数理解析研究所講究録
第520巻 1984年 153-165

偏微分方程式に関する問題解決のため数式処理と数値計算を組み合わせたシステム

慶大理工　柴山　誠 (Makoto Shibayama)
慶大理工　永田守男 (Morio Nagata)

要旨

本論文は，現在は別々の分野で研究されている数式処理と数値計算の一つの交わり方について論じ，実際にそれをシステムとして計算機上に実現した経験を報告している。

科学者や技術者が自分問題解決に対して計算機を使う時は，何らかの式を作成してそれを数値的に解くというプロセスを経ることが多い。しかし，このプロセスの初期段階として，この式を計算機の処理しやすい形に人間が変形（変換）しなければならない。そして，式の変形から数値計算までの全プロセスを支援するシステムは現在のところ存在しない。

そこで，「偏微分方程式の差分法による数値解法」をケース・スタディとして，数式処理と数値計算を組み合わせることにより，科学者や技術者の問題解決における全プロセスを支援するシステムを実現することにした。

本システムでは，基本的な数式処理機能と数値計算の機能を同一のシステム内で実現している他に次の二つの機能と情報を同時に持っている。一つは，数値計算のアルゴリズムを利用するのに必要な差分化についての情報と差分処理機能であり，もう一つは，必要な数値計算を計算機で実行するためのプログラム自動生成機能である。

ここで提案・実現した方法は，数値計算とその前処理としての数式処理の組み合わせ方には一応の成功をみた。しかし，数値計算の結果を利用して数式処理を行なう等他のアプローチも考えられ，数式処理と数値計算の融合の仕方にはまだまだ研究の余地が残されていると思われる。

1．はじめに

科学者や技術者が自分の問題解決に対して計算機を利用する時には，何らかの式を作成してこれを数値的に解くというプロセスを経ることが多い。しかし，この過程では式（微分方程式等）を計算機で処理しやすい形に『人間』が変形（変換）を行ない，かつ，その変形された方程式の係数だけをある定められた書式に合わせて計算機に入力する場合がほとんどである。こうした式の変形はREDUCE[1]，MACSYMA[2]といった数式処理システムを使えば，現在でも計算機で行なうこと

は可能である。しかし，前処理としての「数式処理」と主処理としての「数値計算」が連続的に行なわれるのではなく，まず，数式処理システムを使って式の変形（変数変換等）を行ない，その結果を人間がプログラム（Fortran 等）に組み込んで計算するという様に不連続的に行なわれている。又，こうした仕事をするためには，数値計算を実際に行なうためのノウハウもいろいろと知らなければならない。さらにその上，計算機を道具としてしか使っていない人にとって，いくつものプログラミング言語やシステムを覚えるのは大変に面倒な事であるし，数式処理システムは今のところどこでも使えるというものではない。

そこで，文字と数値の区別なく使えるという数式処理の利点を数値解析のための前処理としても活かすための一手段として『数式処理と数値計算を組み合わせて，画面との会話形式の簡単な操作だけで利用者が自分の問題解決に利用出来るシステム』を試作してみることにした。

単に『問題解決』と言うと，とても範囲が広いが，科学上の問題で2個以上の独立変数に関する変化率を含む問題は，数式化すると，大概，偏微分方程式又は連立偏微分方程式になる。その中でも，2次元2階偏微分方程式

$$a\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+b\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+c\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+d\frac{\partial u}{\partial x}+e\frac{\partial u}{\partial y}+fu+g=0$$

は多くの場合，物理学の保存原理の一つを数式化したものであるから，他の形の方程式より頻繁に現われる[3][4]。

そこで，ここで取り上げる問題解決の対象として『2次元2階偏微分方程式の解を差分法により数値的に求める』こととした[5]。

2．システムの概要

2.1 システム構成

本システムの構成を図1に示す。システムは，一般的な数式処理を行なう数式処理部，差分化に必要な情報・機能を持つ差分処理部，差分化された式を実行可能なプログラムに変換するプログラム自動生成部及び全体の処理の流れをコントロールする制御部から成っている。

2.2 システムの概略

本システムはUX−300（OS/UX 2.0）の上でC言語によって書かれており，利用者へのメッセージは漢字カナまじり文を用いている。

利用者は，本システムと会話形式の操作をすることにより問題を入力する。システムは，入力された偏微分方程式を内

部形（LispのS式のような形）に変換し，同様な形式で持っている差分公式で偏導関数を置き換える。次に，数式処理機能を用いてこの差分化された方程式を簡素化し，差分方程式の型を調べる。そして，元の偏微分方程式の型，差分方程式の型等から実際に数値計算を行なうためのプログラムの型を判断し，Fortranのプログラムを生成する。初期条件・境界条件に偏導関数が含まれている場合にはこれも差分化するが，その結果鏡像点が現われた時にはこれを消去する。

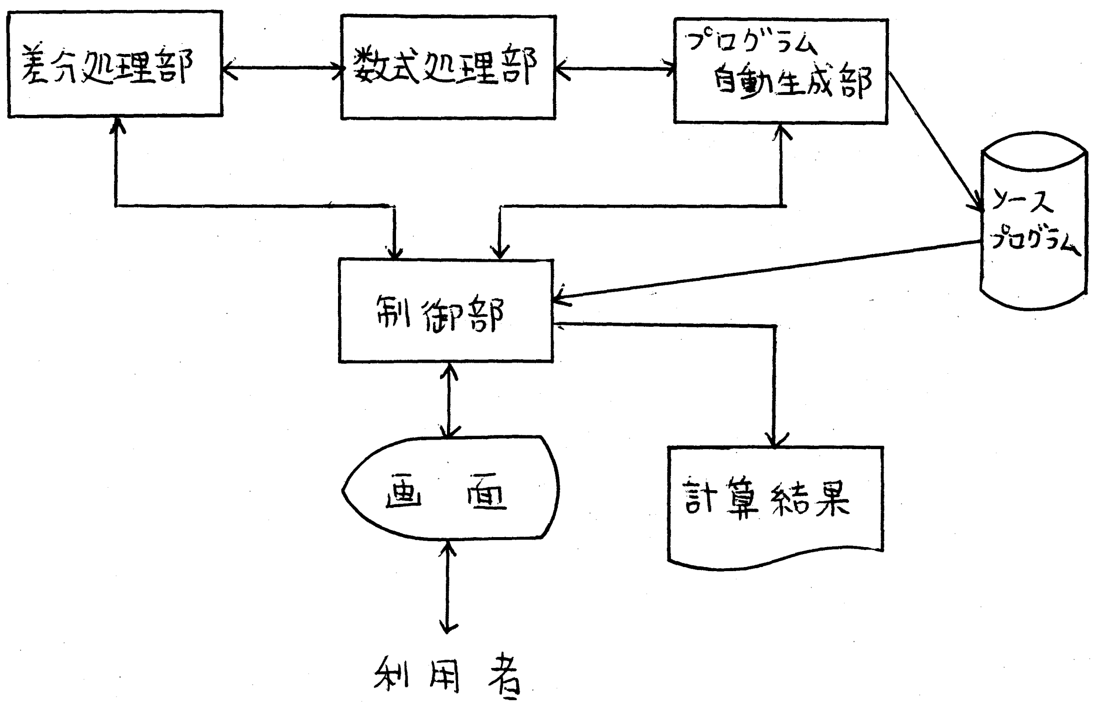


図1　システム構成図

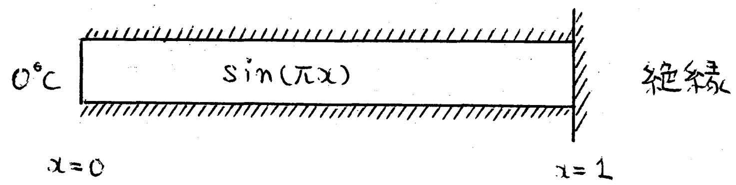
この様な処理を計算機に行なわせるために，数値計算のアルゴリズム（この場合には差分法のアルゴリズム）を系統的に整理された知識の形式で計算機の内部に取り入れ，この知識を基にして全体の処理の流れが制御されている。又，プログラム自動生成のために，テンプレートを用意している。

3．実行例

具体例を用いて入出力形式を説明する。問題は次に示すものである。

問題

長さ1の棒の側面が絶縁され，初期温度が$\sin(\pi x)$（$0 \leqq x \leqq 1$）であるとする。右端（$x=1$）は絶縁されており，左端（$x=0$）は0°Cに保たれているとする。この時，この棒の温度変化を調べよ。



この問題を数式化し，無次元化を行なうと次に示す偏微分方程式になる。

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial u}{\partial t} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (0 < t < \infty,\ 0 < x < 1) \\
\text{初期条件} \\
\quad u(x,0) = \sin(\pi x) \quad (0 \leqq x \leqq 1) \\
\text{境界条件} \\
\quad u(0,t) = 0 \\
\quad \qquad \qquad \qquad \qquad (0 < t < \infty) \\
\quad \dfrac{\partial}{\partial x} u(x,t) \Big|_{x=1} = 0
\end{cases}
$$

この問題のシステムへの入力例を以下に示す。

```
定数があれば、『名前 := 定数（式）』の形式で入力して下さい。
もし無ければRETURNキーを押して下さい。
const>>

偏微分方程式を入力して下さい。
equat>> Ut = Uxx

この偏微分方程式の成立する領域を入力して下さい。
但し、πはpaiを∞はinfを用いて下さい。
x : [0,1]
t : [0,inf]

計算する領域を入力して下さい。但し、先に入力したもの
と同じ時にはRETURNキーを押して下さい。
x :
t : [0,0.12]

初期条件を入力して下さい。但し、初期条件が無い時は
RETURNキーを押して下さい。
init>> U = sin(pai*x)
init>>
```

```
境界条件を『式,(条件)』の形式で入力して下さい。
但し、境界条件が無い時はRETURNキーを押して下さい。
bound>> U = 0 ,(x = 0)
bound>> Ux = 0 ,(x = 1)
bound>>

方程式の偏導関数に対する差分を選択して下さい。
但し、前進差分→1、中心差分→2、後退差分→3、その他→4
とし、各default値で良い時はRETURNキーを押して下さい。
Ut : 1
Uxx : 2

境界条件の偏導関数に対する差分を選択して下さい。
但し、前進差分→1、中心差分→2、後退差分→3
とし、中心差分で良い時はRETURNキーを押して下さい。
Ux : 2

きざみ巾（計算用）を入力して下さい。
Δx : 0.1
Δt : 0.004

きざみ巾（出力用）を入力して下さい。但し、
計算用と同じ時にはRETURNキーを押して下さい。
Δx : 0.2
Δt : 0.012
```

図2　　入力例

この様な入力を行なうと，具体的には次のような数式処理を計算機が行なう。

まず，u_t ，u_{xx} を各々前進差分及び中心差分の公式で置き換えて

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

とし，これを

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

と変形する。次に，境界条件のu_xを中心差分の公式で置き換えた後に

$$u_{n+1,j}=u_{n-1,j}\ \text{------------------------------}②$$

と変形する。②式には$(n+1,j)$における値を表わす点（鏡像点）があるので，①，②式よりこれを消去し

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

を導く。

この様な数式処理を行なった後，2．2に示した処理を行ない，最終的に図3に示す計算結果をプリンタに出力する。

又，作成されたFortranのプログラムも利用者に提供しているのでこれに手を加えることや，各自のサブルーチン等とのリンクは容易である。

4．評価

本システムは，2次元2階偏微分方程式のうち線形のものは放物型・双曲型・楕円型のいずれも処理可能だが，非線形

RESULT FROM TEST PROGRAM ***

	.0000	.2000	.4000	.6000	.8000	1.0000
000	.000e+00	.588e+00	.951e+00	.951e+00	.588e+00	.271e-05
120	.000e+00	.521e+00	.844e+00	.844e+00	.561e+00	.365e+00
240	.000e+00	.463e+00	.748e+00	.761e+00	.581e+00	.469e+00
360	.000e+00	.410e+00	.669e+00	.706e+00	.601e+00	.534e+00
480	.000e+00	.366e+00	.604e+00	.664e+00	.611e+00	.572e+00
600	.000e+00	.328e+00	.552e+00	.631e+00	.615e+00	.594e+00
720	.000e+00	.298e+00	.510e+00	.603e+00	.613e+00	.605e+00
840	.000e+00	.273e+00	.475e+00	.578e+00	.607e+00	.609e+00
960	.000e+00	.252e+00	.446e+00	.556e+00	.599e+00	.507e+00
080	.000e+00	.235e+00	.421e+00	.536e+00	.588e+00	.602e+00
200	.000e+00	.221e+00	.400e+00	.517e+00	.577e+00	.593e+00

図3　　出力例

方程式は扱えない。又，出力形式が図3に示した様に数値しかないことや安定性及び収束性の判断をしてないといった欠点がある。しかし，数式処理機能を持っていないもの[6]や数式処理システムにFortranプログラム作成のための支援環境を加えたもの[7]に比べると，入力形式の制約条件がゆるくなり，第3種の境界条件も処理可能になる等数式処理機能導入のためのメリットも多く見られる。

5．おわりに

このケース・スタディを通して，数式処理と数値計算を組み合わせた問題解決システムは，利用者にとって手間が省け

る有効な道具となり得ることを示しただけでなく，こうしたシステムにおいては，利用者が解こうとして定式化した数式から既存の数値解析アルゴリズムを計算機が選び出してこれを適用するために，そのアルゴリズムを定式化した知識の形式で計算機の内部に取り入れておくことが必要であり，直接的に数値解析のアルゴリズムを適用出来ない時にも数式処理の機能を利用し，適用すべきアルゴリズムと結びつけるための手順を知識の形式で計算機の内部に取り入れておけば良く，問題（範囲）を制限すればそれが出来ることが分かった。また，システムの最終的な段階では数値計算のプログラムを生成する機能を持つことが有効であることも確認された。

謝辞

本研究を行なう上で，貴重な御意見と適切な御指導をしていただいた慶應義塾大学理工学部管理工学科の浦昭二教授に感謝します。また，同大学同学部機械工学科の棚橋隆彦助教授から利用者の立場から貴重な意見をいただきました。

参考文献

1) Hearn, A.C. "REDUCE USER'S MANUAL, Second Edition", Univ. of Utah, 1973.

2) THE MATHLAB GROUP "MACSYMA REFERENCE MANUAL", Project MAC-M.I.T., 1974.

3) Farlow, S.J. "Partial Differential Equations for Scientists and Engineers", John Wiley & Sons, Inc., 1982.

4) Smith, G.D. "Numerical Solution of Partial Differential Equations", Oxford Univ. Press, 1965.

5) Forsythe, G.E. and Wasow, W.R. "Finite-Difference methods for Partial Differential Equations", John Wiley & Sons, Inc., 1960.

6) 梅谷征雄 辻みちる 岩沢京子 "数値シュミレーション用プログラミング言語DEQSOL",
数値解析研究会5－2，1983.

7) Fateman, R.J. "SYMBOLIC MANIPULATION LANGUAGE AND NUMERICAL COMPUTATION: TRENDS",
THE RELATIONSHIP BETWEEN NUMERICAL COMPUTATION AND PROGRAMMING LANGUAGES, pp. 117-130, 1982.

8) 柴山誠 永田守男 "数式処理と数値計算を組み合わせた問題解決システム",
情報処理学会第28回全国大会, pp. 1157-1158, 1984.