり まさお）：一般線形代数, 岩波書店 (2003), 伊理正夫, 線形代数 I, II, 岩波講座応用数学, 岩波書店 (1993, 1994) の単行本化.

[18] 伊理正夫（いり まさお）：線形代数汎論, 朝倉書店 (2009),「一般線形代数」のリニューアル.