

反復法の計算方法と具体例

山本昌志*

2006年11月13日

概要

反復法のひとつであるガウス・ザイデル法の具体的な計算方法を示す。そして、それを利用した練習問題として、コンデンサーの静電容量を求める方法を示す。

1 はじめに

反復法による連立一次方程式の計算方法を示した。ただ、それだけではプログラムを作成できない者も多くいるだろう。そこで、例を示して具体的なガウス・ザイデル法のプログラムの作成方法を示すことにする。まずはじめに、簡単な連立方程式とそのプログラムを示す。つぎに、連立方程式を用いてコンデンサーの容量を計算する方法を示す。

2 ガウス・ザイデル法を使った計算

2.1 連立一次方程式

ガウス・ザイデル法のような反復法は大きな連立方程式の計算に敵している。しかし、ここではその計算原理を分かり易くするため、次の連立方程式を計算する。

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 1 & 4 & 1 \\ 2 & 2 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 12 \\ 21 \end{bmatrix} \quad (1)$$

この方程式の解析解は、

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \quad (2)$$

*国立秋田工業高等専門学校 電気工学科

であるが，ガウス・ザイデル法計でこれを求めることにする．前に示したようにガウス・ザイデル法の漸化式は

$$\begin{aligned} x_i^{(k+1)} &= a_{ii}^{-1} \left\{ b_i - \left[a_{i1}x_1^{(k+1)} + a_{i2}x_2^{(k+1)} + a_{i3}x_3^{(k+1)} + \cdots + a_{ii-1}x_{i-1}^{(k)} + a_{ii+1}x_{i+1}^{(k)} \cdots + a_{in}x_n^{(k)} \right] \right\} \\ &= \frac{1}{a_{ii}} \left\{ b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k+1)} \right\} \end{aligned} \quad (3)$$

である．これは，反復の k 番目の近似解から，より精度の良い $k+1$ 番目の解を求める方法を表している．これを，式 (1) に当てはめると

$$x_1^{(k+1)} = \frac{1}{3} [10 - 2x_2^{(k)} - x_3^{(k)}] \quad (4)$$

$$x_2^{(k+1)} = \frac{1}{4} [12 - x_1^{(k+1)} - x_3^{(k)}] \quad (5)$$

$$x_3^{(k+1)} = \frac{1}{5} [21 - 2x_1^{(k+1)} - 2x_2^{(k+1)}] \quad (6)$$

である．当然，これは $x_1^{(k+1)} \rightarrow x_2^{(k+1)} \rightarrow x_3^{(k+1)}$ の順序で計算を進める．もう少しだけ見た見方をすると，この式は連立方程式 (1)

$$3x_1 + 2x_2 + x_3 = 10 \quad (7)$$

$$x_1 + 4x_2 + x_3 = 12 \quad (8)$$

$$2x_1 + 2x_2 + 5x_3 = 21 \quad (9)$$

から，各行の x_1, x_2, x_3 を解いている式と

$$x_1 = \frac{1}{3} (10 - 2x_2 - x_3) \quad (10)$$

$$x_2 = \frac{1}{4} (12 - x_1 - x_3) \quad (11)$$

$$x_3 = \frac{1}{5} (21 - 2x_1 - 2x_2) \quad (12)$$

と同一である．式 (7) から式 (10) を，式 (8) から式 (11) を，式 (9) から式 (12) を導いているのである．ガウス・ザイデル法の漸化式 (4),(5),(6) は，連立方程式を変形した式 (10),(11),(12) とそっくりである．最初にガウス・ザイデル法を考えた人(ザイデル???)は，連立方程式を式 (10)~(12) のように変形して，繰り返し計算を行えば真の解に近づくと考えたのだろう．ちょっと数値計算になれた者であればすぐに気がつくアルゴリズムである．

2.2 プログラム例

漸化式が求められたので，実際のプログラムを書いてみよう．プログラムの例をリスト 1 に示しておくので，よく理解せよ．

リスト 1: ガウス・ザイデル法のプログラム例

```

1 #include <stdio.h>
2 #include <math.h>
3 #define N (3)           // 連立方程式の大きさ
4 #define EPS (1e-15)    // 計算誤差の許容値
5
6 int main(void){
7     double a[N+1][N+1], x[N+1], b[N+1];
8     double dx, absx, sum, new;
9     int i, j;
10
11     a[1][1]=3.0;  a[1][2]=2.0;  a[1][3]=1.0;  // 係数行列
12     a[2][1]=1.0;  a[2][2]=4.0;  a[2][3]=1.0;
13     a[3][1]=2.0;  a[3][2]=2.0;  a[3][3]=5.0;
14
15     b[1]=10.0;           // 同次項
16     b[2]=12.0;
17     b[3]=21.0;
18
19     x[1]=0.0;           // 近似解の初期値
20     x[2]=0.0;
21     x[3]=0.0;
22
23     do{                 // 反復計算のループ
24         dx=0.0;
25         absx=0.0;
26
27         for (i=1; i<=N; i++){
28             sum=0;
29             for (j=1; j<=N; j++){
30                 if (i != j){
31                     sum+=a[i][j]*x[j];
32                 }
33             }
34
35             new=1.0/a[i][i]*(b[i]-sum); // 反復計算後の近似解
36             dx+=fabs(new-x[i]);        // 近似解の変化量を加算
37             absx+=fabs(new);          // 近似解の総和計算
38             x[i]=new;                 // 新しい近似解を代入
39         }
40
41     }while(dx/absx > EPS);           // 計算終了条件
42
43     for (i=1; i<=N; i++){
44         printf("x[%d]=%25.20f\n", i, x[i]);
45     }
46
47     return 0;
48 }

```

3 コンデンサーの静電容量の計算

反復法を用いて、連立方程式の解を数値計算する練習問題である。ここでは、コンデンサーの静電容量を求める。諸君は電気工学科の学生なので、ちょうど良い練習問題と考えている。ここでの計算アルゴリズムは、有限要素法と呼ばれる方法で、連立方程式の計算が必要になる。後の授業では差分法を学習し、そこでも連立方程式が重要な役割を果たす。

3.1 コンデンサーの性質

コンデンサーの特徴を表すパラメーターにキャパシタンス (静電容量) があることは、十分承知していると思う。これは、いろいろな方法で計算することができる。その中で、私が好んで使う方法は、エネルギーから計算する方法である。これは、電場の状態がキャパシタンスを決める—とっており物理的意味が分かりやすい。空間に電場¹ E が分布している場合、そのエネルギー U は

$$\begin{aligned} U_s &= \frac{1}{2} \int \varepsilon \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} dV \\ &= \frac{1}{2} \int \varepsilon E^2 dV \end{aligned} \quad (13)$$

となる。 $\frac{1}{2}\varepsilon E^2$ が静電場のエネルギー密度になっている。信じられない!!!、それならば次元解析をしてみよ。また、よく知られているように、コンデンサーの電圧 V とキャパシタンス C 、そこにたまっているエネルギーには、

$$U_c = \frac{1}{2} CV^2 \quad (14)$$

の関係がある。コンデンサー内部では、それらは図 1 のような関係になっている。これからも分かるように、コンデンサーの内部には式 (13) が示す静電場のエネルギーが蓄えられている。一方、電気的には、式 (14) が示すエネルギーが蓄えられている。これらのエネルギーは等しいので、

$$\frac{1}{2} \int \varepsilon E^2 dV = \frac{1}{2} CV^2 \quad (15)$$

となる。この式の左辺の電場はいろいろな方法で計算でき、静電場のエネルギーを求めることができる。一方、電圧 V は予め与えられているので、左辺の値を使えば、静電容量が計算できる。要するに、静電場 E を求めることができれば、静電容量 C が計算できるのである。

いままで、よく分からなかった静電容量というものは、コンデンサーに蓄えられるエネルギーを示す指標と考えて良い。私は、この考え方が好きである。なにしろ、分かりやすい。

¹電界とも言う。電圧を距離で割った量

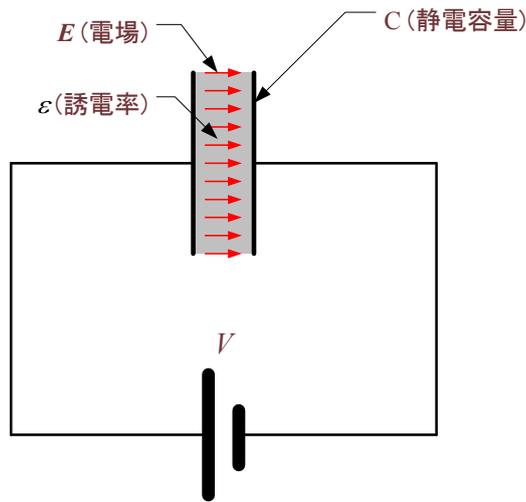


図 1: コンデンサーの様子

3.2 有限要素法

先に示したとおり，コンデンサー内部の電場が分かれば，そのキャパシタンスを求めることができる．それは簡単だ!!; 電圧 V を電極間距離 L で割れば，電場は $E = V/L$ と求められる—という人がある．これは，コンデンサー内部で誘電率が一樣な場合は正しい．そんな単純な問題は，いままでさんざん学習してきた．ここでは，もう少し難しい，誘電率が変化する問題を解くことにする．

誘電率が，3次元 (x, y, z の関数) で変化すると計算が大変なので，1次元問題に限ることにする．2次元や3次元も考え方は同じであるが，計算は大変である．ここで，計算するコンデンサー内部は，図2のとおりとする．誘電率は，座標 x の関数で，変化するものとする．

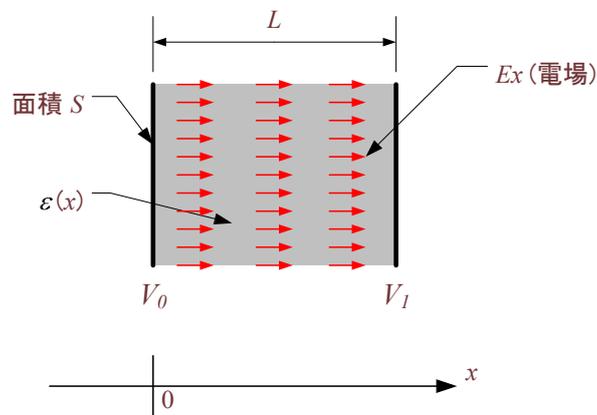


図 2: コンデンサー内部

このような場合の電場はどうなるのであろうか? . 一つの方法は, ポアソン方程式²

$$\nabla^2(\varepsilon\phi) = 0 \quad (16)$$

を解くことにより求めることができる. ここで, ϕ はポテンシャルで, 電圧のことである. 少し気取って書いているのである. この微分方程式を $\phi(0) = V_0, \phi(L) = V_1$ の境界条件で解くことになる. そうすると必要なものが全て計算できるので, 静電容量を計算できる. しかし, 今回は, 別な方法で計算する.

ポアソン方程式の代わりに, コンデンサー内部の電場は, そのエネルギーが最小になるように分布するという原理を使う. 当然, この場合でも, 境界条件 $\phi(0) = V_0, \phi(L) = V_1$ は課せられている. コンデンサーの内部のエネルギーは, 1次元なので,

$$\begin{aligned} U_s &= \frac{1}{2} \int \varepsilon \mathbf{E}_x^2 dV \\ &= \frac{S}{2} \int_0^L \varepsilon \mathbf{E}_x^2 dx \end{aligned} \quad (17)$$

と書ける. ここで, S はコンデンサーの電極の面積である.

このポテンシャル分布をコンピューターに計算させるために, コンデンサーの内部を細かく N 等分に区切る. この様子を図3に示す. すると, エネルギーは

$$\begin{aligned} U_s &= \frac{S}{2} \int_0^L \varepsilon \mathbf{E}_x^2 dx \\ &= \frac{S}{2} \int_0^L \varepsilon \left(\frac{d\phi}{dx} \right)^2 dx \\ &= \frac{S}{2} \sum_{i=1}^N \frac{\varepsilon_i + \varepsilon_{i-1}}{2} \left(\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h} \right)^2 h \\ &= \frac{Sh}{2} \left[\dots + \frac{\varepsilon_i + \varepsilon_{i-1}}{2} \left(\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h} \right)^2 + \frac{\varepsilon_{i+1} + \varepsilon_i}{2} \left(\frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{h} \right)^2 + \dots \right] \end{aligned} \quad (18)$$

となる. ここで, h は, N 当分に区切ったひとつの間隔である.

静電場のエネルギーが最小になるためには, 微分がゼロになる必要がある. このエネルギーをポテンシャル ϕ_i で微分すると

$$\frac{\partial U_s}{\partial \phi_i} = Sh \left[\frac{\varepsilon_i + \varepsilon_{i-1}}{2} \left(\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h} \right) - \frac{\varepsilon_{i+1} + \varepsilon_i}{2} \left(\frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{h} \right) \right] \quad (i = 1, 2, 3, \dots, N-1) \quad (19)$$

となる. U_s が最小値になるためには, $\frac{\partial U_s}{\partial \phi_i} = 0$ となる必要がある. また, コンデンサーの両端の電圧は固定されているので, $\phi_0 = V_0$ で $\phi_N = V_1$ である. 従って, これらをまとめると

$$\begin{cases} \phi_0 = V_0 \\ -(\varepsilon_{i-1} + \varepsilon_i) \phi_{i-1} + (\varepsilon_{i-1} + 2\varepsilon_i + \varepsilon_{i+1}) \phi_i - (\varepsilon_i + \varepsilon_{i+1}) \phi_{i+1} = 0 \\ \phi_N = V_1 \end{cases} \quad (20)$$

² $\nabla \cdot \varepsilon \mathbf{E} = 0$ と $\mathbf{E} = -\nabla \phi$ から求められる.

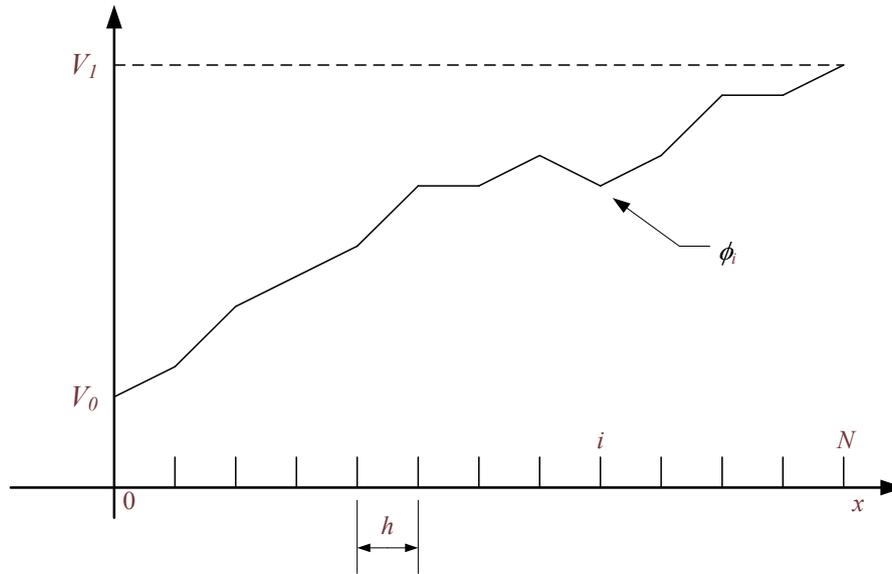


図 3: 分割の様子

となる．要するに，この連立 1 次方程式を計算すれば，任意の誘電率の場合のコンデンサー内部のポテンシャル（電圧）が得られる．ポテンシャルが分かれば，電場が分かり，そうすると内部のエネルギーが計算できる．従って，静電容量が求められるわけである．

ここで示した計算方法は有限要素法と呼ばれている．これは，式 (16) のポアソン方程式³と呼ばれる微分方程式の代わりに，式 (13) の極値となる関数—ここではポテンシャル—を計算するものである⁴．

3.3 計算方法についてコメント

先に示したように，コンデンサー静電容量を求める本質的な計算はポテンシャル ϕ_i （電圧）の分布を求めることにある．それは連立方程式

$$\begin{cases} \phi_0 = V_0 \\ -(\varepsilon_{i-1} + \varepsilon_i) \phi_{i-1} + (\varepsilon_{i-1} + 2\varepsilon_i + \varepsilon_{i+1}) \phi_i - (\varepsilon_i + \varepsilon_{i+1}) \phi_{i+1} = 0 \\ \phi_N = V_1 \end{cases} \quad (21)$$

から求められる． ϕ_0 と ϕ_N は境界条件なので，これは決まった値で計算する必要はない．真ん中の式を，ガウス・ザイデル法の反復を計算するために

$$\phi_i = \frac{1}{\varepsilon_{i-1} + 2\varepsilon_i + \varepsilon_{i+1}} [(\varepsilon_{i-1} + \varepsilon_i) \phi_{i-1} + (\varepsilon_i + \varepsilon_{i+1}) \phi_{i+1}] \quad (22)$$

と変形を行う．あとは単純，これを反復計算すれば近似解が求められる．

³ラプラス方程式と言った方がよいかも．

⁴数学では変分法と言う

4 レポート提出

4.1 課題

[問1]~[問3]のプログラムを作成し,正しい結果を得ること.そして,ソースプログラムと結果を添付してレポートとして提出すること.[問4]以降はできた者のみ提出すること.

[問1] 次の連立方程式をガウス・ザイデル法で計算せよ.

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 6 & 7 & 8 \\ 8 & 7 & 6 & 5 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 4 \\ 6 \\ 8 \end{bmatrix}$$

[問2] [問1]の連立方程式をガウス・ジョルダン法で計算せよ.

[問3] 次の条件でコンデンサーの静電容量を計算せよ.

$$V_0 = 0 \quad V_1 = 1 \quad S = 1 \quad L = 1 \quad \varepsilon = 1$$

ヒント 以下のようにすれば静電容量の計算ができる.

1. 連立方程式 (21) をガウス・ザイデル法により計算して,ポテンシャル ϕ_i を求める.具体的には,式 (22) を計算する.
2. ポテンシャル ϕ_i を用いて,式 (18) を計算し,静電場のエネルギーを計算する.
3. 静電場のエネルギーより,式 (15) を計算して,静電容量を計算する.

[問4] $0 < x < 0.5$ では $\varepsilon = 1$, $0.5 < x < 1.0$ では $\varepsilon = 2$ の場合の静電容量をSOR法で計算せよ.また,手計算の理論式と比較せよ.

[問5] $0 < x < 1$ では $\varepsilon = 1 + x$ の場合の静電容量をSOR法で計算せよ.少し難しいが,理論計算と比較せよ.

4.2 提出方法

期限 11月27日(月)24:00

用紙 A4

提出場所 山本研究室の入口のポスト

表紙 表紙を1枚つけて,以下の項目を分かりやすく記述すること.

授業科目名「計算機応用」

課題名「課題 連立方程式」

5E 学籍番号 氏名

提出日

内容 2ページ以降に課題を記述すること.