平成12年度(第22回)数学入門公開講座テキスト(京都大学数理解析研究所，平成12年7月31日～8月4日開催)

数 学 入 門 公 開 講 座

平成１２年７月３１日（月）から平成１２年８月４日（金）

京都大学数理解析研究所

講師及び内容

１．球面の対称性（６時間15分）

京都大学数理解析研究所・助手　永田　雅嗣

「対称性」というのは、実生活にもなじみの深い概念です。「球面という図形にどんな対称性があるか」と問われれば、誰でも点対称、回転対称、面対称などのアイデアを思い起こすでしょう。では、点対称や面対称が必ず周期２の対称性であるのは、なぜでしょうか。「周期３の点対称」のようなものがありえないことの理由をつきつめて考えていくと、図形のグローバルな性質をつかさどる、美しい数学が見えてきます。図形の定性的な性質と、定量的な群論とを結ぶ、変換群論と呼ばれる幾何理論を紹介したいと思います。

２．有理点の問題と符号暗号への応用について（６時間15分）

京都大学数理解析研究所・教授　伊原　康隆

代数曲線の有理点が符号、暗号(主に符号)の問題にどのように使われるかについて、入門的な話をしたいと思います。

体、とくに有限体とは何か(？)といったあたりから話をはじめ、代数曲線とその有理点、楕円曲線の場合、等についての基礎的な話をし、それらが符号、暗号に関する如何なる問題にどう応用されるかについて、その一端を紹介したいと思います。

３．離散と連続 ― 微分方程式の数値解析（６時間15分）

京都大学数理解析研究所・助手　降籏　大介

「数えられるもの＝離散量」と「数えられないもの＝連続量」という素朴な感覚にたがわず、数学では離散量と連続量は異なった扱いを受けます。

しかし、離散と連続の間には、連続は離散の極限であるという直感を越えて微妙で意義深い関係があるらしいことが各分野の様々な結果によって強く示唆されていて、非常に興味深いものがあります。

本講座では、そうした離散と連続の関係の一端を紹介するべく、離散量を対象としアルゴリズムの構築と計算量の解析を柱とする計算機科学と、連続量を対象とし関数空間の解析を柱とする関数解析学とが合流する分野－微分方程式の数値解析－を中心に講演を行います。

時　間　割

日 ＼ 時　間	7月31日(月)	8月1日(火)	2日(水)	3日(木)	4日(金)
10：30～11：45	永田	永田	永田	永田	永田
11：45～13：00	休　憩				
13：00～14：15	伊原	伊原	伊原	伊原	伊原
14：15～14：45	休　憩				
14：45～16：00	降籏	降籏	降籏	降籏	降籏

離散と連続―微分方程式の数値解析

京都大学数理解析研究所・助　手　　降　旗　大　介

2000, JULY 31, AUGUST 1,2,3,4,　14:45～16:00

離散と連続 — 微分方程式の数値解析

降旗 大介

1　はじめに

計算機で計算を行う際，実際に計算はどのように行われているのであろうか．ややもすると，計算機ハードウェア自身が数学に関する人類の知識を用いて計算を行う作りになっているかのように錯覚しがちであるが，実はそうではない．計算機ハードウェアは，基本的に四則演算ぐらいの驚くほど単純な計算を受け持つのみである．全ての計算はその単純な計算のみを有限回数だけ用いたアルゴリズムに最終的に還元されて実装されている．またメモリの有限性などから，計算機では有理数の一部分のみ，すなわち離散的な数，を用いて通常は計算を行う．

閉じている，という意味で計算機における計算は一つの数学体系をなしているととらえられるが, 上に述べたように，有限かつ離散な計算のみを扱うために結果や方法論が通常の数学とだいぶ異なることになる．素朴な基礎から出発して有限と離散という制限の枠内で何ができるかという命題は興味深いものであり，計算機を背景としてこの命題を研究するのが計算機科学である．つまり，計算機科学は「有限」と「離散」という概念からのみなる数学を研究する分野であると標語的にいいかえてもよいだろう．

計算機科学は，その対象および手法から数値解析と (非数値) 情報処理という分野に大きく分けられる．数値解析は関数論等の連続的な数学で記述される問題 (数値問題) を扱う分野であり，(非数値) 情報処理とは，組合わせ論などの離散的数学で記述される問題 (非数値問題) を扱う分野である．

数値計算が対象とする基本的な問題には，

補間/補外 与えられた標本点での値から，標本点以外での関数値を推測する問題．加速法と呼ばれるテクニックはこの問題を解く方法が発展したもの．

関数近似 関数の値そのものを計算する問題．

数値積分 積分値を計算する問題．多次元問題になると非常に難しい．

線形計算 連立一時方程式を解く問題．数値計算の多くの局面で必要となるため，その効率が非常に重要視される．

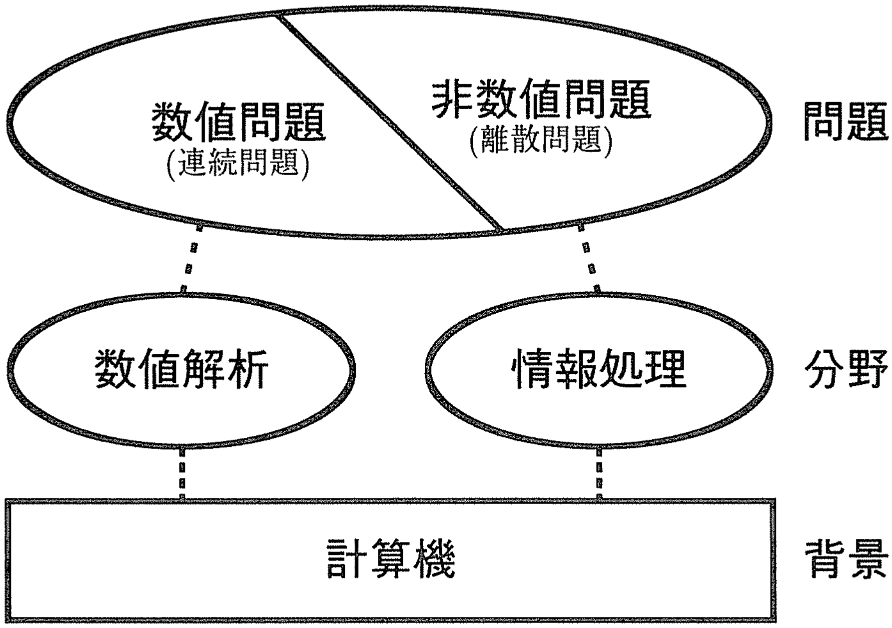


Figure 1: 数値解析理論の位置づけ

非線形方程式 非線形方程式，代数方程式等の解を求める問題.

微分方程式 常微分方程式，偏微分方程式の解を求める問題.

などがあげられる.

本講座は，微分方程式の数値解析を中心に，数値解析についておおよその理解が可能なようにアルゴリズムの紹介や数値解析特有の現象の解説を試みるものである．アルゴリズムの紹介においては，その良し悪しをみるために特に

- 誤差 (収束性)
- 速度 (計算量)
- 安定性
- 実装のしやすさ

に留意して解説を行う．解説の順序としては，最初に数値解析という分野を特徴づけることになる有限性，離散性から生ずる現象について述べる．次に，非線形方程式の解法 (スカラー

値を求める) について解説してから，常微分方程式の解法 (ベクトル値を求める) を解説する．そして，最後に偏微分方程式の解法 (**Matrix** 値を求める) について解説する．

2　計算機上の数学

計算機上で扱う数の有限性と扱う演算の有限性から，数値解析には大きく分けて二種類の誤差 (**丸め誤差，打ち切り誤差**) が発生する．この相対する二つの誤差の存在により，数値解析の世界には独特のバランス感覚が必要とされる．まずはこの基本から解説する．

また，誤差という観点からは説明し得ない現象も近年では見つかっている．これについても解説を行う．

2.1　数の有限性 → 丸め誤差

計算機は原理的に有限しか扱えないため，数値解析では実質的に有理数の一部しか扱うことができない．つまり，実数は全て特殊な有理数で近似される，つまり「丸められ」て扱われる．この丸めによって生じる誤差を一般に丸め誤差という．以下，具体的に説明する．

計算機上では，実数は一般に浮動小数点形式と呼ばれる形式の有理数で近似して扱われる．これは以下のような形式である．

浮動小数点形式

$$\text{数} = \textbf{仮数部 (有効桁分だけ)} \times \text{指数部}$$

$$\mathrm{c} = 0.\boxed{2}\boxed{9}\boxed{9}\boxed{7}\boxed{9}\boxed{2}\boxed{4}\boxed{5}\boxed{8} \times 10^9$$

有効桁数が有限かつ固定であることから，四則演算をはじめとするあらゆる計算の後に「増えてしまった有効桁数を減らす」，すなわち丸め，が行われる．この丸めは切り上げ，切り捨て，四捨五入 (普通は 2 進数を用いているので，0 捨 1 入である) などの方式がある．

例) $1.3 \times 3.5 = 4.55 \to 4.6$

この丸めのため，四則演算では「**乗除算よりも加減算の方が難しい**」．これは，次の二つの現象をなるべく避けるよう，注意深く計算を行う必要があるからである．

情報落ち 指数部の差が非常に大きい数同士を加減算すると，ほとんど加減算しなかったことになってしまう現象．

例) $1.000 \times 10^4 + 1.000 \times 10^0$ を有効桁数 4 で行うと…

$$
\begin{array}{ll}
 & \boxed{1}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{0} \\
+) & \phantom{\boxed{1}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{0}}\boxed{1}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{0} \\
\hline
 & \boxed{1}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{1}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{0} \\
 & \qquad\qquad \downarrow \text{丸め} \\
 & \boxed{1}\boxed{0}\boxed{0}\boxed{0}
\end{array}
$$

となり，1.000×10^4 のままになってしまう!

桁落ち ほとんど同じ数同士を減算することにより，有効桁数が少なくなってしまう現象.

例 1) $1.0016 - 1.0015 = 1 \times 10^{-4}$ となり，5 桁あった有効桁が 1 桁になってしまう!

例 2) 二次方程式の解の公式をそのまま適用すると…

$ax^2 + bx + c = 0$ に対する解の公式は $x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2-4ac}}{2a}$ であるが，$a = 1/2, b = 1, c = 1.0 \times 10^{-15}$ の場合に有効桁数 15 桁で計算してみると，

	$\dfrac{-b+\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$	$\dfrac{-b-\sqrt{b^2-4ac}}{2a}$
真値	$-1.000000000000000500\ldots \times 10^{-15}$	$-1.999999999999998999\ldots$
計算値	$-9.992007221626409 \times 10^{-16}$	-1.999999999999999

となり，計算値の片方に桁落ちが起こり，有効桁数がひどく少なくなっている．実はこの場合は，式の変形で桁落ちを回避できる．例えば，桁落ちの生じていない方の解を用いて，残りの解を解と係数の関係 $x_1 = c/(ax_2)$ によって計算すると $-1.000000000000000 \times 10^{-15}$ が得られる.

2.2 演算の有限性 $\rightarrow$ 打ち切り誤差

計算機は有限しか扱えない．よって，極限概念によって定義される量はその定義通りに数値計算することは原理的に不可能である．そのため，極限概念によって定義される量を数値計算で計算したいという場合,「有限の近似式で近似して」計算することになる．この「近似式を用いることによる」誤差を一般に打ち切り誤差という.

極限概念を用いて定義される量には，例えばリーマン積分があるが，これは計算機上ではそのままでは扱えず，様々な解法を駆使することになる．例えば，その最も単純な解法で

ある

台形則 $\displaystyle\int_a^b f(x)dx \to \left\{\frac{1}{2}f(a) + f(a+\Delta x) + f(a+2\Delta x) + \cdots + f(b-\Delta x) + \frac{1}{2}f(b)\right\}\Delta x$

を用いて計算すると，前に述べた丸め誤差が発生しないとしてもこの解法は一般に $O(\Delta x^2)$ オーダーの打ち切り誤差を発生させる．

Remark：上記の丸め誤差と打ち切り誤差とは互いに相反する性格を持つ．つまり，
「打ち切り誤差を小さくする」＝「近似式が複雑になる」＝「計算が増える」＝「丸め誤差 (の発生回数) が多くなる」
という図式が成り立つのである．そのため，打ち切り誤差もしくは丸め誤差のどちらかを一方的に小さくするのは得策ではなく，両方のバランスをとることが必要になる．また，計算のための解法を複雑にすると丸め誤差が大きくなるだけではなく，後述する Ghost 解 (幻影解) が発生するなどの不都合もあるため，一般に解法はシンプルであればあるほど問題が発生しにくい．つまり，数値計算の解法は一般的に

$\boxed{\text{より単純であること自体に価値がある}}$

といえる．問題の本質をとらえることを通じてのみ，難しい問題に対してシンプルな解法を与えることが可能であり，これが数値計算という分野を研究者にとって挑戦しがいのあるものとしている． □

2.3 連続と離散の本質的違い

上記の「誤差」と異なり，連続量と離散量が本質的に挙動が異なることがある．例えば，ロジスティック方程式

$$\frac{dx}{dt} = Rx(1-x) \tag{1}$$

を考えてみよう．この方程式は，初期値を $x_0 = x(0)$ として，厳密解が

$$x(t) = \frac{x_0 e^{Rt}}{1 + x_0\left(e^{Rt} - 1\right)} \tag{2}$$

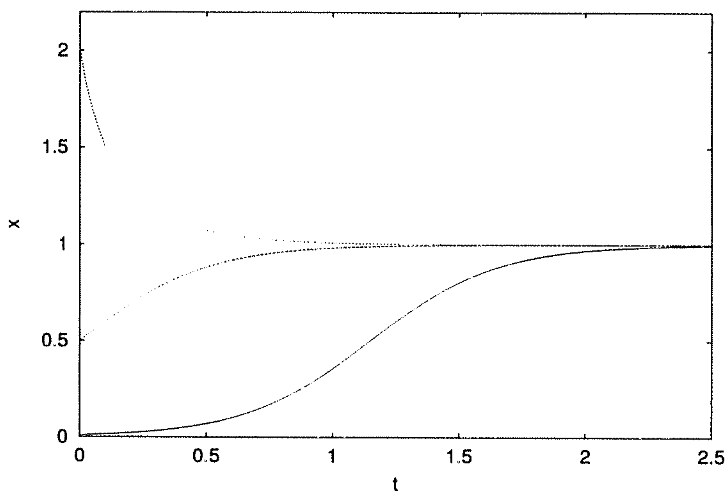


Figure 2: ロジスティック方程式の解の挙動 ($R = 4.0$)

と得られるため，解は最終的に $x(t) \to 1$ へと収束する (Fig. 2)．このロジスティック方程式を離散化 & 変数変換して，

$$x(t+1) = Rx(t)\Big(1 - x(t)\Big) \tag{3}$$

という離散方程式を考えて計算してみると，Fig. 3のようになり，カオス現象を引き起こす．

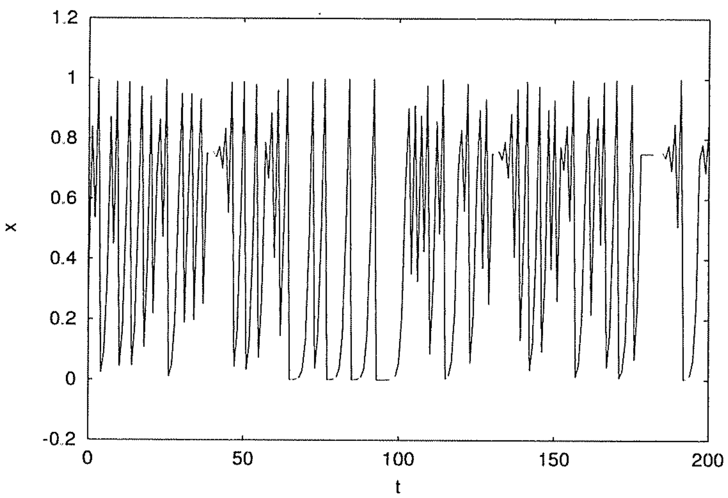


Figure 3: 離散ロジスティック方程式 (ロジスティック写像) の解の挙動 ($R = 4.0, x(0) = 0.3$)

つまり，もとの常微分方程式 (ロジスティック方程式) とは本質的に全く異なる性質が離散化によって生ずるのである．こうした現象も最近は見いだされており，連続なものを離散で近

似すればよいという単純な考えは間違っているということが明らかになりつつある．

3　非線形方程式

ここで，スカラー値を求める計算の例として，非線形方程式 $f(x)=0$ を数値計算によって解く方法について解説を行う．単純な計算しかできない計算機が，本質的に人間にできないこの問題を解く様子はいろいろな意味で非常に興味深い．単純なことを繰り返すことで意味のある答えを求めるという計算機の基本スタイルのエッセンスをこの章で感じ取ってもらいたい．

3.1　二分法

区間 $I=[a,b]$ 上で関数 $f(x)$ が連続ならば，中間値の定理により以下に述べる二分法が使える．単純で必ず収束し，関数値だけを計算すればよいので簡単だが，収束はそう速い方ではない．電卓で手軽に計算してみたい時などには非常に有効な解法である．

基本的に，$x=l_0,r_0$ に対して，$f(l_0)f(r_0)<0$ ならば $x\in[l_0,r_0]$ に解が必ずあるという事実を用いて，この区間の大きさを半分ずつにしてゆくという解法である．

二分法アルゴリズム

1. $f(l_0)f(r_0)<0$ となる l_0,r_0 を用意する．
2. $c_i \stackrel{\mathrm{def}}{=} \dfrac{l_i+r_i}{2}$ とする
3. $[l_{i+1},r_{i+1}] \stackrel{\mathrm{def}}{=} \begin{cases} [l_i,c_i] & \text{:if } [l_i,c_i] \text{ に解がある} \\ [c_i,r_i] & \text{:if } [c_i,r_i] \text{ に解がある} \end{cases}$
4. 以下 十分と思うまで $i\leftarrow i+1$ としながら 2–3 を繰り返すと，$\frac{l_n+r_n}{2}$ が $f(x)=0$ の近似解．

3.2　縮小写像反復法

縮小写像の定理に基づく方法で，問題を書き換えて行う反復法の一種である．時として，行う計算の種類を全く変えることができるのが利点である．この利点を生かして，本来は複雑

な計算を非常に単純な計算の繰り返しに還元することができる.

計算に当たっては, 問題を書き換えるために次の準備が要る.

縮小写像解法のための準備

準備として次のような性質をもつ関数 $g(x)$ を作る必要がある.

- $g(x) = -N(x)f(x) + x$, ただし, $N(x) \neq 0$ for $^\forall x \in [a, b]$
- $0 < {}^\exists\epsilon < 1$, $|g(x) - g(y)| \leq \epsilon|x - y|$ for $^\forall x, y \in [a, b]$

この準備で g を作ることができたら, 次の簡単なアルゴリズムを適用できる. 計算量や収束の速さなどは全てここで準備する g の性質に依存する.

縮小写像反復アルゴリズム

1. 適当な初期値 $x_0 \in [a, b]$ を用意.
2. $x_{i+1} \stackrel{\text{def}}{=} g(x_i)$
3. 十分と思うまで $i \leftarrow i + 1$ としながら 2 を繰り返すと, x_n が $f(x) = 0$ の近似解.

Remark :

- 上の $g(x)$ は $[a, b]$ 内にただ一つの不動点をもつ
- 上のアルゴリズムは任意の初期値 $x_0 \in [a, b]$ からはじめて g のただ一つの不動点に収束する

というのが, 縮小写像の定理である. □

例) 縮小写像アルゴリズムを用いると, 割り算を使わずに $1/a$ を求めることができる (割り算回路無しで割り算ができる). 以下にその例を示そう. 簡単のため, $0 < a < 1$ としておく. $f(x) \stackrel{\text{def}}{=} ax - 1$ とすると, $f(x) = 0$ の解が $1/a$ である. そこで, $N(x) = 1$ とおくと, $g(x) \stackrel{\text{def}}{=} (1 - a)x + 1$ となり, これは必要な条件を満たす. よって, 上のアルゴリズムで「割り算を全く使うこと無しで」 $1/a$ が求まる.

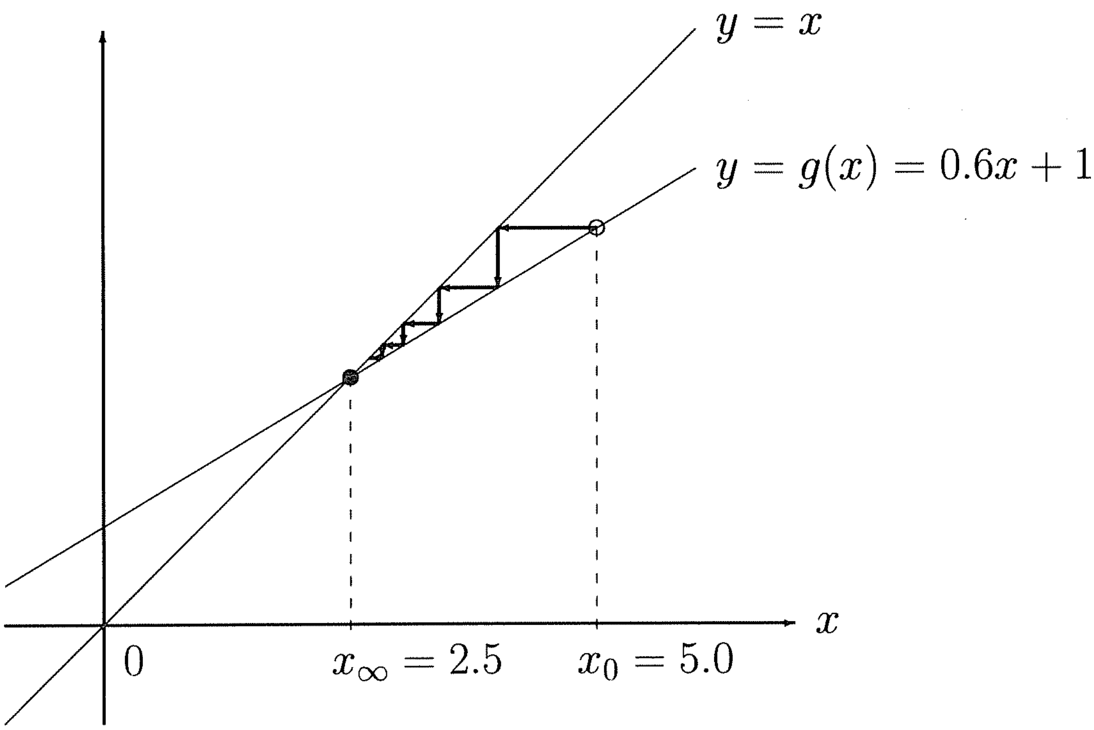


Figure 4: 縮小写像アルゴリズムによる割り算の様子 ($a = 0.4$)

3.3 Newton 法

非線形方程式の解法としてもっとも汎用性の高い解法として，Newton 法が挙げられる．基本的には，解の Taylor 展開の一次近似を反復することで近似解の誤差を小さくしていく方法である．具体的には，新たな近似解 x_{i+1} は解としてほぼ正しいものと期待すると，Taylor 展開は

$$0 = f(x_{i+1}) = f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + f'(x_i)\Delta x + O(\Delta x^2) \tag{4}$$

となるため，解の修正量 $\Delta x = x_{i+1} - x_i$ は

$$\Delta x \cong -\frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \tag{5}$$

と計算できるという考え，これを繰り返す方法である．

この解法は，解の周辺では収束は速いが，大域収束性 (初期値に関わらず必ず収束すること) は保証されないため，使用にあたっては初期値を適切に選択する必要がある．微分値を計算する必要があるために反復ごとの計算量は多くなるが，これを簡便な計算で済ます疑似 Newton 法の研究も数多くなされている．

適用するための前提条件が非線形方程式の微分可能性だけであるので，方程式について性質の詳細があまり判明していない場合にはたいてい Newton 法が用いられる．

Newton 法アルゴリズム

1. 適当な初期値 x_0 を用意．
2. $x_{i+1} \stackrel{\text{def}}{=} x_i - \dfrac{f(x_i)}{f'(x_i)}$
3. 十分と思うまで $i \leftarrow i+1$ としながら 2 を繰り返すと，x_n が $f(x)=0$ の近似解．

Remark：また，方程式が連立方程式である場合にも Newton 法を用いることができる．その場合には例えばアルゴリズムの 2 は

2'. $\boldsymbol{x}_{i+1} = \boldsymbol{x}_i - J^{-1}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_i)$

となる．ただし，J は Jacobi 行列 $J = \left\{ J_{j,k} \middle| J_{j,k} = \dfrac{\partial f_j}{\partial x_k} \right\}$ である．2' の連立一次方程式は数値計算により解くことになる． □

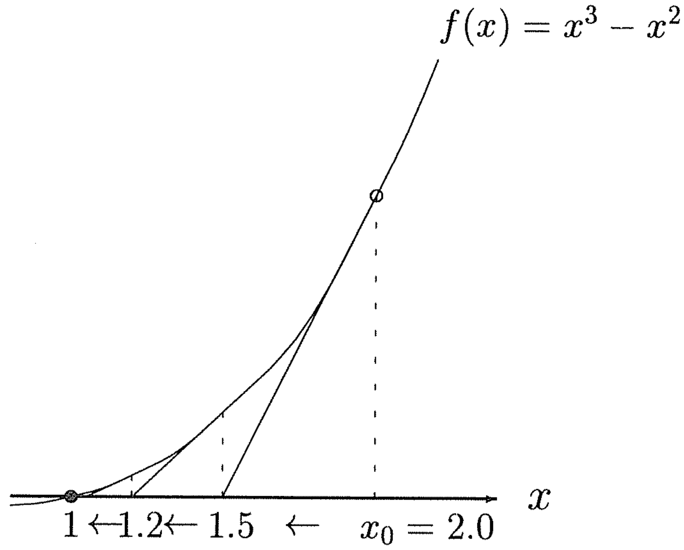


Figure 5: Newton 法による零点への接近の様子

4　常微分方程式

この章では，ベクトル値 (数列) を求める解法として，常微分方程式の解を数値計算によって求める解法について解説を行う．物理，生物，経済など，多くの分野で扱われる常微分方程式だけに，丸め誤差と打ち切り誤差とのバランスを保ちつつ，シンプルで強力な解法を追求して様々なアルゴリズムが提案されている．一見単純な問題であるが，誤差の蓄積により数値解が真の解から異常な形で離れていってしまう**発散**，**振動**といった現象や，誤差と関係なく発生するおかしな解である **Ghost 解 (幻影解)**，**カオス解**などの現象があるために，その扱いは難しい．この章では，次の問題を常微分方程式を解く問題の典型例として扱う．

[常微分方程式 (ODE) 初期値問題]

$$\frac{du}{dt} = f(u, t) \tag{6}$$

に対して，初期値を $u(0) = u_0$ が与えられているとして，$u(t)$ の近似解 $\{u_n | u_n \cong u(n\Delta t)\}$ を求める．

Remark :　高階微分まで含まれている常微分方程式 $u^{(m)} = f(t, u, u', u'', \cdots, u^{(m-1)})$ も $v_1 \stackrel{\text{def}}{=} u'(t)$, $v_2 \stackrel{\text{def}}{=} v_1'(t) = u''(t)$, $\cdots$, $v_{m-1} \stackrel{\text{def}}{=} v_{m-2}'(t) = u^{(m-1)}(t)$ と変数を導入することにより連立一階常微分方程式

$$\left\{\begin{array}{rcl} u' &=& v_1 \\ v_1' &=& v_2 \\ &\vdots& \\ v_{m-2}' &=& v_{m-1} \\ v_{m-1}' &=& f(t, u, v_1, v_2, \cdots, v_{m-2}) \end{array}\right.$$

に帰着させることができるため，上の問題に対する解法を適用できる．ただし，高階常微分方程式に対する境界条件によっては (境界の両端での値が与えられている場合 = 二点境界値問題 など)，shooting method や緩和法などのさらなる (上位) 解法が必要となる．本講座では初期値問題のみを扱う．　□

4.1 Taylor 展開

1 タイムステップ Δt だけ時間が進んだ時の値 $u(t+\Delta t)$ を Taylor 展開して近似するという概念が，常微分方程式の解法の基本となる．微分という計算は人間にとっても計算機にとっても高くつくため，Taylor 展開による近似がそのまま使われることはないが，後に述べる解法の参考に記しておく．$u(t+\Delta t)$ を Taylor 展開すると，

$$\begin{aligned} u(t+\Delta t) &= u(t)+u'(t)\Delta t+u''(t)\frac{\Delta t^2}{2}+\cdots+u^{(p)}(t+\theta\Delta t)\frac{\Delta t^p}{p!} \quad (7)\\ &= u(t)+f(u,t)\Delta t+f'(u,t)\frac{\Delta t^2}{2}+\cdots+f^{(p-1)}(t+\theta\Delta t)\frac{\Delta t^p}{p!} \quad (8)\end{aligned}$$

と表記できる (関数 u が必要なだけ微分可能だとして)．これを利用すれば，$u(t)$ から $u(t+\Delta t)$ を理論的にはいくらでも高い精度で近似計算できる．この展開式は理論的には分かりやすいが，f の微分が必要なのでほとんど実用的ではない．

4.2 差分方程式

常微分方程式問題を離散化するという考え方を素朴に適用し，(6) の左辺の微分項を離散化すれば単純に問題を離散化することができる．このとき，微分項を差分で置き換えて離散化する，すなわち $\dfrac{du}{dt}\to\dfrac{u_{n+1}-u_n}{\Delta t}$ などとする方法が最もシンプルであり，こうして作られた差分方程式を用いる解法がある．後述するように単純な差分方程式を用いる解法はあまり実用的ではないが，解析しやすいこと，常微分方程式の解法の問題点を見るには適していること，あとの偏微分方程式では解法の主力であること，などからここで紹介する．差分方程式の中で最も単純なのは，

陽的差分公式 (Euler 法) $\qquad \dfrac{u_{n+1}-u_n}{\Delta t}=f(u_n,t_n)$

であり，常微分方程式の解法の中で最も単純な方法である．この解法は陽的 ($u(t+\Delta t)$ が数式で陽に表現できること) であるために計算量が少ないのがメリットであるが，精度も高くない上に安定でない (発散，振動が起こる) ため，実用には適さないと言ってよい．

例) 簡単な常微分方程式

$$\frac{du}{dt}=-cu, \quad c>0:const. \quad (9)$$

を考えてみる．解は $u(t)=e^{-ct}u(0)$ であり，$t\to\infty$ で $u\to 0$ となる．一方，この常微分方

程式に対して陽的差分公式を作ってみると,

$$\frac{u_{n+1}-u_n}{\Delta t} = -cu_n \tag{10}$$

となるため, 差分方程式の解は $u_n = (1-c\Delta t)^n u_0$ であり, $2/c < \Delta t$ の場合は **数値解 u_n は振動しながら発散する.**

差分の形を変えて得られる差分方程式には他に, 陰的差分公式や Crank–Nicolson 公式などがあるが, 面白いのは次の

中心差分公式 (修正 Euler 法) $\quad \dfrac{u_{n+1}-u_{n-1}}{2\Delta t} = f(u_n, t_n)$

である. 面白いことに (数値計算としては困ることであるが), この差分公式の解には, 常微分方程式の解を近似していない **Ghost** 解と呼ばれる解が存在することがある. その一例を Fig. 6 に示した. これは (9) に対して中心差分公式を適用したものである. この Ghost 解は上の発散, 振動と一見似た現象であるが, 刻み幅 Δt をいくら小さくしても発生する現象である点が異なる. つまり, 近似精度が低いから発生する問題ではなく, 離散化そのものが引き起こす現象なのである.

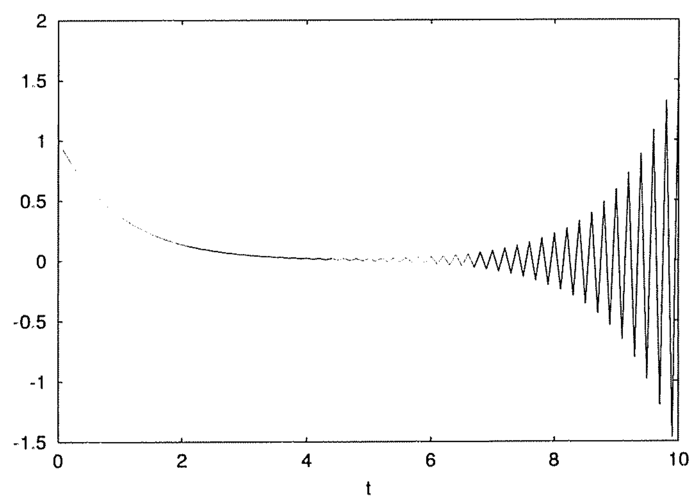


Figure 6: 中心差分公式による Ghost 解発生の様子 ($c = 1.0, \Delta t = 0.1, u_0 = 1.0$)

差分方程式には他にも多くのバリエーションが可能であるが, いずれにしろ, 安定性と計算量のバランスを考えると他の解法の方が有利である. 実際の計算には, 次に示す Runge–Kutta 法, 線形多段階法や補外 (加速) 法が用いられる (べきである). なお, 実用上は補外 (加速) 法がかなり優れているが, 加速法に関する知識が必要なため, 本講座では省略する.

4.3 Runge–Kutta 法

Taylor 展開法の微分値の代りに，時間 1 step 以内の数ヵ所での関数値 f を用いて Taylor 展開法と同等の精度を実現しようという方法である．陽的であり，f の値を複数回計算する必要はあるがその微分値等を計算しなくて済むので計算量が少なく，シンプルでありながら精度を高くでき，安定性も比較的高い．実装 (プログラミング) も容易なことから，よく用いられる．

例えば，次の

古典的 Runge–Kutta 法 (4 段 4 次)

$$
\begin{aligned}
\tilde{f}_1 &= f(u_n, t_n) & (11)\\
\tilde{f}_2 &= f(u_n + \frac{1}{2}\tilde{f}_1 \Delta t, t_n + \frac{1}{2}\Delta t) & (12)\\
\tilde{f}_3 &= f(u_n + \frac{1}{2}\tilde{f}_2 \Delta t, t_n + \frac{1}{2}\Delta t) & (13)\\
\tilde{f}_4 &= f(u_n + \tilde{f}_3 \Delta t, t_n + \Delta t) & (14)\\
u_{n+1} &= u_n + \frac{\tilde{f}_1 + 2\tilde{f}_2 + 2\tilde{f}_3 + \tilde{f}_4}{6}\Delta t & (15)
\end{aligned}
$$

を見ればその特色はほぼ理解できるだろう．この公式はおそらく常微分方程式の数値解法としては最も有名で最もよく使われるものである．

さらに，より高次の Runge–Kutta 公式と組み合わせて誤差を推定することで，計算の 1 step 毎に Δt の値を適切に調節してゆくこともでき，そうした目的に適した**埋め込み型公式** (Merson 公式，Fehlberg 公式など) と呼ばれる公式も存在する．

4.4 線形多段階法

Runge–Kutta 法と異なり，時間 1 step 以内の関数値を計算するのではなく，それまでに計算した数 step のデータを利用することで高精度を達成しようとする方法を線形多段階法と呼ぶ．単純に考えると計算量は Euler 法と同じで，次数はより高次である．しかし，陽的な公式を単純に用いると安定性が良くないため，実際には陽的公式と陰的公式を組み合わせて使う**予測子・修正子法**の形をとることになり，計算量のアドバンテージはやや薄れる．具体的には，予測子 (陽的公式) で $u(t+\Delta t)$ の値をおおよそ推定し，その値を修正子 (陰的公式) に代入することで $u(t+\Delta t)$ の良い近似値を得るという考え方である．

良く知られているのは次の

4次 線形多段階法 (Adams–Bashforth–Moulton)

予測子 $V_{n+1} = u_n + \dfrac{55f_n - 59f_{n-1} + 37f_{n-2} - 9f_{n-3}}{24}\Delta t$

修正子 $u_{n+1} = u_n + \dfrac{9f(V_{n+1}, t_{n+1}) + 19f_n - 5f_{n-1} + f_{n-2}}{24}\Delta t$

であり，非常に安定である．修正子で u_{n+1} が得られた後に，(サービスとして) その値を再度代入して $f(u_{n+1}, t_{n+1})$ を計算しておくとしても，4次精度を実現するために関数を 2 回/time step 計算するだけでよく，計算量は同じ次数の Runge–Kutta 法のほぼ半分で済む．

ただし，初期値 u_1, u_2, u_3 は別の方法で計算しなければならないこと，時間ステップ幅 Δt を計算しながら適切に調整することが難しいこと，実装が比較的面倒なことなどから，Runge–Kutta 法ほど広く使われていない．

4.5 Symplectic 法

常微分方程式の解法の中には，Taylor 展開に基礎をおくのではなく，まったく異なる原理から導出されるものもある．その一例として，近年研究されている Symplectic 法を紹介しよう．Symplectic 法とは，挙動が正準方程式

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H(p,q)}{\partial q}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H(p,q)}{\partial p} \tag{16}$$

であらわされるハミルトン力学系 (H はハミルトニアン) のシンプレクティック (symplectic) 性を再現する差分法である．つまり，**写像** $(p(t), q(t)) \to (p(t+\Delta t), q(t+\Delta t))$ **がシンプレクティックである差分法**をシンプレクティック法と言う．

Remark : 写像 $(p(t), q(t)) \to (p(t+\Delta t), q(t+\Delta t))$ がシンプレクティックであるとは，Jacobi 行列 $J \stackrel{\mathrm{def}}{=} \dfrac{\partial(p(t+\Delta t), q(t+\Delta t))}{\partial(p(t), q(t))}$ に対して，

$$J^T \tilde{I} J = \tilde{I} \tag{17}$$

が成り立つことを言う．ただし，$\tilde{I} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}$ である．直感的には理解しにくいが，例えば自由度 1 のハミルトン系ではシンプレクティック性は相空間での軌道に沿った面積保存

性と同等といえる． □

この解法は，方程式が本来もつシンプレクティック性を再現することを念頭において考えられたものであり，Taylor 展開に基礎をおくものではない．しかし，系のシンプレクティック性だけでなく，(n 次の) シンプクレティック法は

$$\tilde{H} = H + (\Delta t)^n \Delta H + o((\Delta t)^{n+1}) \tag{18}$$

なるハミルトニアンを保存するため，真のハミルトニアンとの誤差は (計算をいくら進めても) $(\Delta t)^n \Delta H + o((\Delta t)^{n+1})$ にしかならないという性質をあわせ持つ．このことから，長時間経過後の挙動を計算したいなどという目的には非常に適していることが推測できる．また，連続な力学系を離散系にするという概念から見れば，Taylor 展開に基礎をおく解法よりもより本質的であるといえるだろう．これらの性質からハミルトン力学系に対しては他の解法よりも有利である．

ただし，シンプレクティック法では時間ステップ幅 Δt を計算しながら調整すると一般にハミルトニアンの保存性が失われる．つまり，時間ステップ幅 Δt を可変にすると，他の解法に対する優位性が失われる．しかし，ハミルトニアンの保存性を失わずに Δt を調整する方法についても近年は研究が進みつつあるので，この問題も解決されつつある．

例) 一次元調和振動子

$H(p,q) = \dfrac{1}{2}(p^2+q^2)$ であらわされる一次元調和振動子を考えてみる．正準方程式は

$$\frac{dq}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -q \tag{19}$$

となる．この力学系に対して，

$$\frac{q_{n+1}-q_n}{\Delta t} = p_n, \quad \frac{p_{n+1}-p_n}{\Delta t} = -q_{n+1} \tag{20}$$

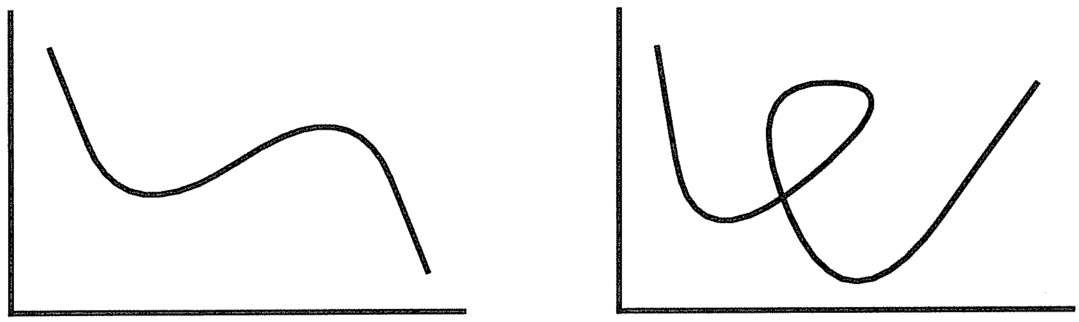
という差分方程式はシンプレクティック法になっている．また，この差分方程式は

$$\tilde{H}_n \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{2}\left((p_n)^2 + (q_n)^2\right) + \frac{1}{2}\Delta t\, p_n q_n \tag{21}$$

を厳密に保存する．いいかえれば，ハミルトニアンとの誤差は常に $(1/2)\Delta t\, p_n q_n$ であり，計算をいくら進めてもこれ以上大きくならない．

5 偏微分方程式

この章では，Matrix 値を求める解法として，偏微分方程式の解を数値計算によって求める解法について解説を行う．常微分方程式以上に多くの分野で扱われる偏微分方程式であるが，常微分方程式で発生する発散，振動，Ghost 解，カオス解などの全ての問題が発生する上に，非線形性による安定性の発生や解の多価性等に関する困難などの偏微分方程式特有の現象が数多くあるために，偏微分方程式の扱いは一般に難しい．逆に言えば，連続と離散の間に横たわる溝がそれだけ鮮明に見えてくるということでもある．



一価関数　　　　多価関数

取り扱いの難しさもあって，偏微分方程式に対する解法は有限要素法，境界要素法，スプライン法，モンテカルロ法，差分法をはじめとする多岐にわたる．全てを解説するわけにはいかないので，本章では最も本質を理解しやすいと思われる差分法を紹介し，その性質を抜粋して集中的に述べる．

対象とする偏微分方程式そのものであるが，関数解析学ではこれを細かく分類する．しかし，数値計算理論では，偏微分方程式を次の二種類に分けて考えると理解しやすい．この分類は常微分方程式の分類とも対応するのでより分かりやすいだろう．

初期値問題 (時間発展問題)

初期条件と境界条件が与えられていて，解が時間発展する様子を知りたいという問題である．

数値計算理論上，主に問題となるのは解法の安定性である．つまり，発散，振動といった現象が主な困難である．関数解析学で言えば，次の分類がこの範疇にはいるだろう．

例)　双曲型方程式　$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

放物型方程式　$$\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

境界値問題 (静的問題)

方程式の対象領域の境界が閉じており，必要な境界条件が全て与えられていて，領域内部での解の値を知りたいという問題である．

静的な問題であると言い換えてもよい．解が時間発展するにつれて不安定になるという要素がないため，主に問題となるのは解法の速度 (効率) である．関数解析学では次の方程式がここに分類される．

例)　楕円型方程式　$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y)$$

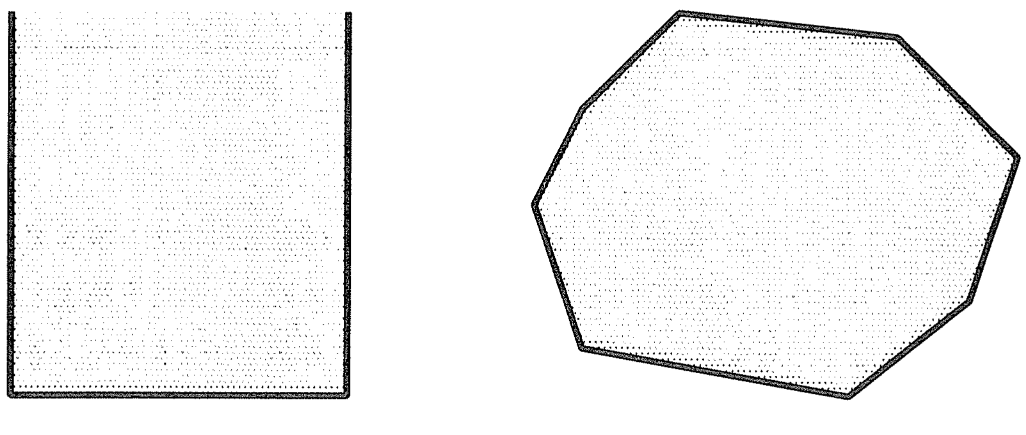


Figure 7: 偏微分方程式問題のタイプ

本講座では，対象として初期値問題を扱う．これは，初期値問題ではアルゴリズムの安定性が主として問題となるため，連続な方程式を離散化することによって起こる現象を直感的に理解しやすいことと，解の依存関係がはっきりしているため，偏微分方程式自身への理解を深めることが容易であることが理由である．

さて，偏微分方程式の初期値問題に対し，主な目標は安定性の確保であることは既に述べた．この目的を達成するための方法論には，大きく分けて**安定性解析**と**指導原理**に基づく

解法の導出の二つがある．以下, 初期値問題 (時間発展問題) の最も簡単な例の一つである

拡散方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \qquad D > 0 : \text{const.} \tag{22}$$

を具体例として扱いながら，これら二つの方法論について解説し，偏微分方程式という連続な方程式を離散化した世界に対してわれわれに何ができるのか，を解説する．

5.1 安定性解析

与えられた差分方程式の安定性を調べることを一般に安定性解析と呼ぶ．具体的には，与えられた差分方程式に残っている自由なパラメータ ($\Delta x, \Delta t$ など) の値と数値解の安定性との関係を調べることを指す．この関係がわかればパラメータを適切に設定することで与えられた差分方程式を安定に使用することができる，とするのが安定性を確保するためのオーソドックスな方法論である．差分方程式そのものに対する事後評価，ともいえる．

さて，$u_k^{(n)} \cong u(k\Delta x, n\Delta t)$ として，偏微分を次のように偏差分で置き換えて，

$$\frac{\partial u}{\partial t} \quad\rightarrow\quad \frac{u_k^{(n+1)} - u_k^{(n)}}{\Delta t} \tag{23}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad\rightarrow\quad \frac{u_{k+1}^{(n)} - 2u_k^{(n)} + u_{k-1}^{(n)}}{\Delta x^2} \tag{24}$$

もっとも簡単な次の差分方程式を得る．

陽的差分方程式

$$\frac{u_k^{(n+1)} - u_k^{(n)}}{\Delta t} = D\,\frac{u_{k+1}^{(n)} - 2u_k^{(n)} + u_{k-1}^{(n)}}{\Delta x^2} \tag{25}$$

この差分方程式に対して安定性解析を行ってみよう．安定性解析には様々な手法があるが，その中で最も基本かつよく用いられるのは次の von Neumann 安定性解析 (線形安定性解析ともいう) である．

von Neumann 安定性解析 (線形安定性解析)

差分方程式の解関数に対しては，通常の (空間方向) Fourier 展開を離散化した展開

$$u_k^{(n)} = \int c_\eta(n) e^{i\eta k\Delta x} d\eta \tag{26}$$

ができると考えてよい (境界条件の影響を無視している). η は実数値の空間波数で, 実質 $0 \le \eta \le \pi/\Delta x$ の範囲である. 線形の差分方程式に対しては各基底関数 $e^{i\eta k\Delta x}$ の線形重ね合わせが崩れないままであるので, さらに

$$u_k^{(n)} = \int c_\eta(0)(\lambda_\eta)^n e^{i\eta k\Delta x} d\eta \tag{27}$$

と変形できる. この時, λ_η は波数 η モードに対する増幅率と呼ばれる. よって, 解が安定である (= 指数関数的に増大する項が無い) ということは

$$\boxed{\text{差分方程式が安定である} \Leftrightarrow \text{その解に対して } |\lambda_\eta| \le 1 \textbf{ for } {}^\forall\eta}$$

という図式になる.

Remark : 各波数 η モードに対する増幅率の実際の計算は簡単で, 差分方程式に

$$u_k^{(n)} \leftarrow (\lambda_\eta)^n e^{i\eta k\Delta x} \tag{28}$$

と代入して λ_η を求めるだけでよい. □

ちなみに, 非線形偏微分方程式に対しては, 差分方程式を線形近似して同様に von Neumann 安定性解析を適用する方法が通常用いられる. 非線形性が弱い問題に対してはこの方法で十分なことが多い. 非線形性が強いためにこうした安定性解析が有効でないような問題には, 次節の方法論の方が適している.

陽的差分方程式の安定性

von Neumann 安定解析を用いると, 陽的差分方程式に対しては増幅率は

$$\lambda_\eta = 1 - \frac{4D\Delta t}{(\Delta x)^2}\sin^2\left(\frac{\eta\Delta x}{2}\right) \tag{29}$$

となる. よって, 陽的差分方程式は

$$\frac{2D\Delta t}{\Delta x^2} \le 1 \tag{30}$$

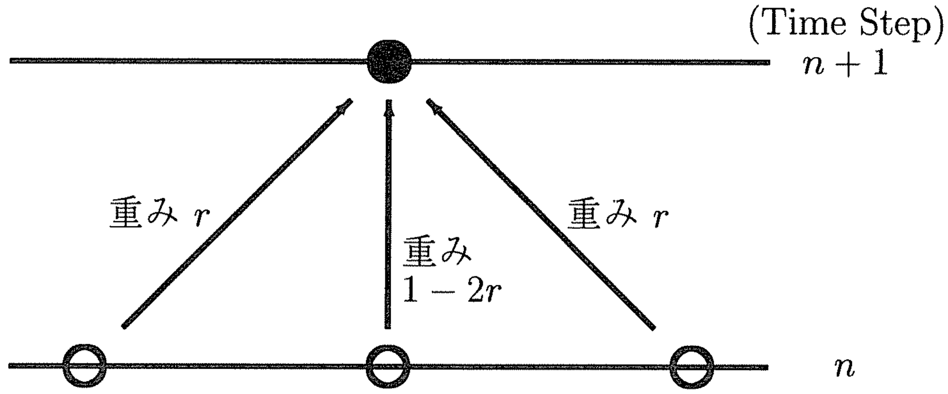
の時に安定であると考えられる (実際そうである).

Remark : 陽的差分方程式の安定性解析の結果は次のような「直感的な解釈」が可能である. そもそも, 拡散方程式は何らかの量が散らばっていく現象をあらわしている. つまり, 空間のある点に着目するとその点の値は周囲の値の重みつき平均に変化してゆくということである. そこで, 陽的差分方程式を

$$u_k^{(n+1)} = ru_{k+1}^{(n)} + (1-2r)u_k^{(n)} + ru_{k-1}^{(n)} \tag{31}$$

$$r \stackrel{\text{def}}{=} \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \tag{32}$$

と変型してみると，$u_k^{(n+1)}$ は $u_{k+1}^{(n)}, u_k^{(n)}, u_{k-1}^{(n)}$ をそれぞれ重み $r, 1-2r, r$ で平均したものになっており，確かに平均という現象をあらわしている．



しかし，平均というからにはその重みは正でないと不自然であり，この「自然さ」は $r>0$, $1-2r>0$ という式で表わされる．これは結局 $2r<1$, すなわち (30) を意味する．こうした直感的解釈は von Neumann 安定性解析などが行えない場合でも有効な時があるので，方程式そのものの本質的な性質を把握することは重要である． □

陽的な差分方程式には，パラメータを適切に選択しないと安定でないという欠点があることが線形安定性解析で判明した．そこで，異なる差分方程式について考えてみる．

Crank–Nicolson 差分方程式

$$\frac{u_k^{(n+1)} - u_k^{(n)}}{\Delta t} = D\,\frac{1}{2}\left\{\frac{u_{k+1}^{(n+1)} - 2u_k^{(n+1)} + u_{k-1}^{(n+1)}}{\Delta x^2} + \frac{u_{k+1}^{(n)} - 2u_k^{(n)} + u_{k-1}^{(n)}}{\Delta x^2}\right\} \tag{33}$$

この差分方程式は先に述べた陽的差分方程式に比べると，時間ステップを一つ進めるために連立一次方程式を解かねばならず，計算量的には不利である．しかし，この方程式の利点はその精度と安定性にある．その安定性について調べてみる．

Crank–Nicolson 差分方程式の安定性

von Neumann 安定性解析によれば，増幅率は

$$\lambda_\eta = \frac{1-2r\sin^2\left(\frac{\eta\Delta x}{2}\right)}{1+2r\sin^2\left(\frac{\eta\Delta x}{2}\right)} \tag{34}$$

となるため，Crank–Nicolson 差分方程式は任意の $\Delta x, \Delta t$ の値に対して安定 (無条件安定) で

あることがわかる．

Remark : Crank–Nicolson 差分方程式の安定性解析の結果を直感的に理解する方法はないだろうか．実は，次の節こそその方法を示しているといえる． □

5.2 指導原理に基づく差分方程式の導出

安定性確保のためのもう一つの方法論は，問題に応じて差分方程式を適切に構成するというものである．安定性解析に比べ，困難が多いが，うまくいった場合の見返りは大きい．なぜならば，安定性解析そのものが無効であるような非線形偏微分方程式問題が実際に数多く存在するからである．しかし，無限にある離散化のバリエーションの中から適切なものを選択してスキームを構成するには，なんらかの指導原理か直感ないしは偶然 (!) が必要である．直感的に導出された差分方程式の研究報告も多いが，1950 年代に始まるエネルギー法 や TV 方程式，離散変分法などに見られるように，近年はこうした指導原理を与える研究が盛んになりつつある．常微分方程式に対する Symplectic 法もここに分類される．ちなみに，先の安定性解析に対し，この方法論は差分方程式に対する事前評価といえよう．

本講座では，エネルギー法を拡散方程式に対して適用した例を示し，こうした方法の基本を示す．概念と計算手順自体は単純であるが，それが故にこの方法論に基づく解法は実は細部に渡って非常に注意深く組み立てられる．その注意深さは，有限性，離散性のみを用いて

$$\boxed{\text{極限操作の排除} = \text{微小な量を無視する概念の排除}}$$

を行う離散系の本質を反映していることをこの例を通じて理解してもらいたい．

5.2.1 エネルギー法

エネルギー法とは，簡単に述べれば**微分方程式系のエネルギー量の性質を再現すること**を差分方程式の解に要請する方法の総称であるが，これでは対象が広すぎるため，歴史的に 1950 年代に行われた研究をさしてそういうことが多い．このエネルギーという単語は，解の汎関数から適切に選んだものをさしてそう言うだけで，特に物理的な意味はない．

エネルギー法が差分方程式の安定性に寄与する理由は，解の汎関数を適切に選んでその大きさを制御することができれば，解の大きさそのものを制御できることと同等な場合があ

るからである．つまり，解の大きさを制御できることが最初から保証 (ないしは期待) される差分方程式を設計する手法なのである．

具体的に拡散方程式に対してエネルギー法を適用してみることでこの方法が理解できるかと思う．まず，(後で都合の良いように) 系のエネルギーを

$$E(t) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{D}{2} \int (u(x,t))^2 dx \tag{35}$$

と定義する．すると，エネルギーの時間変化は

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &= D \int \left(u \frac{\partial u}{\partial t} \right) dx \\ &= D^2 \int \left(u \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) dx \\ &= D^2 \left[u \frac{\partial u}{\partial x} \right]_{\partial\Omega} - D^2 \int \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 dx \\ &= -D^2 \int \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 dx \\ &< 0 \end{aligned} \tag{36}$$

となり，エネルギー E が時間とともに減少することが理解できる．(ただし，途中の境界項が消えるような境界条件が付されているものと仮定する) この場合，エネルギーが減少することはただちに解の L_2 ノルムの減少を意味する．

よってこの場合の拡散方程式へのエネルギー法の適用とは，離散エネルギーが減少するように適切に差分方程式と離散エネルギーを定義しなさい，という命題を意味する．

実は，Crank–Nicolson 差分方程式は離散エネルギー

$$E_{\mathrm{d}}^{(n)} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{D}{2} \sum_k \left(u_k^{(n)} \right)^2 \Delta x \tag{37}$$

とペアでこの命題の答えになっているのである．($\sum_k$ の k の範囲は境界条件と併せて適切に定義されているものとする) これは，以下のようにして示される．

$$\begin{aligned} \frac{E_{\mathrm{d}}^{(n+1)} - E_{\mathrm{d}}^{(n)}}{\Delta t} &= D \sum_k \left(\frac{u_k^{(n+1)} + u_k^{(n)}}{2} \right) \left(\frac{u_k^{(n+1)} - u_k^{(n)}}{\Delta t} \right) \Delta x \\ &= D^2 \sum_k \left(\frac{u_k^{(n+1)} + u_k^{(n)}}{2} \right) \delta_k^{\langle 2 \rangle} \left(\frac{u_k^{(n+1)} + u_k^{(n)}}{2} \right) \Delta x \\ &= -D^2 \sum_k \left(\frac{(u_{k+1}^{(n+1)} + u_{k+1}^{(n)}) - (u_k^{(n+1)} + u_k^{(n)})}{2} \right)^2 \Delta x \\ &< 0 \end{aligned} \tag{38}$$

ただし，煩雑なために境界項は省略している．また，$\delta_k^{(2)} u_k^{(n)} \stackrel{\mathrm{def}}{=} (u_{k+1}^{(n)} - 2u_k^{(n)} + u_{k-1}^{(n)})/(\Delta x^2)$ である．

この離散エネルギー $E_{\mathrm{d}}^{(n)}$ の減少はそのまま解 $u_k^{(n)}$ の大きさを押さえることを意味するため，Crank–Nicolson 差分方程式が安定であることがこれより理解される．この際，$\Delta x, \Delta t$ に関する制約は何もないことから，無条件安定であることもわかる．

線形である拡散方程式に対するこのエネルギー法ですら，細部は非常に注意深く定義されている．強力でより単純な解法の背景には，離散系に対するこうした数値計算理論の積み重ねがあるという一端が見える．

6 最後に

本講座では，微分方程式の解法を中心に数値解析の基礎的な部分を紹介した．連続と離散の間に潜む微妙な関係を探すという目的において数値解析理論は実に興味深いものであり，より多くを知ることでより興味が増すだろう．その際には以下にあげる和書を参考とされたい．

References

[1] 伊理正夫 編著, 現代応用数学，日本放送出版協会，1987.

[2] 杉原正顯，室田一雄，数値計算法の数理, 岩波書店, 1994.

[3] 杉山昌平, 差分・微分方程式, 共立出版, 1971/1999.

[4] 広田良吾, 差分学入門, 陪風館, 1998.

[5] W.H.Press et al. 著/ 丹慶勝市 他訳, Numerical Recipes in {C, Fortran, Pascal} [日本語版], 技術評論社, 1993.

[6] 森正武，数値解析，共立出版，1973.