

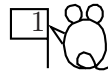
数値計算講義 第 11 回
Poisson 方程式の数値解法



カーネンコ アレクセイ
金子 晃

kanenko@mbk.nifty.com
alexei.kanenko@docomo.ne.jp
<http://www.kanenko.com/>

3 大数値解法:



- スペクトル法
- 差分法
- 有限要素法

今回は時間発展の偏微分方程式に対して差分法を解説した。
今日はまず、ポアソン方程式 $-\Delta u = f$ を上の三つの方法で解いてみる。
ポアソン方程式は、熱方程式や波動方程式の定常状態を表す。

($\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + f$ において u が t に依存しなければ、 $-\Delta u = f$ となる.)

● 数値解析でよく用いる記号の説明:

平面の領域 $D \subset \mathbf{R}^2$ に対し、

$L_2(D) := \{f(x, y) \mid \int_D |f(x, y)|^2 dx dy < \infty\}$ D 上の2乗可積分関数の空間

$f, g \in L_2(D)$ に対し、 $(f, g) := \int_D f(x, y)g(x, y) dx dy$ (L_2 内積)

特に、 $\|f\| := \sqrt{(f, f)}$ は f の L_2 ノルム (ベクトルの長さ)

可積分の意味をルベーグ積分で解釈すると、 $L_2(D)$ はこのノルムが定める距離により、完備な位相ベクトル空間となる

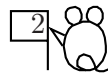
(ヒルベルト空間 - ユークリッド空間の無限次元化).

偏微分方程式の数値計算は、ヒルベルト空間の有限次元部分空間を用い、そこで偏微分方程式という無限次元の行列の、有限近似を解くもの。

$L_2(D)$ が代表例だが、基底をとると数列空間

$\ell_2 = \{(x_1, x_2, \dots); x_1^2 + x_2^2 + \dots < \infty\}$ と同等になる。

Poisson 方程式の数値解法 - 1 スペクトル法 (numb-1.f)



一般にスペクトル法とは、解くべき領域に固有で計算可能な基本関数系で未知数を含む全ての関数を展開し、その係数を計算して近似解を求める方法である。

係数を求める方程式が常微分方程式となるよう、普通は固有函数を用いる。領域 D 上で斉次 Dirichlet 条件付きの正ラプラス作用素 $-\Delta$ の固有値と固有函数とは、

$$-\Delta\varphi_j = \lambda_j\varphi_j, \quad (D \text{ 上}), \quad \varphi_j|_{\partial D} = 0$$

を満たす λ_j と φ_j のことである。有限行列と異なり、無限列となるが、対称行列の類比が成り立ち、 $\{\varphi_j\}_{j=1}^{\infty}$ は完全正規直交基底となる。

i.e. $(\varphi_i, \varphi_j) = \delta_{ij}$ であり、かつ任意の函数がこれで展開できる：

$$f(x, y) = \sum_{j=1}^{\infty} c_j \varphi_j(x, y), \quad c_j = (f, \varphi_j) := \int_D f(x, y) \varphi_j(x, y) dx dy$$

これを一般 **Fourier 展開** と呼ぶ。従って Fourier 級数による解法がその元祖。正方形 $[0, 1] \times [0, 1]$ 上で 2 次元 Poisson 方程式をこの方法で解いてみる。(より一般に長方形 $[a_0, a_1] \times [b_0, b_1]$ で OK.)

$$-\Delta(\sin m\pi x \sin n\pi y) = (m^2 + n^2)\pi^2 \sin m\pi x \sin n\pi y$$

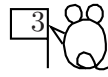
より、 $\{\sin m\pi x \sin n\pi y\}_{m,n=1}^{\infty}$ が固有函数、 $(m^2 + n^2)\pi^2$ が固有値となる。

ただし正規化固有函数は $2 \sin m\pi x \cos n\pi x$ である：

$$\int_0^1 \sin^2 m\pi x dx = \int_0^1 \frac{1 - \cos 2m\pi x}{2} dx = \frac{1}{2}$$

なので、1 次元のときは $\{\sqrt{2} \sin m\pi x\}_{m=1}^{\infty}$ が正規直交系を成すため。

未知函数を



$$u(x, y) = \sum_{m,n=1}^{\infty} u_{mn} \sin m\pi x \sin n\pi y$$

の形に仮定し, 右辺の函数を

$$f(x, y) = \sum_{m,n=1}^{\infty} f_{mn} \sin m\pi x \sin n\pi y, \quad f_{mn} = 4 \int_D f(x, y) \sin m\pi x \sin n\pi y dx dy$$

と展開すると, 係数比較で

$$\sum_{m,n=1}^{\infty} (m^2 + n^2)\pi^2 u_{mn} \sin m\pi x \sin n\pi y = \sum_{m,n=1}^{\infty} f_{mn} \sin m\pi x \sin n\pi y$$
$$\therefore u_{mn} = \frac{f_{mn}}{(m^2 + n^2)\pi^2}$$

よって解は

$$u(x, y) = \sum_{m,n=1}^{\infty} \frac{f_{mn}}{(m^2 + n^2)\pi^2} \sin m\pi x \sin n\pi y$$

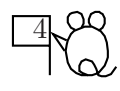
実際には無限に足せないで, 適当なところで打ち切る.

これを実装するには, 与えられた函数のフーリエ係数を計算するサブルーチンと, 係数が分かっているフーリエ級数の和の値を返す函数の二つを作る必要がある.

前者は, 適当な数値積分公式で $\int_0^1 \int_0^1 f(x, y) \sin m\pi x \sin n\pi y dx dy$ を計算する.

後者は級数の和の計算にすぎない.

Poisson 方程式の数値解法 - 2 差分法 (numb-2.f)



長方形 $[a_0, a_1] \times [b_0, b_1]$ 上で 2 次元 Poisson 方程式

$$-\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}\right) = f$$

を解くことを考える．差分法は既に熱方程式のところでやってあるので，

$$\frac{u(x+h_x, y) + u(x-h_x, y) - 2u(x, y)}{h_x^2} + \frac{u(x, y+h_y) + u(x, y-h_y) - 2u(x, y)}{h_y^2} = f(x, y)$$

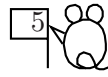
熱方程式のときと同様のベクトル成分の並べ方を採用すると，結局

$h_x = \frac{a_1 - a_0}{M}$, $h_y = \frac{b_1 - b_0}{N}$, $f_{ij} = f(a_0 + ih_x, b_0 + jh_y)$ を既知ベクトル，

$u_{ij} = u(a_0 + ih_x, b_0 + jh_y)$ を未知ベクトルとして，次を解けばよい：

$$\begin{pmatrix} \frac{2}{h_x^2} + \frac{2}{h_y^2} & -\frac{1}{h_x^2} & 0 & -\frac{1}{h_y^2} & 0 & \cdots & 0 \\ -\frac{1}{h_x^2} & \frac{2}{h_x^2} + \frac{2}{h_y^2} & -\frac{1}{h_x^2} & & & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ -\frac{1}{h_y^2} & \ddots & \ddots & \ddots & & & \vdots \\ 0 & & \ddots & \ddots & \ddots & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & \ddots & -\frac{1}{h_y^2} \\ 0 & & & & & & 0 \\ \vdots & \ddots & & & & & -\frac{1}{h_x^2} \\ 0 & \cdots & 0 & -\frac{1}{h_y^2} & 0 & -\frac{1}{h_x^2} & \frac{2}{h_x^2} + \frac{2}{h_y^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} \\ u_{21} \\ \vdots \\ u_{M-1,1} \\ u_{12} \\ \vdots \\ u_{M-1,2} \\ \vdots \\ u_{M-1,N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{11} \\ f_{21} \\ \vdots \\ f_{M-1,1} \\ f_{12} \\ \vdots \\ f_{M-1,2} \\ \vdots \\ f_{M-1,N-1} \end{pmatrix}$$

Poisson 方程式の数値解法 - 3 有限要素法 (numb-3.f)



2次元 Poisson 方程式 $-\Delta u = f$ を領域 D 上で解くのに $L_2(D)$ の基底関数 $\{\varphi_n\}_{n=1}^{\infty}$ を用意し, 無限個の連立方程式

$$(\nabla u, \nabla \varphi_j) = (-\Delta u, \varphi_j) = (f, \varphi_j)$$

に置き換え (ここに, $(f, g) = \int_D f(x, y)g(x, y) dx dy$ は L_2 内積で,

変形は部分積分と境界条件による.) 更に $u = \sum_{i=1}^{\infty} u_i \varphi_i$ と展開して

$$\sum_{i=1}^{\infty} (\nabla \varphi_i, \nabla \varphi_j) u_i = f_j, \quad j = 1, 2, \dots$$

という u_i の無限連立1次方程式に帰着させる解法を **Galerkin 法** と呼ぶ. (スペクトル法の場合は, この方程式が対角化されるような良い基底関数 φ_i を選んだのである.)

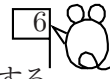
これも無限個では解けないので, 適当に有限個 $\{\varphi_i\}_{i=1}^N$ でとめると, 真の解 u を, これらの基底関数が張る N 次元部分空間へ射影した近似関数を求めることになる.

ここで更に, φ_i として, 台が有界な区分多項式函数を用いたのが有限要素法 (**Finite Element Method**, 略して **FEM**) である.

このときの近似行列 $A = ((\nabla \varphi_i, \nabla \varphi_j))_{i,j=1}^N$ は自然に

正定値実対称行列となることに注意.

- 領域 D を 3 角形や 4 角形 (3 次元では 4 面体や 6 面体) などの簡単な形をした有限要素に分割し, それに対応した単純な分解関数で張られる有限次元空間を近似空間として採用する.
- 最も基本的な例は平面領域の 3 角形分割と, それに対応した区分的 1 次関数 (i.e. 各 3 角形の上では x, y の 1 次式で表され, 3 角形の境界では連続に繋がっているようなもの) からなる P1 要素.
- 1 回微分すると微分方向によっては 3 角形の境界で不連続関数が現れ, 微積分の意味では微分可能ではないが, 積分論の意味では微分可能で, 結果は L^2 級の関数となる.
- 境界が直線図形で無いときには, 領域自身も多角形で近似される.
- 平面領域 D の三角形分割

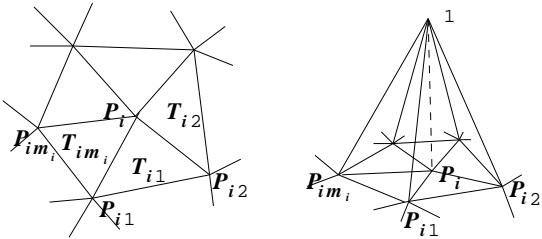


$$D \doteq \bigcup_{i=1}^M T_i$$

を一つ固定し, これらの頂点を重複を省いて一列に並べたものを

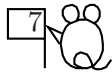
$$P_1, \dots, P_N$$

とする. 頂点 P_i は三角形 T_{i1}, \dots, T_{im_i} と頂点 P_{i1}, \dots, P_{im_i} とにより図のように取り囲まれているとすれば, 基底とするべき区分的 1 次関数 φ_i は, 頂点 i では値 1, その周りの頂点 P_{i1}, \dots, P_{im_i} では値 0 と定める. これらの三角形の外では値は 0 とする. つまりこの頂点 i の上に尖端を持つ角錐状のグラフを持った関数にとる.

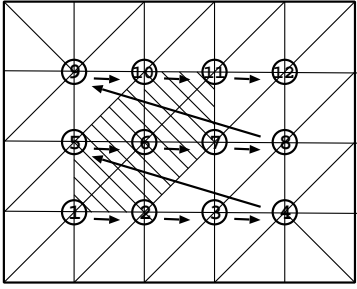


これらの φ_i は直交基底ではない. (隣の要素との内積は正となる.) しかしそれ以上離れた台を持ったものとの内積は 0 なので直交基底に近い. A の成分 $-(\nabla\varphi_i, \nabla\varphi_j)$ は真値が簡単に計算でき, 帯状行列となる.

有限要素法の例



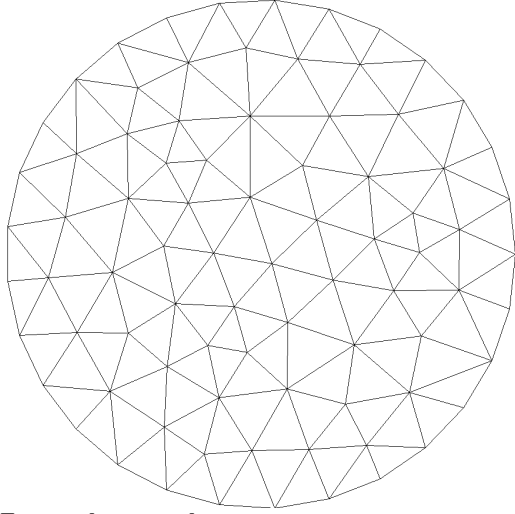
● ↓ 正方形の手による分割 (numb-3.f で用いられているもの)



3 角形要素・区分1 次函数
斜線を入れた領域は
第6 基底函数 $\varphi_6(x, y)$ の台

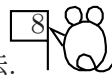
● 円の Delaunay 三角形分割
(FreeFEM の出力) →

FreeFEM のファイル一式は
~kanenko/NumCal/FreeFEM
の下に置かれている。
examples 中のファイルを
自分のところにコピーし、
その中から適当なもの
hoge.edp を選んで



~kanenko/NumCal/FreeFem/FreeFem++ hoge.edp
を実行すれば体験できる。

共役勾配法 (Conjugate gradient method, CG 法)



正定値実対称な係数行列を持つ連立一次方程式を解く強力な反復法.

考え方:

$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を解く代わりに $f(\mathbf{x}) := (A\mathbf{x} - \mathbf{b}, A\mathbf{x} - \mathbf{b})$ の最小値を探索する.

$\therefore f'(\mathbf{x})$ を計算すると,

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x} + \mathbf{h}) &= (A\mathbf{x} + \mathbf{h} - \mathbf{b}, A\mathbf{x} + \mathbf{h} - \mathbf{b}) \\ &= (A\mathbf{x} - \mathbf{b}, A\mathbf{x} - \mathbf{b}) + (\mathbf{h}, A\mathbf{x} - \mathbf{b}) + (A\mathbf{x} - \mathbf{b}, \mathbf{h}) + O(|\mathbf{h}|^2) \\ &= f(\mathbf{x}) + 2(A\mathbf{x} - \mathbf{b}, \mathbf{h}) + O(|\mathbf{h}|^2) \end{aligned}$$

極小の条件は, この \mathbf{h} の 1 次の項が消えること. i.e. $A\mathbf{x} - \mathbf{b} = 0$

探索方向の選択:

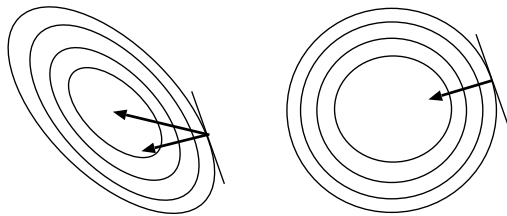
最も単純なのは, $-\nabla f$ の方向

(勾配方向) に極小値を探す.

しかし, これは大域的には必ずしも最良の方向ではない.

f の等位面が同心球面と

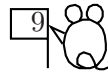
なるときは最良.



f が 2 次関数なら, 線型の座標変換で等位面を同心球面にできる.

$(A\mathbf{x}, \mathbf{x})$ を空間の計量 (距離) とし, 逐次探索方向がこの内積に関する正規直交系となるように決めるとよい.

共役勾配法のアルゴリズム



① 初期値 \mathbf{x}_0 を適当に選ぶ.

① 第0 残差 $\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_0$ を計算.

$\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0$ と置く. (これは勾配方向でもある.)

以下, $k = 0, 1, 2, \dots, N-1$ に対して,

④-1 近似解と誤差の更新

$$\alpha_k = \frac{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)}{(A\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_k)}, \quad \mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{p}_k,$$

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k A\mathbf{p}_k \quad (= \mathbf{b} - A\mathbf{x}_{k+1}) \quad |\mathbf{r}_{k+1}| \leq \varepsilon |\mathbf{b}| \text{ なら終了.}$$

④-2 探索方向の更新

$$\beta_k = \frac{(\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1})}{(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k)}, \quad \mathbf{p}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k$$

※ 残差 $\neq 0$ なる限り, $\langle \mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{r}_j \rangle = \langle \mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_j \rangle$, $j = 0, \dots, k$ に注意.

アルゴリズムの要点:

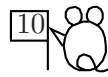
$\mathbf{r}_{k+1} = 0$ となれば, \mathbf{x}_{k+1} は真の解

以下に示す \mathbf{r}_j の直交性により, 少なくとも次元回反復すれば $\mathbf{r}_N = 0$.

実際には丸め誤差のため, 必ずしもそうはならない一方で,

A に重複固有値があると (等位面が球に近いと), それより早く最小値に到達する.

そこで実用的には $|\mathbf{r}_{k+1}|$ が決められた微小数以下となったところで止める.



定理 $j < k$ のとき $(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_j) = 0$, $(A\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_j) = 0$

∴ これらと

$$\begin{aligned} (\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k) &= (\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k) = (\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_{k-1}) \\ (\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_j) &= 0 \quad (j < k), \quad (\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j-1}) = 0 \quad (j \leq k), \end{aligned}$$

を k に関する帰納法で同時に導く.

$k = 0$ のときは自明.

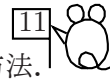
k まで成り立つとすると, $k + 1$ のとき, α_k の決め方と帰納法の仮定より

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_k) &= (\mathbf{r}_k - \alpha_k A\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k) = (\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k) - \alpha_k (A\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k) \\ &= (\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k) - \alpha_k (A\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_k) + \alpha_k \beta_{k-1} (A\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_{k-1}) = 0 \\ (\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{p}_k) &= (\mathbf{r}_k, \mathbf{p}_k) - \alpha_k (A\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_k) = (\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k) - \alpha_k (A\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_k) = 0 \\ (\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1}) &= (\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1}) + \beta_k (\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_{k+1}) = (\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1}) \\ (\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{r}_k) &= (\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_k) + \beta_k (\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k) = \beta_k (\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k) = (\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1}) \\ (A\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{p}_k) &= (\mathbf{p}_{k+1}, A\mathbf{p}_k) = (\mathbf{p}_{k+1}, \frac{1}{\alpha_k} (\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_{k+1})) \\ &= \frac{1}{\alpha_k} \{ (\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{r}_k) - (\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{r}_{k+1}) \} = 0 \end{aligned}$$

更に, $j < k$ に対しては, $\mathbf{r}_j \in \langle \mathbf{p}_0, \dots, \mathbf{p}_j \rangle$ に注意し, 帰納法の仮定より

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_{k+1}, \mathbf{r}_j) &= (\mathbf{r}_k - \alpha_k A\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_j) = (\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_j) - \alpha_k (A\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_j) = 0 \\ (A\mathbf{p}_{k+1}, \mathbf{p}_j) &= (\mathbf{p}_{k+1}, A\mathbf{p}_j) = (\mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{p}_k, \frac{1}{\alpha_j} (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j+1})) \\ &= -\frac{\beta_k}{\alpha_j} (\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_{j+1} - \mathbf{r}_j) = 0. \quad \text{QED} \end{aligned}$$

コレスキー (Choleski) 分解



正定値実対称行列 A を下三角型行列 L により $A = LL^T$ と表す方法。種々の用途があるが、LU 分解の一種とみなせば連立一次方程式を解くにも使える。

$A = (a_{ij})$, $L = (s_{ij})$ と置けば, $A = LL^T$ より,

$$a_{ii} = \sum_{k=1}^i s_{ik}^2, \quad a_{ij} = \sum_{k=1}^i s_{ik}s_{jk} \quad (i < j)$$

特に,

$$a_{11} = s_{11}^2, \quad a_{12} = s_{11}s_{21}, \quad \dots, \quad a_{1n} = s_{11}s_{n1},$$
$$a_{22} = s_{21}^2 + s_{22}^2, \quad a_{23} = s_{21}s_{31} + s_{22}s_{32}, \quad \dots, \quad a_{2n} = s_{21}s_{n1} + s_{22}s_{n2}$$

だから, $a_{ij} = a_{ji}$ に注意すれば次を得る:

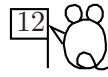
コレスキー分解成分 L を求めるアルゴリズム

- ① $s_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad s_{i1} = \frac{a_{i1}}{s_{11}}, \quad i = 2, \dots, n$
- ② $s_{22} = \sqrt{a_{22} - s_{21}^2}, \quad s_{i2} = \frac{a_{i2} - s_{21}s_{i1}}{s_{22}}, \quad i = 3, \dots, n$
- ③ $s_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} s_{kj}^2}, \quad s_{ik} = \frac{a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} s_{ij}s_{kj}}{s_{kk}}, \quad i = k+1, \dots, n$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ s_{21} & s_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ s_{n1} & s_{n2} & \cdots & s_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_{11} & s_{21} & \cdots & s_{n1} \\ 0 & s_{22} & \cdots & s_{n2} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & s_{nn} \end{pmatrix}$$

● Choleski 分解行列はもとの行列 A と同じバンド幅を持つ。

固有値再論



定常波とは、進行しない波を表す。

これは、 $u(x, y, t) = v(x, y)w(t)$ の形に変数分離された解で表される。
空間1次元のときは、行列の固有値問題の例として第7回で計算した。
空間2次元の波動方程式の Dirichlet 問題に上を代入すると、

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \quad \text{より} \quad \frac{1}{c^2} v(x, y) w''(t) = \Delta v(x, y) w(t),$$

$$\text{すなわち} \quad \frac{\Delta v(x, y)}{v(x, y)} = \frac{w''(t)}{c^2 w(t)} = -\lambda \text{ (定数).}$$

これと境界条件から、

$$-\Delta v(x, y) = \lambda v(x, y) \quad \text{on } D, \quad v(x, y)|_{\partial D} = 0$$

という、境界条件付き微分作用素 $-\Delta$ の固有値問題が生ずる。

このとき $w'' + c^2 \lambda w = 0$, 従って $w(t) = c_1 \cos c\sqrt{\lambda}t + c_2 \sin c\sqrt{\lambda}t$ なので、
 $c\sqrt{\lambda}/2\pi$ が振動数となる。

$D = [0, 1] \times [0, 1]$ のときは、固有函数が $\sin m\pi x \sin n\pi y$ で、
固有値が $(m^2 + n^2)\pi^2$ で与えられることは既に述べた。

この知識を仮定せずに、 $-\Delta$ の近似有限行列の固有値問題を
直接数値的に解くこともできる。(参考プログラム eig2dfem.f)

行列の固有値計算法

実用的な方法に次の二つがある：

- ハウスホルダー (Householder) 法
- ランチョス (Lanczos) 法

いずれも、まず代数的手段で3重対角行列に直し、次いで、小行列式の列の符号変化を見て固有値を挟み、2分法により近似計算する。

Lanczos 法による3重対角化アルゴリズム

- ① 単位ベクトル \mathbf{u}_1 をランダムに選ぶ。
- ② $\alpha_1 = (\mathbf{A}\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1)$, $\mathbf{v}_2 = \mathbf{A}\mathbf{u}_1 - \alpha_1\mathbf{u}_1$, $\beta_1 = |\mathbf{v}_2|$, $\mathbf{u}_2 = \mathbf{v}_2/\beta_1$
- ③ $\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_{k-1}$ が決まっていれば,
 $\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{A}\mathbf{u}_k - \beta_{k-1}\mathbf{u}_{k-1} - \alpha_k\mathbf{u}_k$, $\beta_k = |\mathbf{v}_{k+1}|$, $\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{v}_{k+1}/\beta_k$

上の漸化式は次の発見的考察から導かれる：

変換行列 $P = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n)$ により $B = P^{-1}AP$ が3重対角型になったとして、関係式 $AP = PB$ を書くと

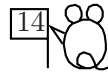
$$A(\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_n) \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & \beta_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ 0 & \cdots & 0 & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

これより,

$$\begin{aligned} \mathbf{A}\mathbf{u}_1 &= \alpha_1\mathbf{u}_1 + \beta_1\mathbf{u}_2, \\ \mathbf{A}\mathbf{u}_2 &= \beta_1\mathbf{u}_1 + \alpha_2\mathbf{u}_2 + \beta_2\mathbf{u}_3, \\ &\dots, \\ \mathbf{A}\mathbf{u}_k &= \beta_{k-1}\mathbf{u}_{k-1} + \alpha_k\mathbf{u}_k + \beta_k\mathbf{u}_{k+1}, \end{aligned}$$

これを \mathbf{u}_{k+1} について解けば上が得られる。

3 重対角行列の固有値計算法



$k = 1, 2, \dots, n$ について

$$p_k(\lambda) := \begin{vmatrix} \lambda - \alpha_1 & -\beta_1 & 0 & \cdots & 0 \\ -\beta_1 & \lambda - \alpha_2 & -\beta_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & -\beta_2 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\beta_{k-1} \\ 0 & \cdots & 0 & -\beta_{k-1} & \lambda - \alpha_k \end{vmatrix}$$

を計算する．これを最後の行について展開すれば，

$$p_k(\lambda) = (\lambda - \alpha_k)p_{k-1}(\lambda) - \beta_{k-1}^2 p_{k-2}(\lambda)$$

$p_0(\lambda) = 1, p_{-1}(\lambda) = 0$ と規約すると，上は $k = 1$ でも成り立つ．
この漸化式から， λ に数値が指定されたときは，すべての $p_k(\lambda)$ が
高速に計算できる．

● $(p_n(\lambda), \dots, p_1(\lambda), p_0(\lambda))$ は Sturm 列を成す．

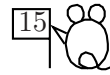
i.e. $a < b$ とするとき，

a におけるこの列の符号変化数 $- b$ におけるこの列の符号変化数
= 区間 $[a, b]$ に含まれる固有値の個数．

証明は略す．

行列の条件数 (condition number) とは,

$$\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$$



と定義する. これは行列ノルム $\|\cdot\|$ の取り方に依存する.

普通は L_2 -作用素ノルム

$$\|A\| = \sup_{|\mathbf{x}| \neq \mathbf{0}} \frac{|A\mathbf{x}|}{|\mathbf{x}|}$$

を使う. ここに $|\mathbf{x}|$ は \mathbf{x} のユークリッドノルム.

このときは, 対称行列 A について, 直交行列による対角化で容易に分かる

ように, $\|A\| = |A \text{ の絶対値最大の固有値 }|$ となり, また,

スペクトル写像定理により A^{-1} の固有値は A の固有値の逆数なので

$\|A^{-1}\| = |A^{-1} \text{ の絶対値最大の固有値 }| = |A \text{ の絶対値最小の固有値の逆数 }|$.

従って,

$$\kappa(A) = \frac{\max_{1 \leq i \leq N} |\lambda_i|}{\min_{1 \leq i \leq N} |\lambda_i|} = \frac{|A \text{ の絶対値最大の固有値 }|}{|A \text{ の絶対値最小の固有値 }|}$$

この値が 1 に近いほど, $(A\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 0$ の等位面が球に近づく.

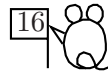
条件数は,

● A^{-1} の誤差に対する敏感さ.

● A に対する種々の反復法の収束の速さ.

などに関する数値計算上重要な量である.

条件数と解の安定性



連立一次方程式 $Ax = b$ において, A, b にそれぞれ誤差 $\Delta A, \Delta b$ があるとき, 解 x はどのくらいずれるか?

● 定理 $\|\Delta A\| < \frac{1}{\|A^{-1}\|}$ なる限り,

$$\frac{|\Delta x|}{|x|} \leq \frac{\kappa(A)}{1 - \kappa(A)\|\Delta A\|/\|A\|} \left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{|\Delta b|}{|b|} \right)$$

証明 一般に行列 B が $\|B\| < 1$ を満たせば, $I - B$ は逆を持ち, Neumann 級数 $(I - B)^{-1} = I + B + B^2 + \dots$ で与えられる.
(右辺が収束し, これに $I - B$ を掛けると I になるから.)
よってこのとき

$$\begin{aligned} \|(I - B)^{-1}\| &= \|I + B + B^2 + \dots\| \leq 1 + \|B\| + \|B\|^2 + \dots \\ &= \frac{1}{1 - \|B\|} \end{aligned}$$

これに, 仮定より $B = -A^{-1}\Delta A$ が代入できて,

$$\|(I + A^{-1}\Delta A)^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|A^{-1}\Delta A\|} \leq \frac{1}{1 - \|A^{-1}\|\|\Delta A\|}$$

次に, $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ と $(A + \Delta A)(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) = \mathbf{b} + \Delta\mathbf{b}$ の差をとって,

$$\Delta A\mathbf{x} + (A + \Delta A)\Delta\mathbf{x} = \Delta\mathbf{b}$$

左から A^{-1} を掛けて

$$A^{-1}\Delta A\mathbf{x} + (I + A^{-1}\Delta A)\Delta\mathbf{x} = A^{-1}\Delta\mathbf{b}$$

$\Delta\mathbf{x}$ につき解いて,

$$\Delta\mathbf{x} = (I + A^{-1}\Delta A)^{-1}A^{-1}(-\Delta A\mathbf{x} + \Delta\mathbf{b})$$

$$\begin{aligned} \therefore |\Delta\mathbf{x}| &\leq \|(I + A^{-1}\Delta A)^{-1}\| \|A^{-1}\| (\|\Delta A\|\|\mathbf{x}\| + |\Delta\mathbf{b}|) \\ &\leq \frac{\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}\|\|\Delta A\|} (\|\mathbf{x}\| + |\Delta\mathbf{b}|) \\ &\leq \frac{\|A\|\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}\|\|\Delta A\|} \left(\frac{\|\Delta A\|\|\mathbf{x}\|}{\|A\|} + \frac{|\Delta\mathbf{b}|}{\|A\|} \right) \end{aligned}$$

ここで, $\|\mathbf{b}\| \leq \|A\|\|\mathbf{x}\|$ に注意し, $\kappa(A)$ の定義を使うと

$$\begin{aligned} \frac{|\Delta\mathbf{x}|}{\|\mathbf{x}\|} &\leq \frac{\|A\|\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}\|\|\Delta A\|} \left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{|\Delta\mathbf{b}|}{\|A\|\|\mathbf{x}\|} \right) \\ &\leq \frac{\kappa(A)}{1 - \kappa(A)\|\Delta A\|/\|A\|} \left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{|\Delta\mathbf{b}|}{\|\mathbf{b}\|} \right) \quad \text{QED} \end{aligned}$$

固有値の大きさが不揃いだと誤差が拡大されることは, A が対角型のをときを考えれば明らかであろう.

(誤差の基準が最大固有値の大きさで決まり, 最小固有値が桁落ちと似た状況を作り出す.)

● 対角優位行列の正確な定義は、各 i に対し $|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$

このとき、Jacobi の反復法は収束する。

実際このとき、反復行列の固有値はすべて絶対値が 1 より小となる。

● 前処理 (preconditioning). Jacobi 法, Gauss-Seidel 法を適用する前に

適当な変換をして対角成分を大きくする,

共役勾配法を適用する前に適当な変換をして、条件数を 1 に近くする,

などのことをいう。実用的には非常に重要な手段。

● 加速緩和法 (successive over-relaxation, SOR, 正しい訳は逐次過剰緩和法)

$x_{k+1} = x_k + R_k$ のような反復法があるとき, $0 < \omega < 1$ なる定数を

用いて, 更新値を x_{k+1} から $(1 - \omega)x_k + \omega x_{k+1} = x_k + \omega R_k$ に修正するのが

緩和法であり, 主に近似列の安定性を増大させる (なます) のに用いる。

ここで $1 < \omega < 2$ ととると, 修正項を強調することになり, 安定性が

損なわれる不安はあるが, うまくすると収束が速くなるかもしれない。

これが, over-relaxation の原理である。

緩和パラメータ ω の実用的な決定法がいろいろ研究されている。

● Jacobi 法と Gauss-Seidel 法の収束の速さ。対称行列 A に対して,

Jacobi 法の反復行列を $M_J(A)$, Gauss-Seidel 法の反復行列を $M_{GS}(A)$

と書くとき, 次のいずれかが成り立つ:

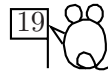
● $\rho(M_{GS}(A)) < \rho(M_J(A)) < 1$

● $\rho(M_{GS}(A)) > \rho(M_J(A)) > 1$

● $\rho(M_{GS}(A)) = \rho(M_J(A)) = 1$

従って, 収束する場合は常に Gauss-Seidel 法の方が速い (はず)。

LAPACK (Linear Algebra Package)



もと LINPACK と言った. フリーな行列の数値計算ライブラリ.
FORTRAN77 用に開発されたものだが,

- 並列計算用の SCALAPACK,
- F95 用の lapack95,
- C 言語用の clapack,
- C++ 用の lapack++,

他に JAVA 用などもある.

既存の全てのアルゴリズムが実装されている.

5 階の `~kanenko/NumCal/LAPACK/SRC` の下にソースが置いてある.
コンパイルしてライブラリを作ることができるが, 現在作業中なので
必要なソースをコピーして使うしかない.

なお, 行列の演算など基本的な部分は

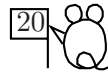
BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms) として独立した.

LAPACK のサブルーチンをソースレベルで使うときは,

そこから呼ばれている BLAS のサブルーチンも一緒にリンクする必要がある.

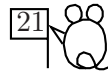
汎用なので, 引数がやたら多く, すぐに使えるようなものではないが,
プロの手でチューニングがしてあるので, 実用的なプログラミングの際は,
利用を考えるとよい.

本日の講義内容の自習課題



- 1 Poisson 方程式を Fourier 級数により解くプログラム
numb-1.f を実行してみる。
打ち切り項数 N を倍ずつに減らして実行し, この解法の近似のオーダーを数値実験的に予測する。
- 2 Poisson 方程式を差分法により解くプログラム
numb-2.f を実行してみる。
メッシュサイズ h を半分ずつに減らして実行し, この解法の近似のオーダーを数値実験的に予測する。
- 3 Poisson 方程式を有限要素法で解くプログラム
numb-3.f を実行してみる。
メッシュサイズ h をうまく動かして実行し, この解法の近似のオーダーを数値実験的に見出せ。
- 4 FreeFEM のサンプルプログラムを動かしてみる。

FreeFEM はフランスのパリ第6大学 J.L. Lions 研究所で開発されているフリーの有限要素法学習ソフトだが、最近の版は実用に十分なレベルである。



`/home/isstaff/kanenko/NumCal/FreeFem++/bin` をパスに追加し、
`/home/isstaff/kanenko/NumCal/FreeFem++/examples*` を自分のところにコピーして、例えば次を実行してみよ。

```
cd examples++
```

```
FreeFem++-x11 demo.edp
```

興味を持った人は、僕のホームページにリンクしてある FreeFem のサイトからソースを取り寄せ、自分のパソコンにインストールしてみよ。

※ 本日のプログラム例は、いずれも小生が過去に作ったものの簡略化です。

```
numb-1.f ← poisson1.f,
```

```
numb-2.f ← poisson2.f,
```

```
numb-3.f ← poisson3.f
```

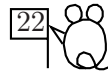
更に、次のようなプログラムも有ります。

```
eig2dfem.f (有限要素法による  $\Delta$  の固有値計算)
```

```
wave2dfem.f (有限要素法による波動方程式の固有振動の追跡)
```

興味のある人はこれらを覗いて実行してみてください。

本日の範囲の試験予想問題



- 問題 11.1** 正方形 $[0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbf{R}^2$ 上で, Poisson 方程式 $-\Delta u = 1$ を斉次 Dirichlet 境界条件付きで考えたものを Fourier 級数を用いて解いたときの, 最初の1項を求めよ.
- 問題 11.2** 正方形 $[0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbf{R}^2$ を各座標について2等分したメッシュについて, Poisson 方程式 $-\Delta u = 1$ を斉次 Dirichlet 境界条件付きで2階中心差分を用いた差分法により解いたときの中央の節点での解の値を示せ.
- 課題 11.3** 正方形 $[0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbf{R}^2$ を各座標について N 等分したメッシュについて, 斉次 Dirichlet 境界条件付き Poisson 方程式 $-\Delta u = 1$ を2階中心差分を用いた差分法により解くとき, どのような連立1次方程式を解くことになるか? 係数行列と右辺のベクトルの形を述べよ.