これまでのまとめ(学年末試験に向けて)

山本昌志*

2004 年 2 月 11 日

1 はじめに

学年末試験に向けて、学習のポイントを示す。後期の中間試験から、これまで以下について数値計算の学習を行った。

- 補間法
  - ラグランジュの補間法
  - スプライン補間法
- 数値積分
  - 台形公式
  - シンプソンの公式
- 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

ここでは、これらについて、簡単にまとめてある。これが学習の最重要ポイントであ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方法を学習したが、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。

*国立秋田工業高等専門学校　電気工学科

2　補間法

実験やシミュレーションを行うと、離散的にデータが得られるのは普通である。例えば、半導体の電圧・電圧特性の測定では、(V_0, I_0), (V_1, I_1), (V_2, I_2), (V_3, I_3), $\cdots$, (V_N, I_N) のようなデータが得られる。通常、このデータはグラフ化して解析を進める。このデータの場合、2 次元のグラフ上に測定点が並ぶことは、今まで学習してきたとおりである。

実験等を通して得られる結果は離散的であるが、実際の現象は連続的なことが多い。この離散的な値を用いて、測定点の間の値、ここでは電流と電圧の関係を求めるのが補間法の役割である。ここで学習したラグランジュ補間もスプライン補間も、全てのグラフ上の測定点を通る曲線の方程式を求めている。

2 次元のグラフ上の点は、数学では座標 (x, y) の点として与えられる。以降の説明では、電圧・電流などのように特定の問題にとらわれないよう、一般化した座標 (x, y) で話を進める。

2.1　ラグランジュ補間

平面座標上に $N+1$ 個の点がある場合、その全ての点を通る曲線は N 次関数で表せることは、数学で学習したとおりである[1]。2 個の場合、1 次関数、すなわち直線で、その 2 点を通る関数を決めることができる。3 点の場合は、2 次関数である。

この性質を利用すると、$N+1$ 個の点がある場合、N 次関数で補間できることが分かる。ラグランジュ補間とは、まさにこのことそのものである。数学の授業で、ある 3 点 (x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2) を通る 2 次関数 $y = ax^2 + by + c$ の a, b, c を求めたことがあると思うが、それと同じである。そこでは、それぞれの x と y の値を代入して、連立方程式をつくり a, b, c を求めたはずである。

コンピューターを用いて、$N+1$ 個の点を通る N 次方程式を $N+1$ 個の係数を連立方程式を解くことにより求めることは可能である。しかし、最終目的の N 次関数の値を求めると言う意味では不経済である。補間という目的からすると、関数を形成する係数なんか、全く興味の対象外なのである。そこで、係数が分からなくても、N 次関数を示すものとして、ラグランジュ補間が使われる。

2 次元座標上に $N+1$ 個の点、(x_0, y_0) , (x_1, y_1), (x_2, y_2), $\cdots$, (x_N, y_N) のラグランジュ補間は、

$$
\begin{aligned}
y = &\frac{(x-x_1)(x-x_2)(x-x_3)\cdots(x-x_N)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)(x_0-x_3)\cdots(x_0-x_N)}y_0 + \frac{(x-x_0)(x-x_2)(x-x_3)\cdots(x-x_N)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)(x_1-x_3)\cdots(x_1-x_N)}y_1 \\
&+ \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)\cdots(x-x_N)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)(x_2-x_3)\cdots(x_2-x_N)}y_2 + \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_N)}{(x_3-x_0)(x_3-x_1)(x_3-x_2)\cdots(x_3-x_N)}y_3 \\
&\cdots + \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_N)}{(x_k-x_0)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_N)}y_k + \cdots \\
&\quad + \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_3)\cdots(x-x_{N-1})}{(x_N-x_0)(x_N-x_1)(x_N-x_2)\cdots(x_N-x_{N-1})}y_N
\end{aligned}
\tag{1}
$$

となる。

この式 (1) を見ると、

- 各項の分母は定数で、分子は N 次関数である。このことから、全ての項は N 次関数になっていることが理解できる。したがって、この式は N 次関数 (N 次多項式) である。

[1] x が同じで y が異なる複数の点が存在するような特別な場合を除く。

- x に $x_0, x_1, x_2, \cdots, x_N$ を代入すると、y の値は $y_0, y_1, y_1, \cdots, x_N$ になることが分かる。これは、データ点 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_N, y_N)$ の全てを通過していることを示している。

となっている。

(1) をもうちょっと格好良く書けば、

$$
\begin{aligned}
L(x) &= \sum_{k=0}^{N} L_k(x) y_k \\
\text{ただし、}\quad L_k(x) &= \prod_{j=0}^{N(j \neq k)} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}
\end{aligned}
\tag{2}
$$

となる。

ラグランジュ補間の考え方は単純で、その計算も簡単である。しかし、補間の点数が増えてくると、ラグランジュの補間には問題が生じる。ラグランジュの補間では、補間の点数が増えてくると大きな振動が発生して、もはや補間とは言えなくなる。ラグランジュの補間には常にこの問題が付きまうので、データ点数が多い場合は使えなくなる。

2.2 スプライン補間

2.2.1 区分多項式

ラグランジュの補間は、データ点数が増えてくると関数が振動し問題が発生する。そこで、補間する領域をデータ間隔 $[x_i, x_{i+1}]$ に区切り、その近傍の値を使い低次の多項式で近似することを考える。区分的な関数を使うことになるが、上手に近似をしないと境界でその導関数が不連続になる。導関数が連続になるように、上手に近似する方法がスプライン補間 (spline interpolation) である。

ここでは、通常よくつかわれる 3 次のスプライン補間を考えまる。補間する関数として、3 次関数を使うためそう呼ばれているのである。これ以降の説明は、文献 [1] を参考にしました。

補間をするデータは、先と同じように $(x_0, y_0), (x_1, y_1), (x_2, y_2), \cdots, (x_N, y_N)$ とする。そして、区間 $[x_j, x_{j+1}]$ で補間をする関数を $S_j(x)$ とする。この様子を図 1 に示す。

2.2.2 係数が満たす式

3 次のスプライン補間を考えるので、

$$
S_j(x) = a_j(x - x_j)^3 + b_j(x - x_j)^2 + c_j(x - x_j) + d_j \qquad (j = 0, 1, 2, 3, \cdots, N-1)
\tag{3}
$$

となる。スプライン補間を行う場合、この a_j, b_j, c_j, d_j を決めることが、主な作業である。

これらの $4N$ 個の未知数を決めるためには、$4N$ 個の方程式が必要である。そのために、3 次のスプライン補間に以下の条件を課すことにする。

- 全てのデータ点を通る。各々の $S_j(x)$ に対して両端での値が決まるため、$2N$ 個の方程式ができる。

- 各々の区分補間式は、境界点の 1 次導関数は連続とする。これにより、$N-1$ 個の方程式ができる。

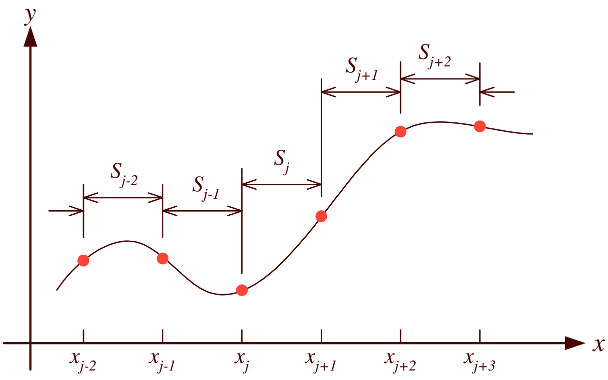

図 1: スプライン補間の区分

- 各々の区分補間式は、境界点の 2 次導関数は連続とする。これにより、$N-1$ 個の方程式ができる。

以上の条件を課すと $4N-2$ 個の方程式が決まる。未知数は $4N$ 個なので、2 個方程式が不足している。この不足を補うために、いろいろな条件が考えられるが、通常は両端 x_0 と x_N での 2 次導関数の値を 0 とする。すなわち、$S_0''(x_0)=S_{N-1}''(x_N)=0$ である。これを自然スプライン (natural spline) と言う。自然スプライン以外には、両端の 1 次導関数の値を指定するものもある。

これで全ての条件が決まった。あとは、この条件に満たす連立方程式を求めるだけである。まずは、2 次導関数が区分関数の境界で等しいという条件からはじめる。$x=x_j$ における 2 次導関数の値を u_j とする。すなわち、

$$u_j = S''(x_j) \qquad (j=0,1,2,\cdots,N) \tag{4}$$

である。$u_j=S_{j-1}''(x_j)=S_j''(x_j)$ とするので、2 次導関数の条件は満足されたことになる。この式から、

$$u_j = S_j''(x_j) = 2b_j \qquad (j=0,1,2,\cdots,N-1) \tag{5}$$

となる。これから、

$$b_j = \frac{u_j}{2} \tag{6}$$

が、直ちに導ける。ここで、スプライン補間の係数、すなわち計算で求めるべき b_j を u_j で表した理由がある。以降の議論を見ると分かるように、u_j を連立方程式で計算することにより、他の係数を求めることができる。そのようなわけで、できるだけ u_j で表現するようにする。

さらに 2 次導関数の計算から、

$$u_{j+1} = S_j''(x_{j+1}) = 6a_j(x_{j+1}-x_j)+2b_j \qquad (j=0,1,2,\cdots,N-1) \tag{7}$$

が導ける。この式から、a_j を計算すると、

$$\begin{aligned} a_j &= \frac{u_{j+1}-2b_j}{6(x_{j+1}-x_j)} \\ &= \frac{u_{j+1}-u_j}{6(x_{j+1}-x_j)} \qquad (j=0,1,2,\cdots,N-1) \end{aligned} \tag{8}$$

となる。これで、2 次導関数の条件は終わり。

つぎに、全てのデータ点上を通過する (最初の条件) という条件を考える。まずは、区分の左端の点から、

$$d_j = y_j \tag{9}$$

が直ちに導ける。つぎに、区分の右端の点から

$$a_j(x_{j+1} - x_j)^3 + b_j(x_{j+1} - x_j)^2 + c_j(x_{j+1} - x_j) + d_j = y_{j+1} \tag{10}$$

が導ける。式 (6),(8),(9) を用いると、

$$\begin{aligned} c_j &= \frac{1}{x_{j+1} - x_j}\left[y_{j+1} - a_j(x_{j+1} - x_j)^3 - b_j(x_{j+1} - x_j)^2 - d_j\right] \\ &= \frac{1}{x_{j+1} - x_j}\left[y_{j+1} - \frac{u_{j+1} - u_j}{6(x_{j+1} - x_j)}(x_{j+1} - x_j)^3 - (x_{j+1} - \frac{u_j}{2}x_j)^2 - y_i\right] \\ &= \frac{y_{j+1} - y_i}{x_{j+1} - x_j} - \frac{1}{6}(x_{j+1} - x_j)(2u_j + u_{j+1}) \end{aligned} \tag{11}$$

となる。

これで、a_j と b_j、c_j、d_j が x_j と y_j、u_j で表現できた。x_j と y_j はデータ点なので、値はわかっている。したがって、u_j が分かれば、補間に必要な係数が全て分かる。

2.2.3 連立方程式

それでは、u_j をどうやって求めるか?。これは、まだ使われていない条件、1 次導関数が境界点で等しい

$$S'(x_{j+1}) = S'_j(x_{j+1}) = S'_{j+1}(x_{j+1}) \qquad (j = 0, 1, 2, \cdots, N-2) \tag{12}$$

を使う。これと式 (3) から、

$$3a_j(x_{j+1} - x_j)^2 + 2b_j(x_{j+1} - x_j) + c_j = c_{j+1} \tag{13}$$

となる。あとは、この式の a_j と b_j、c_j を x_j と y_j、u_j で表して、u_j の連立方程式にすればよい。最終的に式は、

$$(x_{j+1} - x_j)u_j + 2(x_{j+2} - x_j)u_{j+1} + (x_{j+2} - x_{j+1})u_{j+2} = 6\left[\frac{y_{j+2} - y_{j+1}}{x_{j+2} - x_{j+1}} - \frac{y_{j+1} - y_j}{x_{j+1} - x_j}\right] \tag{14}$$

となる。これは $j = 0, 1, 2, \cdots, N-2$ で成立するので、$N-1$ 元連立方程式である。u_j の数は $N+1$ 個あるが、$u_0 = u_N = 0$ なので、未知の u_j は $N-1$ 個となる。式 (14) を解くことにより、全ての u_j が決定できる。これが決まれば、a_j と b_j、そして c_j が計算できる。

$u_0 = u_N = 0$ を代入した連立 1 次方程式は、

$$\begin{pmatrix} 2(h_0+h_1) & h_1 & & & & & \\ h_1 & 2(h_1+h_2) & h_2 & & & \text{\Large 0} & \\ & h_2 & 2(h_2+h_3) & h_3 & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & h_{j-1} & 2(h_{j-1}+h_j) & h_j & \\ & \text{\Large 0} & & & & \ddots & \\ & & & & & h_{N-2} & 2(h_{N-2}+h_{N-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_j \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ v_j \\ \vdots \\ v_{N-1} \end{pmatrix} \tag{15}$$

である。ただし、h_j と v_j は以下のとおり。

$$h_j = x_{j+1} - x_j \qquad (j = 0, 1, 2, \cdots, N-1) \tag{16}$$

$$v_j = 6\left[\frac{y_{j+1} - y_j}{h_j} - \frac{y_j - y_{j-1}}{h_{j-1}}\right] \qquad (j = 0, 1, 2, \cdots, N-1) \tag{17}$$

3 数値積分

3.1 台形公式

定積分、

$$S = \int_a^b f(x)dx \tag{18}$$

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 2 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、

$$\begin{aligned} T &= h\frac{f(a)+f(a+h)}{2} + h\frac{f(a+h)+f(a+2h)}{2} + h\frac{f(a+2h)+f(a+3h)}{2} + \cdots \\ &\qquad + h\frac{f(a+(N-1)h)+f(a+Nh)}{2} \\ &= \frac{h}{2}\sum_{j=0}^{N-1}\left[f(a+jh)+f(a+(j+1)h)\right] \end{aligned} \tag{19}$$

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。

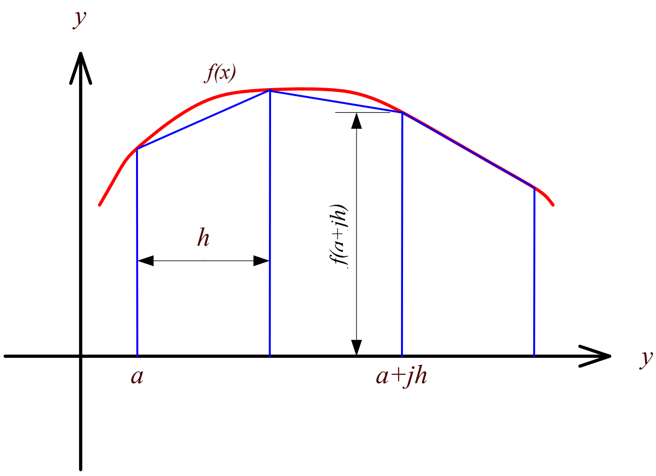

図 2: 積分と台形の面積の比較

4　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、

$$P(x) = \frac{(x-x_{j+1})(x-x_{j+2})}{(x_j-x_{j+1})(x_j-x_{j+2})}f(x_j) + \frac{(x-x_j)(x-x_{j+2})}{(x_{j+1}-x_j)(x_{j+1}-x_{j+2})}f(x_{j+1}) + \frac{(x-x_j)(x-x_{j+1})}{(x_{j+2}-x_j)(x_{j+2}-x_{j+1})}f(x_{j+2}) \qquad (20)$$

となる。図 3 に示すとおりである。

これを、区間 $[x_j, x_{j+2}]$ で積分する。紙面の都合上、式 (20) の右辺を各項毎に積分を行う。まず、右辺

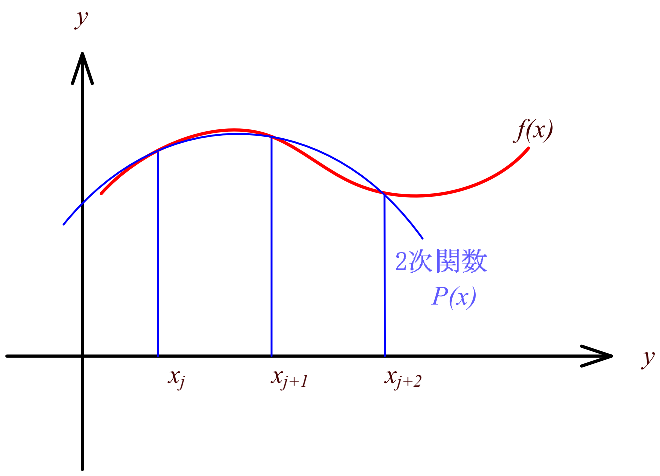

図 3: 元の関数を区間 $[x_j, x_{j+2}]$ を 2 次関数で近似する

第 1 項であるが、それは以下のようになる。

$$
\begin{aligned}
\text{式 (20) 右辺第 1 項の積分} &= \int_{x_j}^{x_{j+2}} \frac{(x-x_{j+1})(x-x_{j+2})}{(x_j-x_{j+1})(x_j-x_{j+2})} f(x_j)dx \\
&= \int_0^{2h} \frac{(x_j+\xi-x_{j+1})(x_j+\xi-x_{j+2})}{(x_j-x_{j+1})(x_j-x_{j+2})} f(x_j)d\xi \\
&= \int_0^{2h} \frac{(\xi-h)(\xi-2h)}{(-h)(-2h)} f(x_j)d\xi \\
&= \frac{f(x_j)}{2h^2} \int_0^{2h} \xi^2 - 3h\xi + 2h^2 d\xi \\
&= \frac{f(x_j)}{2h^2} \left[\frac{\xi^3}{3} - 3h\frac{\xi^2}{2} + 2h^2\xi \right]_0^{2h} \\
&= \frac{h}{3} f(x_j)
\end{aligned}
\tag{21}
$$

同様に、第 2,3 項を計算すると

$$
\text{式 (20) 右辺第 2 項の積分} = \frac{4h}{3} f(x_{j+1}) \tag{22}
$$

$$
\text{式 (20) 右辺第 3 項の積分} = \frac{h}{3} f(x_{j+2}) \tag{23}
$$

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、

$$
\int_{x_j}^{x_{j+2}} P(x)dx = \frac{h}{3} \left\{ f(x_j) + 4f(x_{j+1}) + f(x_{j+2}) \right\} \tag{24}
$$

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 (24)

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。

$$
\begin{aligned}
S &= \frac{h}{3}\left\{f(x_0)+4f(x_1)+f(x_2)\right\}+\frac{h}{3}\left\{f(x_2)+4f(x_3)+f(x_4)\right\}+\frac{h}{3}\left\{f(x_4)+4f(x_5)+f(x_6)\right\}+\cdots \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\cdots+\frac{h}{3}\left\{f(x_{N-2})+4f(x_{N-1})+f(x_N)\right\} \\
&= \frac{h}{3}\left\{f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+2f(x_4)+4f(x_5)+2f(x_6)+\cdots\right. \\
&\qquad\qquad\qquad\qquad\left.\cdots+2f(x_{N-2})+4f(x_{N-1})+f(x_N)\right\}
\end{aligned}
\tag{25}
$$

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。

5 差分法による偏微分方程式の数値計算

5.1 ラプラス方程式

2 次元のラプラス方程式

$$
\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}=0 \tag{26}
$$

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 および、y 方向に微小変位 $\pm h$ があった場合、

$$
\phi(x+h,y)=\phi(x,y)+\frac{\partial\phi}{\partial x}h+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}h^2+\frac{1}{3!}\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}h^3+\frac{1}{4!}\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}h^4+\cdots \tag{27}
$$

$$
\phi(x-h,y)=\phi(x,y)-\frac{\partial\phi}{\partial x}h+\frac{1}{2!}\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}h^2-\frac{1}{3!}\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}h^3+\frac{1}{4!}\frac{\partial^4\phi}{\partial x^4}h^4-\cdots \tag{28}
$$

となる。これらの式の辺々を足し合わせえると、

$$
\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right|_{x,y}=\frac{1}{h^2}\left[\phi(x+h,y)-2\phi(x,y)+\phi(x-h,y)\right]-O(h^2) \tag{29}
$$

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 (29) 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

$$
\left.\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2}\right|_{x,y}=\frac{1}{h^2}\left[\phi(x,y+h)-2\phi(x,y)+\phi(x,y-h)\right]-O(h^2) \tag{30}
$$

が得られる。

これらの式 (29) と (30) を元の 2 次元ラプラス方程式 (26) に代入すれば、

$$
\phi(x+h,y)+\phi(x-h,y)+\phi(x,y+h)+\phi(x,y-h)-4\phi(x,y)=0 \tag{31}
$$

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[2]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 (39) 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 (39) に対応する差分の式が作れるはずである。

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

$$\begin{aligned}\phi(x, y) &= \phi(ih, jh) \\ &= U_{i\,j}\end{aligned} \tag{32}$$

とする。このようにすると、式 (39) は

$$U_{i+1\,j} + U_{i-1\,j} + U_{i\,j+1} + U_{i,j-h} - 4U_{i\,j} = 0 \tag{33}$$

となり、数値計算し易い形になる。

ラプラス方程式は式 (33) 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、難しげ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。

5.2 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 次元波動方程式を数値計で解くことを考える。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、

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \dfrac{\partial^2 u}{\partial t^2} & & (0 \geqq x \geqq 1, \quad 0 \geqq t) \\ u(x, 0) = \phi(x), & \dfrac{\partial u}{\partial t}(x, 0) = \psi(x) & (0 \geqq x \geqq 1) \\ u(0, t) = u(1, t) = 0 & & \end{cases} \tag{34}$$

となる。弦を伝わる波の速度は 1、弦の長さも 1 としている。この最初の式は波動方程式であるが、2 番目を初期条件、3 番目を境界条件と言う。

波動方程式の他に、初期条件と境界条件がある。力学的状態は、ある時刻、ここでは $t = 0$ の時の変位とその変位の速度が決まれば、それ以降を決めることができる。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、波動方程式とともに、振動の状態、ある時刻と位置の変位の値が決まるわけである。図 4 に初期条件と境界条件の様子を示す。

---

[2] この格子のことをメッシュ (mesh) と言う事もある。

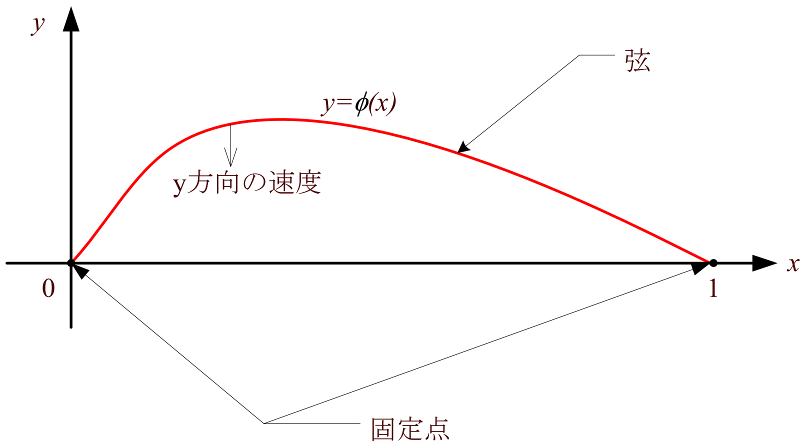

図 4: 時刻 $t = 0$ のときの弦の様子 (スナップショット)。初期条件と境界条件が表されており、y 方向の速度が $\psi(x)$ になっている。

まずは、波動方程式を差分方程式に書き直すことからはじめる。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、

$$
\begin{aligned}
u(x+\Delta x,t) &= u(x,t) + \frac{\partial u}{\partial x}\Delta x + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\Delta x)^2 + \frac{1}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(\Delta x)^3 + \frac{1}{4!}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\Delta x)^4 + \cdots \\
u(x-\Delta x,t) &= u(x,t) - \frac{\partial u}{\partial x}\Delta x + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(\Delta x)^2 - \frac{1}{3!}\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}(\Delta x)^3 + \frac{1}{4!}\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}(\Delta x)^4 - \cdots
\end{aligned}
\tag{35}
$$

となる。これらの式の辺々を足し合わせえると、

$$
\left.\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}\right|_{x,y} = \frac{1}{\Delta x^2}\left[u(x+\Delta x,t) - 2u(x,t) + u(x-\Delta x,t)\right] - O(\Delta x^2) \tag{36}
$$

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 (36) 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

$$
\left.\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}\right|_{x,t} = \frac{1}{\Delta t^2}\left[u(x,t+\Delta t) - 2u(x,t) + u(x,t-\Delta t)\right] - O(\Delta t^2) \tag{37}
$$

が得られる。

これらの式 (36) と (37) を元の波動方程式 (34) に代入すれば、

$$
\frac{1}{\Delta x^2}\left[u(x+\Delta x,t) - 2u(x,t) + u(x-\Delta x,t)\right] = \frac{1}{\Delta t^2}\left[u(x,t+\Delta t) - 2u(x,t) + u(x,t-\Delta t)\right] \tag{38}
$$

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、

$$
u(x,t+\Delta t) = 2u(x,t) - u(x,t-\Delta t) + \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2}\left[u(x+\Delta x,t) - 2u(x,t) + u(x-\Delta x,y)\right] \tag{39}
$$

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 (39) 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 (39) 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 $u(x+\Delta x, y)$ と表現するよりは、$u_{i\,j}$ と表現したほうが便利である。そこで、

$$\begin{aligned} u(x,t) &= \phi(i\Delta x, j\Delta t) \\ &= u_{i\,j} \end{aligned} \tag{40}$$

と表現を改める。このようにすると、式 (39) は

$$u_{i\,j+1} = 2u_{i\,j} - u_{i\,j-1} + \alpha\left(u_{i+1\,j} - 2u_{i\,j} + u_{i-1\,j}\right) \tag{41}$$

となり、数値計算し易い形になる。ただし、

$$\alpha = \frac{\Delta t^2}{\Delta x^2} \tag{42}$$

である。

この式を用いた計算の様子を図 5 に示す。

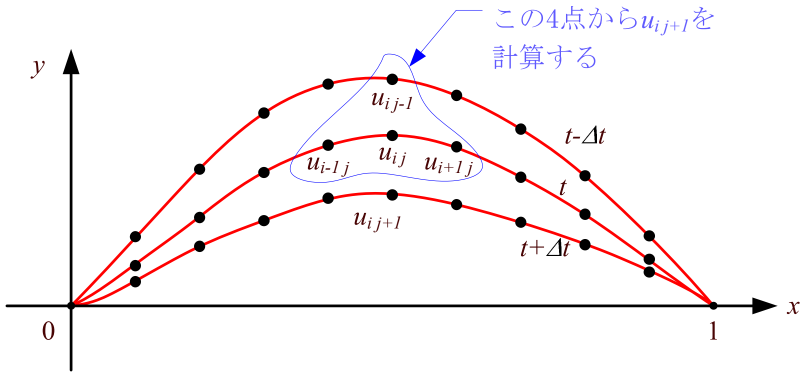

図 5: 差分方程式の計算の様子

波動方程式というけったいな偏微分方程式が、ただ単に数値を順番に代入していく式に変換されたわけである。この計算は非常に簡単である。ただ、時間領域を 1000 分割 ($N_t = 1000$)、x 軸領域も 1000 分割 ($N_x = 1000$) すると、100 万回の計算が必要であるが、コンピューターにとって、その程度の計算は大したことはない。

弦の振動の様子は、差分の式 (41) に従い、

$$\begin{array}{ccccccc}
u_{1\,0} & u_{2\,0} & u_{3\,0} & u_{4\,0} & u_{5\,0} & \cdots & u_{N_x-1\,0} \\
 & & & \Downarrow & & & \\
u_{1\,1} & u_{2\,1} & u_{3\,1} & u_{4\,1} & u_{5\,1} & \cdots & u_{N_x-1\,1} \\
 & & & \Downarrow & & & \\
u_{1\,2} & u_{2\,2} & u_{3\,2} & u_{4\,2} & u_{5\,2} & \cdots & u_{N_x-1\,2} \\
 & & & \Downarrow & & & \\
u_{1\,3} & u_{2\,3} & u_{3\,3} & u_{4\,3} & u_{5\,3} & \cdots & u_{N_x-1\,3} \\
 & & & \vdots & & & \\
u_{1\,N_t} & u_{2\,N_t} & u_{3\,N_t} & u_{4\,N_t} & u_{5\,N_t} & \cdots & u_{N_x-1\,N_t}
\end{array}$$

と計算を盲目的に進めれば、得られる。

しかし、式 (41) の左辺の値を得るためには、Δt と $2\Delta t$ の波の変位の値が必要である。従って、$u_{i\,2}\quad i = 0, 1, 2, \cdot$ を計算するときから、この式が使えることになる。$u_{i\,0}$ や $u_{i\,1}$ は初期条件から計算する必要がある。

参考文献

[1] 高橋大輔. 数値計算. 岩波書店, 1996.