1 次元の Poisson 方程式

桂田 祐史

2024 年 9 月 4 日, 2024 年 9 月 22 日

目 次

半日でわっと書いたので、きっとたくさんバグが入っていると思います。

1 はじめに

2024 年度春学期の某講義をした関係で、2 次元 Laplace 方程式の同次 Neumann 境界値問題のプログラムを書こう、と思った。それに取り掛かって、前から放置していた問題と正面から相対することになった。

幸いに解決したが、そうする途中で、1 次元問題に真面目に取り組んで解決することになった。それについてのノートをここにまとめる次第である。

toy problem を解いているようだけれど、動機は真剣である。

5 節, 7 節, 8 節の内容は初等的であるが、私は文献で見たことはない。(予想していたことが確認できた、なるほどそれは自然だ、それはちょっと気づかない、が 1:1:1 くらいの感じ。)

ともあれ、ここで一時停止する。一応、最初にやろうと考えていたことは出来た (2 次元の場合のプログラムは作れた) し、他に急ぎの問題もあるので。一方で、書いたノートを完備化したいという気持ちもある。誤差解析ちゃんとやるとか、Dirichlet と Neumann 混ざっている場合とか、有限要素法の場合 (特に全周 Neumann) とか、全周 Neumann を連立 1 次方程式のソルバーの工夫で解決するとか。数学の入門的なテキストでは、アイディアを紹介するのが主目的で、典型的な場合を詳しく説明するが、一般にどうなるかは書かないみたいのが多いけれど、プログラムを使う立場からはある程度の網羅性があることが望ましいので。

2 次元の場合の解説は大体出来ている (と思っている) けれど、まだ推敲が必要そうで (既に書いた部分を大規模書き換えしたりしている)、公開はしばらくお預けとする。

少し雑談。講義科目というのは、理論・方法の紹介が多く、特定の対象に対して、総合的に調べる話にはならないことが多い (対象は例の一つ、という感じ)。それはある意味で自然なことではあるが、ときどき重要な対象について、結局何が分かるかゆっくり調べてみるべきである。この文書は 1 次元の Poisson 方程式について、それをしようというものだが、ふと山本 [1] を思い出した。これは常微分方程式の境界値問題について、解の存在と一意性から数値計算法 (差分法、有限要素法) までを、基礎から (ほぼ self-contained で) 解説したものである。ぜひともチェックしてみることをお勧めする。

2 1 次元 Poisson 方程式の特解, Laplacian の基本解

2.1 Poisson 方程式の特解を積分で与える公式

Poisson 方程式については、良く知られた “特解を与える公式” がある。それを簡単に紹介しておく。Laplacian については、$-\triangle$ の基本解 E というものがあり、それを使うと、任意の f に対して

$$u(x) := \int_\Omega E(x-y)f(y)\,dy \tag{1a}$$

で定義される u は

$$-\triangle u = f \quad \text{in } \Omega \tag{1b}$$

を満たす (多くの偏微分方程式のテキストで紹介されている。例えば桂田 [2] の §3.5 を見よ。)。

この公式の 1 次元バージョンはあまり便利ではないが、一応紹介しておこう、というのがこの節の趣旨である。

目標は、f が与えられたとして

$$-u''(x) = f(x)$$

を満たす u を求める、ということである。

素朴に考えて、次のような解答が思いつくであろう。u の 2 階導関数 (2 次の導関数) が $-f$ ということであるから、f を 2 回積分したものに -1 をかければ特解 u が求まる。

(ここから少しジャンプ) 特に $u(0) = u'(0) = 0$ を満たすものは

$$u(x) = -\int_0^x (x-t)f(t)dt \tag{2}$$

と書くことができる。

問 1. (2) で定まる u が、$-u'' = f$, $u(0) = 0$, $u'(0) = 0$ を満たすことを確かめよ。(微積分の問題である。)

2.2 公式 (2) の 1 つの解釈

常微分方程式の初期値問題の解法として演算子法が有名である。演算子法を学ぶと、$[0,\infty)$ で定義された連続関数について

$$\varphi * \psi(x) := \int_0^x \varphi(x-t)\psi(t)\, dt \quad (x \in [0,\infty)) \tag{3}$$

で畳み込みを導入する。これについて以下が成り立つ。

定理 2.1 $C([0,\infty);\mathbb{R})$ において、(3) で定義された畳み込みについて、以下が成り立つ。

(1) 一般に $u * (v * w) = (u * v) * w$ が成り立つ。

(2) $F(x) := 1$ に対して $G := F * F(x) = x$.

(3) $F(x) := 1$ と任意の $f \in C([0,\infty);\mathbb{R})$ に対して

(a) $g := F * f$ とすると $g'(x) = f(x)$, $g(0) = 0$.

(b) $h := F * (F * f)$ とすると $h''(x) = f(x)$, $h(0) = h'(0) = 0$. また $h(x) = \displaystyle\int_0^x G(x-t)f(t)\, dt = \int_0^x (x-t)f(t)\, dt$.

この定理の証明を問にしてもいいけれど、微分方程式の講義ノート ([3] の §7) に少し書いたので、興味があればそちらを見て下さい。

(2) の u は、$u = -G * f$ ということになる。

$-G$ のことを初期値問題の Green 関数と呼ぶことがある。(Green 関数は、普通は境界値問題を扱うためのものである。つまり 3 節で紹介する G のことを Green 関数と呼ぶ。)

2.3 基本解, (1a) への帰着

もう少し書き直すと、多次元で良く知られた公式 (1a), (1b) の 1 次元バージョンになる。

$$E(x) := -x^+, \quad x^+ := \begin{cases} x & (x > 0) \\ 0 & (x \le 0) \end{cases}$$

とおくと、(2) は

$$u(x) = \int_0^1 E(x-t) f(t)\, dt$$

とも書ける。

実は E は、$-\frac{d^2}{dx^2}$ の基本解である、ということである。超関数の入門部分でも知っていれば

$$-E'' = \delta$$

であることが分かる。実際、E は連続かつ区分的に C^1 級であるから、超関数微分は

$$E'(x) = \begin{cases} -1 & (x > 0) \\ 0 & (x < 0). \end{cases}$$

これは Heaviside の階段関数 H の -1 倍であるから、良く知られた $H' = \delta$ によって、$-E'' = \delta$.

(通常テキストで紹介される Laplacian の基本解の公式では、1 次元の場合は $-\frac{1}{2}|x|$ が基本解であり、上の E と一致しないが、どちらも確かに基本解である。

$$\frac{d}{dx}\left(-\frac{1}{2}|x|\right) = \begin{cases} -1/2 & (x > 0) \\ 1/2 & (x < 0) \end{cases}$$

であるから、もう 1 回微分すると同じである。)

3 Green 関数 — 同次 Dirichlet 境界値問題の解の公式

差分解以外には興味ない、という忙しい人は飛ばしても問題ない。

多次元問題で活躍する Green 関数について、最低限の紹介をしておこう。(Green 関数の話は意外と目にしないのではないかと思われるので。前節で初期値問題の Green 関数という変わったものを紹介してしまったので、こちらも書いておかないとマズイかもしれない、という心配も感じたので。)

基本解は $-\frac{d^2}{dx^2}E = \delta$ を満たすことのみが条件であり、境界条件を考慮に入れていないが、境界条件を考慮したものが Green 関数である。

(この辺の言葉の使い分けは、あまり気にしない人も多い。今さらうるさく言っても仕方がない、という気もするけれど、まったく違うものなので、名前で言い分けができると便利で、言い分けするにはそうする (基本解の方は境界条件を考えない、Green 関数の方は境界条件こみで考える) のがやはり便利かな、と思っています。そういえば a fundamental solution と the fundamental solution というのもあったっけ。)

ここでは同次 Dirichlet 境界条件の場合を考える。

桂田 [2] の付録 §F「常微分方程式の Green 関数」の第 1 節「1 次元 Poisson 方程式」 を見よ。)。結果だけ抜き出しておくと、

$$G(x,y) := \begin{cases} y(1-x) & (0 \le y \le x \le 1) \\ x(1-y) & (0 \le x \le y \le 1) \end{cases} \tag{4a}$$

で G を定義して、任意の f に対して

$$u(x) := \int_0^1 G(x,y)f(y)\,dy \tag{4b}$$

とおくと

$$-u''(x) = f(x), \quad u(0) = u(1) = 0 \tag{5}$$

が成り立つ。要するに、(4a), (4b) は、Poisson 方程式の同次 Dirichlet 境界値問題 (5) の解の公式である。

y をパラメーターとして、

$$-\frac{d^2}{dx^2}G(x,y) = \delta(x-y), \quad G(0,y) = 0, \quad G(1,y) = 0$$

が成り立つので、$G(x,y)$ は、境界 $(x = 0, 1)$ でアースされている場合に、y に単位点電荷をおいたときの x での電位を表している、と解釈できる。

4 $-\triangle_{\mathrm{D}}$ の差分近似行列 K_{D}

4.1 差分近似行列 K_{D} の定義

$\Omega = (a,b)$ における Poisson 方程式の同次 Dirichlet 境界値問題

$$-u''(x) = f(x) \quad (x \in (a,b)), \tag{6a}$$
$$u(a) = u(b) = 0 \tag{6b}$$

を考える。

差分法によりこの問題の近似解を得るには、次のようにする。

$N \in \mathbb{N}$ を固定する。

$$h := \frac{b-a}{N} \tag{7}$$

とおき、$j = 0, 1, \cdots, N$ に対して x_j, u_j, f_j を次式で定める:

$$x_j := a + jh, \tag{8}$$
$$u_j := u(x_j), \tag{9}$$
$$f_j := f(x_j). \tag{10}$$

$$-\frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} = f_i \quad (i = 1, \cdots, N-1), \tag{11a}$$
$$U_0 = U_N = 0 \tag{11b}$$

$N+1$ 個の方程式 (11a), (11b) を U_i $(i = 0, 1, \cdots, N)$ を未知数とする方程式として見ることもできるし、(11b) により U_0, U_N は既知であるから、(11a) は残りの $N-1$ 個の未知数 U_i $(i = 1, \ldots, N-1)$ についての方程式と見ることもできる。

いずれの見方をする場合も、未知数の方程式と方程式の未知数はつり合っている。後者の見方をして、次のように表すことができる。

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_{N-2} \\ U_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{N-2} \\ f_{N-1} \end{pmatrix}.$$

以下で示すように、この連立 1 次方程式はつねに一意可解である。

その議論をするために

$$K_{\mathrm{D}} = K_{\mathrm{D},N-1} := \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix} \tag{12}$$

とおこう。

この文書を通じて用いる記号を 2 つ導入する。自然数 m に対して、m 次正方行列 I_m を

$$I_m := \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \tag{13}$$

で定める。I_m を m 次の単位行列と呼ぶ。

また $m \geq 2$ のとき、m 次正方行列 J_m を

$$J_m := \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{14}$$

で定める。

これらを用いると、$N \geq 3$ のとき

$$K_{\mathrm{D},N-1} = \frac{1}{h^2}(2I_{N-1} - J_{N-1}) \tag{15}$$

と表すことができる。

4.2 K_{D} の性質

前項で定義した K_{D} は色々と良い性質を持つ。

行列解析という分野では (山本 [4] がお勧めのテキスト)、行列についての各種の性質から、どういうことが導かれるか、色々定理が用意されている。$A := K_{\mathrm{D}}$ はそれらの多くの性質を満たすという意味で、典型的に良い行列である。

まず簡単に分かることを 3 つほど。

(i) A の対角成分はすべて正である。

(ii) A は Z 行列である。(i.e., $\forall i, j\ [i \neq j \Rightarrow a_{ij} \leq 0]$)

(iii) A は L 行列である (i.e., すべての対角成分が正である Z 行列)。

少し確認に手間がかかる性質を 4 つあげる。

(a) A は正値対称行列である。(ゆえに A は正則である。)

(b) A は P 行列である (i.e., すべての主小行列式が正である)。(ゆえに A は正則である。)

(c) A は M 行列である (色々な特徴づけがある。例えば「A は正則かつ $A^{-1} > O$」あるいは「単調な Z 行列」)。

(d) A は単調行列である (i.e., $(\forall x \in \mathbb{R}^n)\ Ax \geq 0 \Rightarrow x \geq 0$)。

(e) A は既約強優対角行列である。(ゆえに A は正則である。)

次項で (a) を証明する。すると $\det A > 0$.

A の主小行列は、N を小さくしたときの A と言って良いから (厳密に言うと h が異なるが正の定数因子がかかっているだけなので、ここで問題にしている性質に違いは生じない)、主小行列式は正である。ゆえに (b) (A は P 行列) が成り立つ、

「Z 行列かつ P 行列であれば、M 行列である」という定理があるので、それを認めれば (c) も成り立つ。ゆえに (d) も成り立つ ($\because$ $Ax \geq 0$ ならば $x = A^{-1}(Ax) = (\text{正})(\text{非負}) \geq 0$)。

K_{D} については、以上から十分分かったと言えるので、(e) については保留しておく。後で $-\triangle_{\mathrm{N}}$ の差分近似行列 K_{N} について論じるときに、既約性、優対角性の説明をする。

4.3 $K_{\mathbf{D}}$ の固有値・固有ベクトル

ここで紹介する事実は覚える価値のあるものなので、最初に少し乱暴だが短い形で言い切っておく。

K_{D} の固有ベクトルは、$-\triangle_{\mathrm{D}}$ の固有関数と同じで (誤差 0 で) $\sin n\pi x$ である。

行列の固有ベクトルが関数とはどういうことか？固有値はどうなんだ？というのは自然なツッコミだが、それは以下を読んで下さい。

式を簡単にするため $a = 0$, $b = 1$, すなわち $\Omega = (a, b) = (0, 1)$ とする。一般の場合は、以下の $\sin n\pi x$ を $\sin \frac{n\pi(x-a)}{b-a}$ にする等の置き換えをすれば良い。

このとき $h = \frac{b-a}{N} = \frac{1}{N}$, $x_j = a + jh = jh$ である。
$N \geq 2$ と仮定して、$n = 1, 2, \cdots, N-1$ に対して

$$\boldsymbol{v}_n := \begin{pmatrix} \sin n\pi x_1 \\ \sin n\pi x_2 \\ \vdots \\ \sin n x_{N-1} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N-1}$$

とおく。$\boldsymbol{v}_n$ は、$\sin n\pi x$ の格子点での値を並べて作ったベクトル、ということである。
$0 < n\pi x_1 \leq (N-1)\pi \cdot \frac{1}{N} < \pi$ であるから $\sin n\pi x_1 \neq 0$. ゆえに $\boldsymbol{v}_n \neq \mathbf{0}$.

定理 4.1 (J_{N-1} の固有値・固有ベクトル) $N \geq 3$ とするとき

$$J_{N-1}\boldsymbol{v}_n = 2\cos n\pi h \boldsymbol{v}_n \quad (n = 1, \cdots, N-1)$$

が成り立つ。すなわち $\lambda_n := 2\cos n\pi h$ は J_{N-1} の固有値で、$\boldsymbol{v}_n$ は、行列 J_{N-1} の固有値 λ_n に属する 固有ベクトルである。

$$2 > \lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_{N-1} > -2$$

であり、これら固有値は相異なるので、$\boldsymbol{v}_n$ $(n = 1, \cdots, N-1)$ は $\mathbb{R}^{N-1}$ の基底である。

($N = 2$ の場合、J_{N-1} は何か？という問題があるので、$N \geq 3$ としているのだったっけ？)

証明 $1 \leq n \leq N-1$ とする。

$2 \leq j \leq N-1$ のとき、sin の加法定理から

$$\begin{aligned}
J\boldsymbol{v}_n \text{ の第 } j \text{ 成分} &= \sin(n\pi x_{j-1}) + \sin(n\pi x_{j+1}) \\
&= \sin(n\pi x_j - n\pi h) + \sin(n\pi x_j + n\pi h) \\
&= \sin(n\pi x_j)\cos(n\pi h) + \cos(n\pi x_j)\sin(-n\pi h) \\
&\quad + \sin(n\pi x_j)\cos(n\pi h) + \cos(n\pi x_j)\sin(n\pi h) \\
&= 2\cos(n\pi h)\sin(n\pi x_j).
\end{aligned}$$

$j = 1$ のとき $\sin(n\pi x_0) = \sin 0 = 0$ に注意すると

$$\begin{aligned}
J\boldsymbol{v}_n \text{ の第 } j \text{ 成分} &= \sin(n\pi x_2) = \sin(n\pi x_0) + \sin(n\pi x_2) \\
&= \sin(n\pi x_1 - n\pi h) + \sin(n\pi x_1 + n\pi h) \\
&= 2\cos(n\pi h)\sin(n\pi x_1).
\end{aligned}$$

$j = N-1$ のとき $\sin(n\pi x_N) = \sin(n\pi N h) = \sin(n\pi) = 0$ に注意すると

$$\begin{aligned}
J\boldsymbol{v}_n \text{ の第 } j \text{ 成分} &= \sin(n\pi x_{N-2}) = \sin(n\pi x_{N-2}) + \sin(n\pi x_N) \\
&= \sin(n\pi x_{N-1} - n\pi h) + \sin(n\pi x_{N-1} + n\pi h) \\
&= 2\cos(n\pi h)\sin(n\pi x_{N-1}).
\end{aligned}$$

ゆえに $J_{N-1}\boldsymbol{v}_n = 2\cos(n\pi h)\boldsymbol{v}_n$. $\boldsymbol{v}_n \neq \boldsymbol{0}$ であるから、$\boldsymbol{v}_n$ は J_{N-1} の固有ベクトルである。

$$0 < \pi h < 2\pi h < \cdots < (N-1)\pi h < N\pi h = \pi$$

であるから

$$1 = \cos 0 > \cos(\pi h) > \cos(2\pi h) > \cdots > \cos((N-1)\pi h) > \cos\pi = -1.$$

ゆえに

$$2 > \lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_{N-1} > -2. \blacksquare$$

系 4.2 (K_{D} の固有値・固有ベクトル) 任意の $N\in\mathbb{N}$, $N\geq 2$ に対して、

$$\mu_n := 2-2\cos(n\pi h)=\frac{4}{h^2}\sin^2\frac{n\pi h}{2}\quad (n=1,2,\cdots,N)$$

は $K_{\mathrm{D},N-1}$ の固有値で、$\boldsymbol{v}_n$ は $K_{\mathrm{D},N-1}$ の固有値 μ_n に属する固有ベクトルである。

$$0<\mu_1<\cdots<\mu_{N-1}$$

であり、これらは相異なるので $\boldsymbol{v}_n$ $(n=1,\cdots,N-1)$ は $\mathbb{R}^{N-1}$ の既定である。

$K_{\mathrm{D},N-1}$ は正値対称行列である。特に正則である。

証明

$$K_{\mathrm{D},N-1}=\frac{1}{h^2}(2I_{N-1}-J_{N-1})$$

であるから、J_{N-1} の固有値 λ_n $(1\leq n\leq N-1)$ を用いて

$$\mu_n := \frac{1}{h^2}(2-\lambda_n)$$

とおくと、μ_n は $K_{\mathrm{D},N-1}$ の固有値で、$\boldsymbol{v}_n$ はそれに属する固有ベクトルである。

$$2>\lambda_1>\lambda_2>\cdots>\lambda_{N-1}>-2$$

であるから

$$0<\mu_1<\mu_2<\cdots<\mu_{N-1}<\frac{4}{h^2}.$$

$1-\cos\theta=1-\cos 2\cdot\theta/2=1-(1-2\sin^2\frac{\theta}{2})=2\sin^2\frac{\theta}{2}$ であるから

$$\mu_n=\frac{2(1-\cos(n\pi h))}{h^2}=\frac{4}{h^2}\sin^2\frac{n\pi h}{2}$$

とも表せる。■

なお、J_{N-1} も $K_{\mathrm{D},N-1}$ も実対称行列であるから、$\boldsymbol{v}_n$ $(n=1,\cdots,N-1)$ は直交系である。ゆえに、$n,m\in\{1,\ldots,N-1\}$, $n\neq m$ ならば

$$\sum_{j=1}^{N-1}\sin n\pi x_j\sin m\pi x_j=0$$

が成り立つ。これを選点直交性 (discrete orthogonality) という。

5　$-\triangle_{\mathrm{N}}$ の差分近似行列 K_{N}

5.1　1次元 Poisson 方程式の同次 Neumann 境界値問題の整合条件

$\Omega=(a,b)$ における Poisson 方程式の同次 Neumann 境界値問題

$$-u''(x)=f(x)\quad (x\in(a,b)),\tag{16a}$$

$$u'(a)=u'(b)=0\tag{16b}$$

を考える。

この問題 (16a), (16b) の解が存在するとき、

$$\int_a^b f(x)\,dx = -\int_a^b u''(x)\,dx = -\left[u'(x)\right]_a^b = -\left(u'(b) - u'(a)\right) = 0.$$

すなわち

$$\int_a^b f(x)\,dx = 0 \tag{17}$$

が成り立つ。逆にこの条件が成り立っている場合、(16a), (16b) の解が存在する。

問 2. このことを示せ。

5.2 差分近似行列 K_{N} の定義

仮想格子点 x_{-1}, x_{N+1} を導入して、Neumann 境界条件を中心差分近似することにすると、以下の差分方程式がえられる。

$$-\frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2} = f_i \quad (i = 0, 1, \cdots, N), \tag{18a}$$

$$\frac{U_1 - U_{-1}}{2h} = \frac{U_{N+1} - U_{N-1}}{2h} = 0. \tag{18b}$$

(18b) を用いて $U_{-1} = U_1$, $U_{N+1} = U_{N-1}$. これを (18a) に代入して、次式を得る。

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -2 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -2 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U_0 \\ U_1 \\ \vdots \\ U_{N-1} \\ U_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{N-1} \\ f_N \end{pmatrix}.$$

$$K_{\mathrm{N},N+1} = K_{\mathrm{N}} := \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -2 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -2 & 2 \end{pmatrix} \tag{19}$$

とおく。

$m \in \mathbb{N}$ に対して、m 次正方行列 J'_m を

$$J'_m = \begin{pmatrix} 0 & 2 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ & & & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

で定めると

$$K_{\mathrm{N},N+1} = \frac{1}{h^2}\left(2I_{N+1} - J'_{N+1}\right).$$

5.3 $K_{\mathbf{N}}$ の固有値・固有ベクトル

$n = 0, 1, \cdots, N$ に対して

$$\boldsymbol{w}_n := \begin{pmatrix} \cos n\pi x_0 \\ \cos n\pi x_1 \\ \vdots \\ \cos n\pi x_{N-1} \\ \cos n\pi x_N \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N+1}$$

とおく。

$\cos(n\pi x_0) = \cos 0 = 1 \neq 0$ であるから $\boldsymbol{w}_n \neq \boldsymbol{0}$.

定理 5.1

$$J'_{N+1}\boldsymbol{w}_n = 2\cos(n\pi h)\boldsymbol{w}_n \quad (n = 0, 1, \ldots, N)$$

が成り立つ。すなわち $\lambda_n := 2\cos n\pi h$ は J'_{N+1} の固有値で、$\boldsymbol{w}_n$ は、行列 J'_{N+1} の固有値 λ_n に属する固有ベクトルである。

$$2 = \lambda_0 > \lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_{N-1} > \lambda_N = -2$$

であり、これら固有値は相異なるので、$\boldsymbol{w}_n$ $(n = 0, 1, \cdots, N)$ は $\mathbb{R}^{N+1}$ の基底である。

証明 $0 \le n \le N$ とする。

$1 \le j \le N-1$ とする。$J'_{N+1}\boldsymbol{w}_n$ の第 j 成分は (ただし 0, 1, $\cdots$, N と番号づける)

$$\begin{aligned}\cos(n\pi x_{j+1}) + \cos(n\pi x_{j-1}) &= \cos(n\pi x_j + n\pi h) + \cos(n\pi x_j - n\pi h) \\ &= \cos(n\pi x_j)\cos(n\pi h) - \sin(n\pi x_j)\sin(n\pi h) \\ &\quad + (\cos(n\pi x_j)\cos(n\pi h) + \sin(n\pi x_j)\sin(n\pi h)) \\ &= 2\cos(n\pi h)\cos(n\pi x_j).\end{aligned}$$

$\cos(n\pi x_0) = \cos 0 = 1$ であるから

$$2\cos(n\pi x_1) = 2\cos(n\pi h) = 2\cos(n\pi h)\cos(n\pi x_0).$$

$\cos(n\pi x_N) = \cos(n\pi \cdot 1)$ であるから

$$\begin{aligned}2\cos(n\pi x_{N-1}) = 2\cos(n\pi(1-h)) &= 2\left(\cos(n\pi)\cos(n\pi h) + \sin(n\pi)\sin(n\pi h)\right) \\ &= 2\cos(n\pi)\cos(n\pi h) = 2\cos(n\pi h)\cos(n\pi x_N).\end{aligned}$$

ゆえに $J'_{N+1}\boldsymbol{w}_n = 2\cos(n\pi h)\boldsymbol{w}_n$. $\boldsymbol{w}_n \neq \boldsymbol{0}$ であるから、$\boldsymbol{w}_n$ は J'_{N+1} の固有ベクトルである。

$$0 = 0\pi h < \pi h < 2\pi h < \cdots < (N-1)\pi h < N\pi h = \pi$$

であるから、

$$1 = \cos(0\pi h) > \cos(\pi h) > \cos(2\pi h) > \cdots > \cos(N\pi h) = -1.$$

ゆえに

$$2 = \lambda_0 > \lambda_1 > \cdots > \lambda_{N-1} > \lambda_N = -2.\blacksquare$$

系 5.2 (K_N の固有値・固有ベクトル) 任意の $N \in \mathbb{N}$ に対して、

$$\mu_n := 2 - 2\cos(n\pi h) = \frac{4}{h^2}\sin^2\frac{n\pi h}{2} \quad (n = 0, 1, \cdots, N)$$

は $K_{\mathrm{N},N+1} = \frac{1}{h^2}\left(2I_{N+1} - 2J'_{N+1}\right)$ の固有値で、$\boldsymbol{w}_n$ は $K_{\mathrm{N},N-1} = 2I_{N+1} - 2J'_{N+1}$ の固有値 μ_n に属する固有ベクトルである。

$$0 = \mu_0 < \mu_1 < \cdots < \mu_N$$

であり、これらは相異なるので $\boldsymbol{w}_n$ $(n = 0, 1, \cdots, N)$ は $\mathbb{R}^{N+1}$ の基底である。

$$\boldsymbol{w}_0 = \mathbf{1}_{N+1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

であり、これで張られる 1 次元部分空間が $\ker K_{\mathrm{N},N+1}$ に等しい。

証明 前半は K_D についての定理の証明と同様である。

$\ker K_{\mathrm{N},N+1}$ は、固有値 0 の固有空間であるので、Span $\boldsymbol{w}_0$ に等しい。■

5.4 連立 1 次方程式 $K_\mathrm{N}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{f}$ の可解条件

$K_{\mathrm{N},N+1}$ は対称行列ではないことに注意しよう。連立 1 次方程式 $K_\mathrm{N}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{f}$ を数値計算で解く場合は、係数行列は対称行列であることが望ましい。

実は簡単に対称行列係数の連立 1 次方程式に変換できる。実際

$$K_{\mathrm{N},N+1}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{f} \Leftrightarrow \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -2 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -2 & 2 \end{pmatrix}\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{N-1} \\ f_{N+1} \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix}\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{N-1} \\ \frac{1}{2}f_{N+1} \end{pmatrix}.$$

すなわち

$$\widetilde{K}_{\mathrm{N},N+1} := \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \widetilde{\boldsymbol{f}} := \begin{pmatrix} \frac{1}{2}f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{N-1} \\ \frac{1}{2}f_N \end{pmatrix} \tag{20}$$

とおくとき

$$K_{\mathrm{N},N+1}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{f} \Leftrightarrow \widetilde{K}_{\mathrm{N},N+1}\boldsymbol{U} = \widetilde{\boldsymbol{f}}.$$

この $\widetilde{K}_{\mathrm{N},N+1}$ は実対称行列である。

$$K_{\mathrm{N},N+1}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{0} \Leftrightarrow \widetilde{K}_{\mathrm{N},N+1}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{0}$$

であるから

$$\ker \widetilde{K}_{\mathrm{N},N+1}=\ker K_{\mathrm{N},N+1}=\mathrm{Span}\mathbf{1}_{N+1}=\left\{C\mathbf{1}_{N+1} \mid C\in\mathbb{R}\right\}.$$

定理 5.3 (連立 1 次方程式 $K_{\mathbf{N},N+1}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{f}$ の解) $N\in\mathbb{N}$ とする。$\boldsymbol{f}\in\mathbb{R}^{N+1}$ に対して、連立 1 次方程式 $K_{\mathrm{N},N+1}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{f}$ の解が存在するためには、$\boldsymbol{f}$ が

$$\frac{1}{2}f_0+\sum_{j=1}^{N-1}f_j+\frac{1}{2}f_N=0$$

を満たすことが必要十分である。また特解 $\boldsymbol{U}_{\mathrm{s}}$ が見つかったとき、一般解は $\boldsymbol{U}_{\mathrm{s}}+C\mathbf{1}_{N+1}$ $(C\in\mathbb{R})$ である。すなわち

$$\left\{\boldsymbol{U}\in\mathbb{R}^{N+1} \mid K_{\mathrm{N},N+1}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{f}\right\}=\left\{\boldsymbol{U}_s+C\mathbf{1}_{N+1} \mid C\in\mathbb{R}\right\}.$$

証明 まず $K_{\mathrm{N},N+1}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{f} \Leftrightarrow \widetilde{K}_{\mathrm{N},N+1}\boldsymbol{U}=\widetilde{\boldsymbol{f}}$.

また (定理の名前が分からない…Fredholm の交代定理とも違うし、閉値域の定理でもないし…)

$$\mathrm{Range}(\widetilde{K}_{\mathrm{N},N+1})=\left(\ker \widetilde{K}_{\mathrm{N},N+1}^{\top}\right)^{\perp}=\left(\ker \widetilde{K}_{\mathrm{N},N+1}\right)^{\perp}=(\mathrm{Span}\mathbf{1}_{N+1})^{\perp}.$$

ゆえに

$$\begin{aligned}\boldsymbol{f}\in\mathrm{Range}(K_{\mathrm{N},N+1}) \Leftrightarrow \widetilde{\boldsymbol{f}}\in\mathrm{Range}(\widetilde{K}_{\mathrm{N},N+1}) \Leftrightarrow \widetilde{\boldsymbol{f}}\in(\mathrm{Span}\ \mathbf{1}_{N+1})^{\perp} \Leftrightarrow \widetilde{\boldsymbol{f}}\cdot\mathbf{1}_{N+1}=0\\ \Leftrightarrow \frac{1}{2}f_0+\sum_{j=1}^{N-1}f_j+\frac{1}{2}f_N=0.\end{aligned}$$

同次方程式 $K_{\mathrm{N},N+1}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{0}$ の解空間は $\ker K_{\mathrm{N},N+1}=\{C\mathbf{1}_{N+1} \mid C\in\mathbb{R}\}$ であるから、非同次方程式 $K_{\mathrm{N},N+1}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{f}$ の解空間は $\{\boldsymbol{U}_{\mathrm{s}}+C\mathbf{1}_{N+1} \mid C\in\mathbb{R}\}$ である。 ■

5.5 連立 1 次方程式 $K_{\mathbf{N}}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{f}$ の求解

$K_{\mathrm{N},N+1}$ は正則でないので、$K_{\mathrm{N},N+1}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{f}$ の解を数値計算で求めるために、多くのソルバーが直接は利用できない。

$K_{\mathrm{N},N+1}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{f}$ の解空間の構造から、$\boldsymbol{U}$ の最初の成分 U_0 が 0 となる解 $\boldsymbol{U}_{\mathrm{S}}$ が存在することが分かる。それが求まれば、$K_{\mathrm{N},N+1}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{f}$ の解空間は $\{\boldsymbol{U}_{\mathrm{S}}+C\mathbf{1}_{N+1} \mid C\in\mathbb{R}\}$ である。

$\widetilde{K}_{\mathrm{N},N+1}$ を

$$\widetilde{K}_{\mathrm{N},N+1}=\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix}a & \boldsymbol{b}^{\top}\\ \boldsymbol{b} & K\end{pmatrix},\quad a\in\mathbb{R},\boldsymbol{b}\in\mathbb{R}^N,K\in\mathbb{R}^{N\times N}$$

とブロック分けする。K は $\widetilde{K}_{\mathrm{N},N+1}$ から最初の行と最初の列を除いたもの、MATLAB 風の記号を用いると $K=\widetilde{K}_{\mathrm{N},N+1}(2:N+1,2:N+1)$ である。

$\boldsymbol{U}_{\mathrm{S}}$ は

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} a & \boldsymbol{b}^\top \\ \boldsymbol{b} & K \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U_0 \\ U_1 \\ \vdots \\ U_{N-1} \\ U_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{N-1} \\ \frac{1}{2}f_N \end{pmatrix}, \quad U_0 = 0$$

を満たすので、$\boldsymbol{U}_{\mathrm{S}}$ は次の方程式の解でもある。

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}_N^\top \\ \mathbf{0}_N & K \end{pmatrix}\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{N-1} \\ \frac{1}{2}f_N \end{pmatrix}. \tag{21}$$

(行列・ベクトルの方程式の最初の行を $U_0 = 0$ で置き換えた。また $U_0 = 0$ であるから、行列の最初の列の対角成分以外を 0 にして良い。)

この方程式の係数行列 $\widehat{K} := \dfrac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}_N^\top \\ \mathbf{0}_N & K \end{pmatrix}$ は正則である。実際、

$$K = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

は、既約強優対角であるから正則である[1]。ゆえに

$$\det \widehat{K} = \det \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}_N^\top \\ \mathbf{0}_N & K \end{pmatrix} = \det K \neq 0.$$

(行列の既約性については、山本 [4]、[5]、齊藤 [6] などを見て下さい。あるいは、判定法だけならば、桂田 [7] の付録「行列の既約性」を見て下さい。)

ゆえに $\boldsymbol{U}_{\mathrm{S}}$ は (21) の解として特徴付けられる。この方程式の係数行列は正則なので、数値計算では通常のソルバーが利用できる。

($\widehat{K}$ は実対称行列であるから、固有値はすべて実数である。$\widehat{K}$ の対角成分は正で、優対角だから、Gerschgorin の円定理によって固有値は非負である。また $\widehat{K}$ は正則であるので固有値は (0 でないので) 正である。ゆえに $\widehat{K}$ は正値対称行列である。(21) に対して CG 法も適用可能である。)

6 Poisson 方程式の Dirichlet 境界値問題の差分法シミュレーション

境界条件を非同次に一般化しよう。

$$-u''(x) = f(x) \quad (x \in (a,b)), \tag{22a}$$

$$u(a) = \alpha, \quad u(b) = \beta. \tag{22b}$$

[1] 元々 K_{N} の段階で既約かつ優対角であった。K の最初の行 $(2\ \ -1\ 0 \cdots 0)$ より強優対角となる。

差分方程式は同次境界条件の場合とほとんど同じになる。

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ \vdots \\ U_{N-2} \\ U_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{N-2} \\ f_{N-1} \end{pmatrix} + \frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta \end{pmatrix}.$$

6.1 MATLAB プログラムとその実験結果

poisson1d_nh.m

```
% poisson1d_nh.m
% 1 次元領域における Poisson -△ u=f (非同次 Dirichlet 境界条件) を差分法で解く
% 入手 curl -O https://m-katsurada.sakura.ne.jp/program/fdm/poisson1d_nh.m
% 解説 https://m-katsurada.sakura.ne.jp/labo/text/poisson1d.pdf
% (2024/9/4)。
function poisson1d_nh(N)
  arguments
    N=4 % デバッグ用
  end
  function K = poisson1d_mat(W,N)
    h=W/N;
    I=speye(N-1,N-1);
    v=ones(N-2,1);
    J=sparse(diag(v,1)+diag(v,-1));
    K=2*I-J;
    K=1/h^2*K;
  end
  % 想定している厳密解
  function val = exact_solution(x)% =x^4
    val = x .^ 4;
    %val = (x - 1.0/2).^2;
  end
  % f=-△ u=-d^2u/dx^2
  function val = f(x)% = -u''(x) = -12x^2
    val = - 12 * x.^2;
    %val = 0 .* x - 2.0;
  end
  % 領域
  a=0; b=1;
  % 境界値
  alpha = exact_solution(a);
  beta = exact_solution(b);
  fprintf('a=%f, b=%f, u(a)=%f, u(b)=%f\n', a, b, alpha, beta);
  % 差分近似の行列
  h=(b-a)/N;
  fprintf('N=%d, h=%g\n', N, h);
  A=poisson1d_mat(b-a,N);
  if N <= 10
    disp('A='); disp(full(A));
  end
  % 連立方程式の右辺
  X=linspace(a,b,N+1);
  F=f(X(2:N)');
  F(1)=F(1)+alpha/h^2;
  F(N-1)=F(N-1)+beta/h^2;
  if N <= 10
    disp('X='); disp(X);
    disp('F=f(X)='); disp(F');
```

```
  end
  % 差分解を求める
  u=zeros(N+1,1);
  u(2:N)=A\F;
  % 境界値
  u(1)=alpha; u(N+1)=beta;
  % グラフを描く
  plot(X,u); title('差分解のグラフ'); drawnow; shg;
  figure
  plot(X,exact_solution(X')); title('厳密解のグラフ'); drawnow; shg;
  exact=exact_solution(X');
  error=norm(u-exact,inf);
  fprintf('max norm of error=%e\n', error);
end
```

入手するにはターミナルで

```
curl -O https://m-katsurada.sakura.ne.jp/program/fdm/poisson1d_nh.m
```

これを実行するには、例えば

```
cp -p poisson1d_nh.m ~/Documents/MATLAB
```

とコピーして (私はシンボリック・リンクをはることにしている)、MATLAB の中で

```
>> poisson1d_nh
```

(分割数はデフォールトの $N = 4$ が採用される。)

あるいは、分割数 N を指定するため

```
>> poisson1d_nh(10)
```

のようにする。

最初に試した場合 ($u(x) = (x - 1/2)^2$) では、誤差がとても小さくなった (マシン・イプシロン程度とか 0 とか)。あれ？…思い出した。解が次数の低い多項式であると (この場合は 3 次以下だとかな？) 打ち切り誤差が 0 になってしまう。数値計算すると、丸め誤差しかないので、10^{-16} とかになってしまう。この辺は誤差解析をすればはっきりするのだけど (2 次元 Dirichlet は、テキストに載っているのを勉強したことはある… 桂田 [7])、まだしていないのではっきりしたことは書けない。

上のサンプル・プログラムでは、$u(x) = x^4$ と選び直して、$f(x) = -u''(x) = -12x^2$, $\alpha = u(0) = 0$, $\beta = u(1) = 1$ としてある。N を 10 から倍々にしていくと以下のようになった。

```
N=10, h=0.1
max norm of error=2.500000e-03

N=20, h=0.05
max norm of error=6.250000e-04

N=40, h=0.025
max norm of error=1.562500e-04

N=80, h=0.0125
max norm of error=3.906250e-05

N=160, h=0.00625
max norm of error=9.765625e-06

N=320, h=0.003125
max norm of error=2.441406e-06
```

N が 2 倍になると誤差は $\frac{1}{4}$ 倍になる。誤差は $O(1/N^2)$ になっているようで、ひとまずは納得できる。

7 Poisson 方程式の Neumann 境界値問題の差分法シミュレーション

7.1 Poisson 方程式の Neumann 境界値問題の整合条件

こちらも境界条件を非同次に一般化しよう。

$$-u''(x)=f(x)\quad (x\in(a,b)), \tag{23a}$$

$$u'(a)=\alpha,\quad u'(b)=\beta. \tag{23b}$$

$$\int_a^b f(x)\,dx=-\int_a^b u''(x)\,dx=-\left[u'(x)\right]_a^b=-\left(u'(b)-u'(a)\right)=-\left(\beta-\alpha\right)$$

であるから解が存在するためには、次の条件を満たさねばならない。

$$\int_a^b f(x)\,dx+\beta-\alpha=0. \tag{24}$$

これを Neumann 境界値問題 (23a), (23b) の整合条件と呼ぶことにする。

7.2 差分方程式の導出

仮想格子点を導入することで差分方程式

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} -1 & 2 & -1 & & & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & & & \\ & & -1 & 2 & -1 & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & -1 & 2 & -1 & \\ & & & & & -1 & 2 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_{-1} \\ u_0 \\ \vdots \\ u_N \\ u_{N+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix} \tag{25}$$

が導出される (行列は $N+1$ 行, $N+3$ 列であることに注意)。

$\frac{\partial u}{\partial n}(x_0)$, $\frac{\partial u}{\partial n}(x_N)$ を中心差分近似して得られる

$$u_{-1} = u_1 + 2h\frac{\partial u}{\partial n}(x_0), \quad u_{N+1} = u_{N-1} + 2h\frac{\partial u}{\partial n}(x_N) \tag{26}$$

を代入して、正方行列係数の連立 1 次方程式を得る:

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -2 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -2 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_0 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix} + \frac{2}{h}\begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial n}(x_0) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \frac{\partial u}{\partial n}(x_N) \end{pmatrix}.$$

境界条件を代入して

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -2 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -2 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_0 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix} + \frac{2}{h}\begin{pmatrix} -\alpha \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta \end{pmatrix}. \tag{27}$$

最初と最後の行に $\dfrac{1}{2}$ をかけて対称化する:

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 1 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_0 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{N-1} \\ \frac{1}{2}f_N \end{pmatrix} + \frac{1}{h}\begin{pmatrix} -\alpha \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta \end{pmatrix}. \tag{28}$$

この係数行列 $K_{\mathrm{N},N+1}$ については既に調べてある。解が存在するためには、右辺のベクトルが $\mathbf{1}_{N+1}$ と直交すること、すなわち

$$\frac{1}{2}f_0 + \sum_{j=1}^{N-1} f_j + \frac{1}{2}f_N + \frac{1}{h}(\beta - \alpha) = 0 \tag{29}$$

を満たすことが必要十分である。これを差分方程式の整合条件と呼ぶことにする。

連立 1 次方程式

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & & & & \\ 0 & 2 & -1 & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_0 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_{N-1} \\ \frac{1}{2}f_N \end{pmatrix} + \frac{1}{h}\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \beta \end{pmatrix}. \tag{30}$$

の解 $\boldsymbol{U}_{\mathrm{S}}$ を求めれば

$$\{\boldsymbol{U}_{\mathrm{S}} + C\mathbf{1}_{N+1} \mid C \in \mathbb{R}\}$$

が (27) の (あるいは (28) の) 解空間である。

注意 7.1 (整合条件について) 微分方程式の問題の整合条件

$$\int_a^b f(x)\,dx + \beta - \alpha = 0$$

と差分方程式の整合条件

$$\frac{1}{2}f_0 + \sum_{j=1}^{N=1} f_j + \frac{1}{2}f_N + \frac{1}{h}(\beta - \alpha) = 0$$

を見比べてみよう。前者に現れる積分をいわゆる台形則で近似すると後者になるのはもっともらしいが、前者を満たしている f, α, β に対して、($f_j = f(x_j)$ で f_j を定めたとき) 後者が厳密に満たされるとは限らないことは注意を要する。その場合は、差分方程式の解は存在しないわけである。

存在しない解を求めるのはナンセンスであるから、α を

$$\frac{1}{2}f_0 + \sum_{j=1}^{N=1} f_j + \frac{1}{2}f_N + \frac{1}{h}(\beta - \widetilde{\alpha}) = 0$$

を満たすような $\widetilde{\alpha}$ で置き換えた問題を解いている、と考えることにする。(28) には 、α はあらわに現れず、$\partial u/\partial n(x_N) = \beta$ しか現れないので、都合が良い。台計則の性質から、f が滑らかな関数ならば、$|\alpha - \widetilde{\alpha}| = O(1/N^2)$ が成り立つ。■

7.3 MATLAB プログラムとその実験結果

数値計算で確認してみよう。

poisson1n_nh.m

```
% poisson1n_nh.m
% 1 次元領域における Poisson -△ u=f (非同次 Neumann 境界条件) を差分法で解く
% 入手 curl -O https://m-katsurada.sakura.ne.jp/program/fdm/poisson1n_nh.m
% 解説 https://m-katsurada.sakura.ne.jp/labo/text/poisson2n-nonhomo.pdf
% (2024/8/27)。
function poisson1n_nm(N)
  arguments
    N=4 % デバッグ用
  end
```

```
  function K = poisson1n_mat(W,N)
    h=W/N;
    I=speye(N+1,N+1);
    v=ones(N,1);
    J=sparse(diag(v,1)+diag(v,-1));
    K=2*I-J;
    K(1,1)=1; K(1,2)=0; K(2,1)=0;
    K(N+1,N+1)=1; K(N+1,N+1)=1;
    K=1/h^2*K;
  end
  % 想定している厳密解
  function val = exact_solution(x)% =x*(1-x)=x-x^2
    val = x .* (1 - x);
  end
  % f=-△u=-d^2u/dx^2
  function val = f(x)% = -u''(x) = 2
    val = 0 .* x + 2.0;
  end
  % ∂u/∂n(a)=-∂u/∂x(a)
  function val = b_l(x)% =-u'(0)=-(1-2x)|x=0
    val = -1;
  end
  % ∂u/∂n(b)=∂u/∂x(b)
  function val = b_r(x)% 1-2x|x=1
    val = -1;
  end
  % 領域
  a=0; b=1;
  beta=-1;
  h=(b-a)/N;
  fprintf('N=%d, h=%g\n', N, h);
  A=poisson1n_mat(b-a,N);
  if N <= 10
    disp('A='); disp(full(A));
  end
  fprintf('det(A)=%e\n', det(A))
  fprintf('cond(A)=%e\n', condest(A));

  X=linspace(a,b,N+1);
  F=f(X');
  if N <= 10
    disp('X='); disp(X);
    disp('F=f(X)='); disp(F');
  end
  fprintf('sum=%g\n', sum(F(:,1)));
  fprintf('beta=%g, f(a)/2=%g, f(b)/2=%g, h=%g\n',...
        b_r(b), f(a)/2, f(b)/2, h);
  integral=h*(f(a)/2+sum(F(2:N,1))+f(b)/2);
  alpha=-(integral+b_r(b));
  fprintf('積分=%g, 整合条件の成り立つα=-u''(0)=-(%g+(%g))=%g, 想定値=%g\n',...
        integral, integral, b_r(b), alpha, b_l(a));
  F(1)=0.0; F(N+1)=0.5*F(N+1)+b_r/h;
  if N <= 10
    fprintf('F= (F(%d)=f(1)/2+beta/h=%g/2+(%g/%g)=%g)\n', N+1, f(b), beta, h, F(N+1));
    disp(F);
  end
  %whos A F
  u=A\F;
  plot(X,u); title('差分解(左端で0のもの)のグラフ'); drawnow; shg;
  error=norm(u-exact_solution(X'),inf);
  fprintf('max norm of error=%e\n', error);
end
```

入手するにはターミナルで

```
curl -O https://m-katsurada.sakura.ne.jp/program/fdm/poisson1n_nh.m
```

これを実行するには、例えば

```
cp -p poisson1n_nh.m ~/Documents/MATLAB
```

とコピーして (私はシンボリック・リンクをはることにしている)、MATLAB の中で

```
>> poisson1n_nh
```

(分割数はデフォールトの $N = 4$ が採用される。)

あるいは、分割数 N を指定するため

```
>> poisson1n_nh(10)
```

のようにする。

こちらも打ち切り誤差が 0 となるようだ (丸め誤差は出るけど)。問題を変えないといけないな。もう面倒なので、今回はサボる。

まあ、、うまく動いているらしい。

8　K_{N} のもう 1 つの対称化法: 固有値問題に向けて

Dirichlet 境界値問題の場合は自然に対称な係数行列 K_{D} が得られた。

一方、Neumann 境界値問題の場合は非対称な係数行列 K_{N} が得られた。前節では対称な係数行列を持つ連立 1 次方程式に変換した。境界値問題を解くだけならばそれで十分であるが、固有値問題を解く場合のことを考えると、もう一つの方法を紹介しておく。

$$
\begin{aligned}
-u''(x) &= \lambda u(x),\\
u'(a) &= u'(b) = 0
\end{aligned}
$$

を同じように差分近似すると次式がえられる。

$$
\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix}
2 & -2 & & & & \\
-1 & 2 & -1 & & & \\
 & -1 & 2 & -1 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & -1 & 2 & -1 \\
 & & & & -2 & 2
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} u_0 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix}
= \lambda \begin{pmatrix} u_0 \\ \vdots \\ u_{N-1} \\ u_N \end{pmatrix}
\tag{31}
$$

$$
C := \begin{pmatrix}
\sqrt{2} & & & & \\
 & 1 & & & \\
 & & \ddots & & \\
 & & & 1 & \\
 & & & & \sqrt{2}
\end{pmatrix},
\tag{32}
$$

$$\boldsymbol{V} := C^{-1}\boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}U_0 \\ U_1 \\ \vdots \\ U_{N=1} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}U_N \end{pmatrix}$$

とおくと

$$K_{\mathrm{N}}\boldsymbol{U} = \lambda\boldsymbol{U} \Leftrightarrow C^{-1}K_{\mathrm{N}}C\boldsymbol{V} = \lambda\boldsymbol{V}.$$

$$C^{-1}K_{\mathrm{N}}C = \begin{pmatrix} 2 & -\sqrt{2} & & & & & \\ -\sqrt{2} & 2 & -1 & & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & -1 & 2 & -1 & \\ & & & & -1 & 2 & -\sqrt{2} \\ & & & & & -\sqrt{2} & 2 \end{pmatrix}.$$

(左から C^{-1} をかけると最初と最後の行が $1/\sqrt{2}$ 倍される。右から C をかけると最初と最後の列が $\sqrt{2}$ 倍される。結果として、対角線上にある最初と最後の成分は変わらない。)

こうして対称行列の固有値問題に帰着できた。

K_{N} と $C^{-1}K_{\mathrm{N}}C$ は固有値が同じで、前者の固有ベクトル $\boldsymbol{U}$ に対して $\boldsymbol{V} := C^{-1}\boldsymbol{U}$ は $C^{-1}K_{\mathrm{N}}C$ の固有ベクトルである。後者は実対称行列の固有ベクトルであるから、異なる固有値に属する固有ベクトルは互いに直交する。

$j \neq k$ とする。$\boldsymbol{U}_j = (U_{j,0}, U_{j,1}, \cdots, U_{j,N})$ と $\boldsymbol{U}_k = (U_{k,0}, U_{k,1}, \cdots, U_{k,N})$ は、それぞれ $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}U_{j,0}, U_{j,1}, \cdots, U_{j,N-1}, \frac{1}{\sqrt{2}}U_{j,N}\right)$, $\left(\frac{1}{\sqrt{2}}U_{k,0}, U_{k,1}, \cdots, U_{k,N-1}, \frac{1}{\sqrt{2}}U_{k,N}\right)$ にうつる。ゆえに

$$j \neq k \Rightarrow \frac{1}{2}U_{j,0}U_{k,0} + \sum_{\ell=1}^{N=1} U_{j,\ell}U_{k,\ell} + \frac{1}{2}U_{j,N}U_{k,N} = 0$$

これは

$$p \neq q \Rightarrow \int_0^1 \cos(p\pi x)\cos(q\pi x)\,dx = 0$$

を台形公式で近似した形になっているのであろう。知らなかったけれど、余弦函数の選点直交性とかあるのかな。きっとその式になっているんだ。

余談 8.1 ずっと以前に、正方形板の Chladni 図形の数値シミュレーションをするとき、行列をどうやって対称化するか迷ったけれど、ダメもとで熱方程式の場合にうまく行った方法 (ここで紹介した方法) を適用して、うまく行った。この方法はある程度まで広く使えるのだろう。計量の取り直しみたいな感じで自然に思えてきた。■

9 Neumann 境界値問題を連立 1 次方程式の解法の工夫で解決する

(準備中)

Neumann 境界値問題は、いわゆる “不定な” 問題で、特異な係数行列が現れ、特解を求めて解く方法は既に説明したけれど、特異な行列を係数とする連立 1 次方程式を解く反復法アルゴリズムの研究があるらしい。(単発の論文はいくつか目にしたことがあるけれど、全体像はまだ見えていない。)

10　Neumann 境界値問題に対する有限要素法

(準備中)

いきなり 2 次元をやってしまえる気もするが。1 次元の Poisson 方程式 (左で Dirichlet, 右で Neumann) に対する有限要素法の説明と C プログラムはあるので、Neumann 問題も取り組みやすい。実際にどういう連立 1 次方程式になるかとか。それをどう解くかとか。差分法のときと同様に処理できるかどうか。ふと FreeFem++を思い出したが、例の tgv を用いるテクニック使ってみるとか。

参考文献

[1] 山本哲朗：2 点境界値問題の数理, コロナ社 (2006).

[2] 桂田祐史：微分方程式 2 講義ノート (旧「応用解析 II」), https://m-katsurada.sakura.ne.jp/lecture/pde/pde2013.pdf (1997 年〜).

[3] 桂田祐史：微分方程式入門, https://m-katsurada.sakura.ne.jp/lecture/kiso4/kiso4ode.pdf, 基礎数学 IV を講義したときの講義ノート (2004).

[4] 山本哲朗：行列解析の基礎 — Advanced 線形代数, サイエンス社 (2010/12/25), 電子版が 2019/3/10 に発行されている.

[5] 山本哲朗：数値解析入門 [新訂版], サイエンス社 (2003/6/1), 1976 年初版発行の定番本の待望の改訂版.

[6] 齊藤宣一：数値解析入門, 東京大学出版会 (2012/10/23), 基本的な数値計算法に対する現代的な優れた教科書.『誤植の訂正、内容の補足説明をしてあるノート「数値解析入門」補講』が http://www.infsup.jp/saito/materials/na_book_appendix1.pdf で公開されている。

[7] 桂田祐史：Poisson 方程式に対する差分法, https://m-katsurada.sakura.ne.jp/labo/text/poisson.pdf (2000 年?〜).