

これまでのまとめ (学年末試験に向けて)

山本昌志*

2008年1月31日

概要

学年末試験に向けて、これまで学習した内容をまとめる。学年末試験の範囲は、(1) 数値積分、(2) 差分法による偏微分方程式である。これらの重要な部分を理解して試験に臨むこと。

1 はじめに

このプリントは、学年末試験に向けて学習のポイントを示すものである。後期の中間試験以降の学習内容は、次のとおりであった。

- 数値積分
 - 台形公式
 - シンプソンの公式
 - モンテカルロ積分
- 差分法による偏微分方程式の数値計算
 - ラプラス方程式
 - 波動方程式

これら学習した内容について、エッセンスを簡単にまとめてある。学習の最重要ポイントをできるだけ簡単に示しているので、しっかり勉強してほしい。このプリントを見ながら、分からない部分は授業中配ったプリントで補い、理解することが学習のこつである。

数値計算のいろいろな技術を学習したが、ほとんど全ての方法は1つの式に要約できる。この式を導き、それを使いこなせれば、ここでの授業での学習は完璧である。学年末試験では、使いこなせるか否かを調べることは難しいので、式を導くことを中心に出題する。プログラムを出さないわけではない。

*独立行政法人 秋田工業高等専門学校 電気工学科

2 数値積分

2.1 台形公式

2.1.1 公式

定積分，

$$S = \int_a^b f(x)dx \quad (1)$$

の近似値を数値計算で求めることを考える．積分の計算は面積の計算であるから，図 1 のように台形の面積の和で近似ができるであろう．積分の範囲 $[a, b]$ を N 等分した台形で近似した面積 T は，

$$\begin{aligned} T &= h \frac{f(a) + f(a+h)}{2} + h \frac{f(a+h) + f(a+2h)}{2} + h \frac{f(a+2h) + f(a+3h)}{2} + \dots \\ &\quad + h \frac{f(a+(N-1)h) + f(a+Nh)}{2} \quad (2) \\ &= \frac{h}{2} \sum_{j=0}^{N-1} [f(a+jh) + f(a+(j+1)h)] \end{aligned}$$

となる．これが数値積分の台形公式である．なんのことはない，積分を台形の面積に置き換えているだけである．

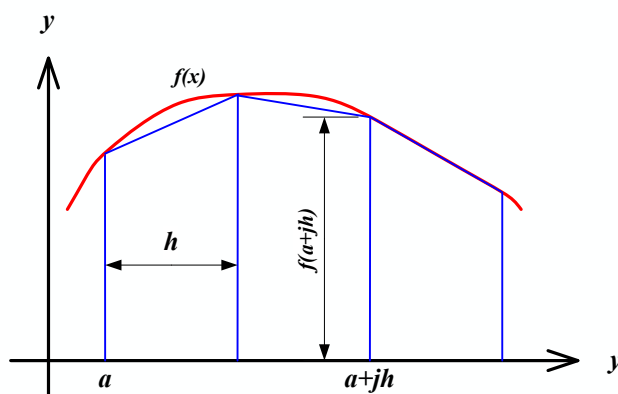


図 1: 積分と台形の面積の比較

2.1.2 プログラム例

以下の定積分を台形公式を使い計算するプログラム例をリスト 1 にしめす．

リスト 1: 台形公式を使い $\int_0^1 \sin^2 x dx$ を計算するプログラム

```

1 #include <stdio.h>
2 #include <math.h>
3 #define N 1000 // 分割数
4
5 double f(double x); // プロトタイプ宣言
6
7 //===== メイン関数 =====
8 int main(void)
9 {
10     double a, b, h;
11     double t=0;
12     int j;
13
14     a=0; // 積分の左端
15     b=2*M_PI; // 積分の右端
16
17     h=(b-a)/N;
18
19     for(j=0; j<N; j++){
20         t += f(a+j*h)+f(a+(j+1)*h);
21     }
22     t *= h/2;
23
24     printf("Integral = %e\n", t);
25
26     return 0;
27 }
28
29 //===== 関数 =====
30 double f(double x)
31 {
32     double y;
33
34     y=sin(x)*sin(x);
35
36     return y;
37 }
38

```

2.2 シンプソンの公式

台形公式の考え方は簡単であるが、精度はあまりよくない。そこで、よく似た考え方で精度が良いシンプソンの公式を説明する。台形公式は、分割点の値を一次関数(直線)で近似を行い積分を行った。要するに折れ線近似である。ここで、1次関数ではなく、高次の関数で近似を行えばより精度が上がることは、直感的に分かる。

2次関数で近似を行うことを考える。2次関数で近似するためには、3点必要である。3つの分点をそれぞれ、 (x_j, x_{j+1}, x_{j+2}) とする。そして、この2次関数を $P(x)$ とする。 $P(x)$ はラグランジュ補間に他なら

ないので,

$$P(x) = \frac{(x - x_{j+1})(x - x_{j+2})}{(x_j - x_{j+1})(x_j - x_{j+2})} f(x_j) + \frac{(x - x_j)(x - x_{j+2})}{(x_{j+1} - x_j)(x_{j+1} - x_{j+2})} f(x_{j+1}) + \frac{(x - x_j)(x - x_{j+1})}{(x_{j+2} - x_j)(x_{j+2} - x_{j+1})} f(x_{j+2}) \quad (3)$$

となる．図 2 に示すとおりである．

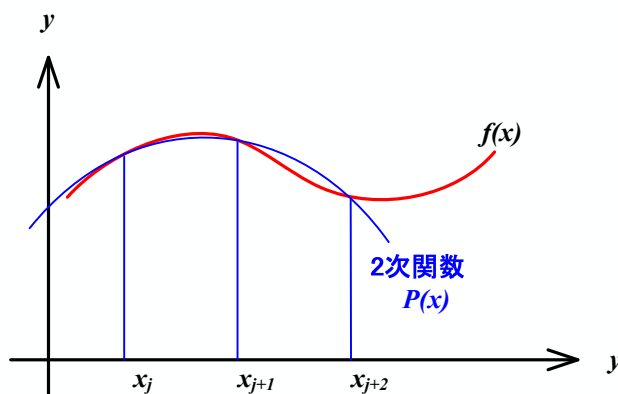


図 2: 元の関数を区間 $[x_j, x_{j+2}]$ を 2 次関数で近似する

これを，区間 $[x_j, x_{j+2}]$ で積分する．紙面の都合上，式 (3) の右辺を各項毎に積分を行う．まず，右辺第 1 項であるが，それは以下のようなになる．

$$\begin{aligned} \text{式 (3) 右辺第 1 項の積分} &= \int_{x_j}^{x_{j+2}} \frac{(x - x_{j+1})(x - x_{j+2})}{(x_j - x_{j+1})(x_j - x_{j+2})} f(x_j) dx \\ &= \int_0^{2h} \frac{(x_j + \xi - x_{j+1})(x_j + \xi - x_{j+2})}{(x_j - x_{j+1})(x_j - x_{j+2})} f(x_j) d\xi \\ &= \int_0^{2h} \frac{(\xi - h)(\xi - 2h)}{(-h)(-2h)} f(x_j) d\xi \\ &= \frac{f(x_j)}{2h^2} \int_0^{2h} (\xi^2 - 3h\xi + 2h^2) d\xi \\ &= \frac{f(x_j)}{2h^2} \left[\frac{\xi^3}{3} - 3h\frac{\xi^2}{2} + 2h^2\xi \right]_0^{2h} \\ &= \frac{h}{3} f(x_j) \end{aligned} \quad (4)$$

同様に，第 2,3 項を計算すると

$$\text{式 (3) 右辺第 2 項の積分} = \frac{4h}{3} f(x_{j+1}) \quad (5)$$

$$\text{式 (3) 右辺第 3 項の積分} = \frac{h}{3} f(x_{j+2}) \quad (6)$$

となる．以上より，近似した 2 次関数 $P(x)$ の範囲 $[x_j, x_{j+2}]$ の積分は，

$$\int_{x_j}^{x_{j+2}} P(x)dx = \frac{h}{3} \{f(x_j) + 4f(x_{j+1}) + f(x_{j+2})\} \quad (7)$$

となる．

これは，ある区間 $[x_j, x_{j+2}]$ の積分で，その巾は $2h$ である．区間 $[a, b]$ にわたっての積分 S は，式 (7) を足し合わせればよい．ただし， $j = 0, 2, 4, 6$ と足し合わせる．

$$\begin{aligned} S &= \frac{h}{3} \{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\} + \frac{h}{3} \{f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)\} + \frac{h}{3} \{f(x_4) + 4f(x_5) + f(x_6)\} + \cdots \\ &\quad \cdots + \frac{h}{3} \{f(x_{N-2}) + 4f(x_{N-1}) + f(x_N)\} \\ &= \frac{h}{3} \{f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + 4f(x_5) + 2f(x_6) + \cdots \\ &\quad \cdots + 2f(x_{N-2}) + 4f(x_{N-1}) + f(x_N)\} \end{aligned} \quad (8)$$

これが，シンプソンの公式と呼ばれるもので，先ほどの台形公式よりも精度が良い．精度は， N^4 に反比例する．

この式から，分割数 N は偶数でなくてはならないことがわかる．

2.3 モンテカルロ法

積分の境界が複雑な場合，乱数を使うモンテカルロ積分が適している．例えば，関数 $f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_M)$ の体積積分を考える．この体積積分は

$$\int_{\Omega} f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_M) dx_1 dx_2 dx_3 \cdots dx_M = V_{\Omega} \langle f \rangle \quad (9)$$

となる．ここで， V は M 次元体の領域 Ω の体積， $\langle f \rangle$ はその内部の関数の平均値である．これは 3 次元体の質量を考えると簡単である．その質量は，密度の体積積分となる．これは体積に平均密度を乗じた値に等しい．当たり前の式である．このことから，式 (9) の積分の値が欲しければ，体積と平均値が分かればよいことになる．

積分を計算するために，まずは体積である．これは体積の計算が容易な単純な形状の内部に，領域 Ω を包み込み，その内部にランダムに配置されたサンプル点の数を数えれば良いのである．単純な形状内部に配置されたランダムな点の数を N とする．そして，その内部にある積分領域 Ω に含まれる点の数を N_{Ω} とする．さらに，単純な形状の体積を V_r ，領域 Ω のそれを V_{Ω} とすると，

$$V_{\Omega} \simeq \frac{N_{\Omega}}{N} V_r \quad (10)$$

の関係がある．右辺はコンピューターにより容易に計算できる．ランダムな点の数 N が多くなればなるほど，近似の精度は良くなる．

残りは，体積内部の平均 $\langle f \rangle$ である．これも簡単で，領域 Ω 内部にあるサンプル点の平均より求めることができる．即ち，

$$\langle f \rangle \simeq \frac{1}{N_{\Omega}} \sum_i f(\mathbf{r}_i) \quad \text{領域 } \Omega \text{ の内部のみ} \quad (11)$$

となる．ここで， r_i は i 番目のサンプル点の $(x_1, x_2, x_3, \dots, x_M)$ 座標である．また， N_Ω は領域内部のサンプル数である．この計算も簡単で，コンピューターは難なく，平均値の近似値を計算することができる．

以上より，モンテカルロ法を用いると，体積 V と平均値 $\langle f \rangle$ の近似値が計算できることが分かる．従って，式 (9) の近似値を求めることができる．

3 差分法による偏微分方程式の数値計算

3.1 ラプラス方程式

2次元のラプラス方程式

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (12)$$

を数値計で解くことを考える．まずは，いつものように，解 $\phi(x, y)$ をテイラー展開する． x 方向に微小変位 $\pm h$ があつた場合，

$$\phi(x+h, y) = \phi(x, y) + \frac{\partial \phi}{\partial x} h + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} h^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} h^3 + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} h^4 + \dots \quad (13)$$

$$\phi(x-h, y) = \phi(x, y) - \frac{\partial \phi}{\partial x} h + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} h^2 - \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} h^3 + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4 \phi}{\partial x^4} h^4 - \dots \quad (14)$$

となる．これらの式の辺々を足し合わせると，

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|_{x,y} = \frac{1}{h^2} [\phi(x+h, y) - 2\phi(x, y) + \phi(x-h, y)] - O(h^2) \quad (15)$$

が得られる．このことから，2階の偏導関数の値は微小変位 h の場所の関数の値を用いて， h^2 の精度で近似計算ができることが分かる．すなわち，式 (15) の $O(h^2)$ を除いた右辺を計算すればよいのである．同じことを y 方向についても行うと

$$\left. \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right|_{x,y} = \frac{1}{h^2} [\phi(x, y+h) - 2\phi(x, y) + \phi(x, y-h)] - O(h^2) \quad (16)$$

が得られる．

これらの式 (15) と (16) を元の2次元ラプラス方程式 (12) に代入すれば，

$$\phi(x+h, y) + \phi(x-h, y) + \phi(x, y+h) + \phi(x, y-h) - 4\phi(x, y) = 0 \quad (17)$$

となる．これが，2次元ラプラス方程式の差分の式である．この式を眺めると，座標 (x, y) のポテンシャルの値 $\phi(x, y)$ は，周りの値の平均であることがわかる．

実際にこの式を数値計算する場合，計算領域を間隔 h で格子状¹に区切り，その交点での値を求めることになる．ここでは， x および y 方向には等間隔 h で区切り計算を進めるが，等間隔である必要はない．多少，式 (17) は異なるが同じような計算は可能である．これまでの説明が理解できていれば， x と y 方向の間隔が異なっても，式 (17) に対応する差分の式が作れるはずである．

¹この格子のことをメッシュ(mesh)と言う事もある．

実際，数値計算をする場合， $\phi(x, y)$ や $\phi(x + h, y)$ の形は不便なので，形式を改める．各格子点でのポテンシャルを

$$\begin{aligned}\phi(x, y) &= \phi(ih, jh) \\ &= U_{ij}\end{aligned}\tag{18}$$

とする．このようにすると，式 (17) は

$$U_{i+1j} + U_{i-1j} + U_{ij+1} + U_{ij-1} - 4U_{ij} = 0\tag{19}$$

となり，数値計算し易い形になる．

ラプラス方程式は式 (19) の連立方程式を解くだけである．格子に領域を分割することにより，難しいな偏微分方程式が連立方程式に還元されたわけである．

連立方程式を解くわけであるが，このままでは，式の数と未知数の数が異なる．格子点でのポテンシャルの値を求めるためには，境界条件を設定する必要がある．それにより，式の数と未知数の数が同一になり，格子点でのポテンシャルを求めることができる．

3.2 波動方程式

弦の長さが 1，そこを伝わる波の速度を 1 として，弦の横波の様子を数値計算で解くことを考える．1 次元波動方程式をコンピューターを用いて近似計算するのである．計算に移る前に，解くべき方程式と条件をきちんと書いておく．解くべき方程式と条件は，

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} & (0 \leq x \leq 1, \quad 0 \leq t) \\ u(x, 0) = \phi(x), \quad \frac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = \psi(x) & (0 \leq x \leq 1) \\ u(0, t) = u(1, t) = 0 \end{cases}\tag{20}$$

となる．この最初の式は波動方程式，2 番目を初期条件，3 番目を境界条件と言う．

波動方程式を解くためには，初期条件と境界条件が必要である．ある時刻の位置と速度が決まれば，それ以降を力学的状態は決まってしまう—ということに対応している．振動の場合は，これに加えて更に，振動の境界条件を決める必要がある．これらが決まって初めて，振動の状態—ある時刻の変位と速度—が決まるわけである．図 3 に初期条件と境界条件の様子を示す．

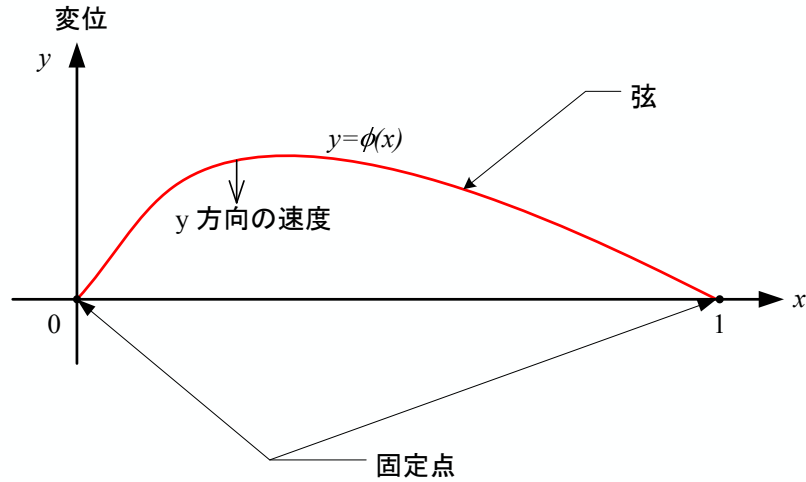


図 3: 時刻 $t = 0$ のときの弦の様子 (スナップショット) . 初期条件と境界条件が表されており , y 方向の速度が $\psi(x)$ になっている .

まずは , 波動方程式を差分方程式に書き直すことから始める . これも , いつものように , 解 $u(x, t)$ をテイラー展開する . x 方向の微小変位を Δx , 時間軸方向の微小変位を Δt とする . すると ,

$$\begin{aligned} u(x + \Delta x, t) &= u(x, t) + \frac{\partial u}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} (\Delta x)^2 + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} (\Delta x)^3 + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} (\Delta x)^4 + \dots \\ u(x - \Delta x, t) &= u(x, t) - \frac{\partial u}{\partial x} \Delta x + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} (\Delta x)^2 - \frac{1}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} (\Delta x)^3 + \frac{1}{4!} \frac{\partial^4 u}{\partial x^4} (\Delta x)^4 - \dots \end{aligned} \quad (21)$$

となる . これらの式の辺々を足し合わせると ,

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right|_{x,t} = \frac{1}{\Delta x^2} [u(x + \Delta x, t) - 2u(x, t) + u(x - \Delta x, t)] - O(\Delta x^2) \quad (22)$$

が得られる . このことから , 2 階の偏導関数の値は微小変位 Δx の場所の関数の値を用いて , $(\Delta x)^2$ の精度で近似計算ができることが分かる . すなわち , 式 (22) の右辺の第 1 項を計算すればよいのである . ラプラス方程式と同じである . 同様なことを時間軸方向についても行うと

$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right|_{x,t} = \frac{1}{\Delta t^2} [u(x, t + \Delta t) - 2u(x, t) + u(x, t - \Delta t)] - O(\Delta t^2) \quad (23)$$

が得られる .

これらの式 (22) と (23) を元の波動方程式 (20) に代入すれば ,

$$\frac{1}{\Delta x^2} [u(x + \Delta x, t) - 2u(x, t) + u(x - \Delta x, t)] = \frac{1}{\Delta t^2} [u(x, t + \Delta t) - 2u(x, t) + u(x, t - \Delta t)] \quad (24)$$

となる。これが、1次元波動方程式の差分の式である。この式を計算し易いように、もう少し変形すると、

$$u(x, t + \Delta t) = 2u(x, t) - u(x, t - \Delta t) + \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} [u(x + \Delta x, t) - 2u(x, t) + u(x - \Delta x, t)] \quad (25)$$

とすることができる。この式の右辺は、時刻 t と $t - \Delta t$ の値である。そして、左辺は時刻 $t + \Delta t$ の値である。このことから、式 (25) を用いると、時刻 t と $t - \Delta t$ の値から、 $t + \Delta t$ の値が計算できることになる。

実際に式 (25) を数値計算する場合、 x 方向には Δx 、時間軸方向には Δt 毎に分割する。ラプラス方程式を格子点で分割したのと同じである。格子点に分割し数値計算する場合、 $u(x, t)$ や $u(x + \Delta x, t)$ と表現するよりは、 u_{ij} と表現したほうが便利である。そこで、

$$\begin{aligned} u(x, t) &= \phi(i\Delta x, j\Delta t) \\ &= u_{ij} \end{aligned} \quad (26)$$

と表現を改める。このようにすると、式 (25) は

$$u_{ij+1} = 2u_{ij} - u_{ij-1} + \alpha (u_{i+1j} - 2u_{ij} + u_{i-1j}) \quad (27)$$

となり、数値計算し易い形になる。ただし、

$$\alpha = \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} \quad (28)$$

である。