今後のゼミの方針, しばらく取り組む課題

桂田 祐史

2016 年 11 月 18 日, 11 月 25 日 加筆訂正

出来る限り、卒業研究のテーマは自力で選んで欲しい。

確認

桂田ゼミの卒業研究のテーマの選び方は、次の条件を満たしていることが (ほぼ) 必要十分。

1. 自分自身が興味を持っていること。
   自分で問が出せるか、が大事。「○○はどうなっているのだろう」、「なぜ□□なのだろう」、「本当に△△なのか確かめたい」と疑問を持って、その解決のために、自発的に行動 (情報収集したり、考えたり) 出来るかどうか。

2. 適度の難しさであること。
   すぐ出来てしまうような簡単すぎることは NG. その反対に難しすぎて、出来そうもないことも注意 (ある程度調べないと難しいかどうかも分からないことが多いので、しばらく調べてみることは構わないけれど)。

3. 桂田が指導できること。(知らないことでも、一緒に学ぶのはありなので、この条件は割と緩い)

4. (暗黙の、緩い条件) 数学または現象数理学に関わること。

自分で見つけられたら、報告して、OK が出たら、スタートして下さい。「こんなのはどうでしょう」という相談もありです。

トレーニング計画

卒研テーマは自由だけれど、実際的なことを言うと、コンピューターが利用できる、または実験 (や観察・観測) を伴うものがやりやすい、ということは言えます[1]。

そのためもあって、ゼミの学生には、ある程度以上、コンピューターを使った計算に慣れてもらうことにしています。
ゼミで 2 回程度で一応の形がつけられるような課題をいくつか用意しました。

[1] 数学科のようなところだと、予備知識・基礎学力の問題から、学部学生が研究をすることは難しい、と考えているところが多く、何かテキストを勉強することが卒研の内容、というところが多いです。ここでもそれをやっても良いですが、ささやかでも、答が知られていないことを研究しようと考えるのならば、コンピューターや実験をからめるのが良いでしょう。

1　常微分方程式の初期値問題の数値解法

練習問題のプリントの [11] 参照。Euler 法, Runge-Kutta 法で計算して、結果を可視化するテクニックを身にけるのは意義があります (人がやっているのを見るのも有意義)。

授業で、C 言語のプログラムを書いたことがあるかもしれません。そのやり方で構いませんが、この機会に C++ 言語を使ってみたらどうでしょう。「Eigen – 行列演算用 C++ クラスライブラリィ」[2] にあるサンプル・プログラムを見て、興味を持てたらチャレンジしてみて下さい。

取り上げる問題は、物理絡みの定番ものでも良いですが、授業のどこかで紹介されて興味を持ったもの、というのでも良いです (この学科はその辺は恵まれていると思います)。

常微分方程式の数値解法には、こういう (Euler 法、Runge-Kutta 法などの) 入門的な話題以外に、**硬い方程式**用の解法、**シンプレクティック法**などの進んだ話題もあります[3]。

常微分方程式の数値解法のテキストの定番本として、和書では三井 [2], [3], 洋書 (翻訳) ではハイラー・ネルセット・ヴァンナー [4], ハイラー・ヴァンナー [5] をあげておきます。

2　非線形方程式の数値解法

二分法と Newton 法が有名で、練習問題のプリントの [11] が参考になります。

- 多次元、無限次元の場合の Newton 法も重要です。例えば

$$\begin{aligned} -u''(x) &= u(x)^2 \quad (0<x<1),\\ u(0) &= u(1) = 0 \end{aligned}$$

  の 0 でない解は求められるでしょうか？差分法を使うと、

$$\frac{1}{h^2}\begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1^2 \\ u_2^2 \\ \vdots \\ u_{N-1}^2 \end{pmatrix}$$

  となります。これを Newton 法で解くのは、ちょっとした問題です。

- Newton 法は、理論的にも重要とされて来ましたが、特に最近は精度保証付き数値計算にからんでますます重要性が高くなっています。その方面に興味を持ってくれる学生が出てこないかなぁ、と思っています。

3　Neumann 境界条件の仮想格子点を用いた近似法

これは将来的に差分法を利用した数値計算をする人には必修事項です。

`heat1n-i-glsc.c` の中で、Neumann 境界条件の近似に工夫があります。それは桂田 [6] の第 1 章で説明してあるので、それを読んで理解して、非同次境界条件 $\dfrac{\partial u}{\partial x}(0,t)=A$, $\dfrac{\partial u}{\partial x}(1,t)=B$ の場合に数値実験してみて下さい。

---

[2] http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/knowhow-2013/node32.html

[3] 特に後者について「学生の誰かやってみないかな？」と思っています。これについては、牧野 [1] が一味違った入門書です。

素朴な近似と仮想格子点を用いた近似の精度の違いを調べてみると良いです。

(注) 有限要素法で近似すると、ここで説明した (仮想格子点を用いる近似法) と同じ方程式が得られることが知られています。仮想格子点近似は「変わった方法」ではなくて、まっとうな方法です。

4 連立1次方程式の数値解法の数理

n 次正方行列 A, n 次元ベクトル b が与えられたとき、連立1次方程式 $Ax = b$ の解を求める、というのは基本的なようでとても奥が深い問題です。

heat1d-i-glsc.c の中では、連立1次方程式を解くために、次のコードが使われています。

```
/* 三重対角行列の LU 分解 (pivoting なし) */
void trilu(int n, double *al, double *ad, double *au)
{
  int i, nm1 = n - 1;
  /* 前進消去 (forward elimination) */
  for (i = 0; i < nm1; i++) {
    al[i + 1] /= ad[i];
    ad[i + 1] -= au[i] * al[i + 1];
  }
}

/* LU 分解済みの三重対角行列を係数に持つ三項方程式を解く */
void trisol(int n, double *al, double *ad, double *au, double *b)
{
  int i, nm1 = n - 1;
  /* 前進消去 (forward elimination) */
  for (i = 0; i < nm1; i++) b[i + 1] -= b[i] * al[i + 1];
  /* 後退代入 (backward substitution) */
  b[nm1] /= ad[nm1];
  for (i = n - 2; i >= 0; i--) b[i] = (b[i] - au[i] * b[i + 1]) / ad[i];
}
```

ごくごく短いですが、良く考えて作られた非常に優れたコードです。これをきちんと理解することは、それだけでとても有意義であると信じます。キーワードは、Gauss の消去法、LU 分解、計算量、です。

LU 分解については、桂田 [7] がまとまっています。計算量については、桂田 [8] に少し書いてあります。

空間多次元の場合には、Gauss の消去法のような直接法以外の、反復法が使われることも多いです (特に大規模問題の場合はそうです)。これについては、桂田 [9] があります (が、内容にはあまり自信がありません)。

この分野には、和書でも杉原・室田 [10] という重厚な本がありますが、入手が難しいので、読みたい場合は相談して下さい。

実は、連立1次方程式の解法の研究は現在でも盛んです。特に精度保証付き数値計算をする場合、連立1次方程式の解の精度保証が必要になり、その研究に真剣に取り組んでいる人達がいます。

5 波動方程式の初期値境界値問題

熱方程式以外に波動方程式の初期値境界値問題も重要です。空間 1 次元であれば、

(1) $$u_{tt}(x,t) = c^2 u_{xx}(x,t) \quad ((x,t) \in (0,1) \times (0,\infty)),$$

(2) $$u(0,t) = u(1,t) = 0 \quad (t \in (0,\infty)),$$

(3) $$u(x,0) = \phi(x), \quad u_t(x,0) = \psi(x) \quad (x \in [0,1])$$

のような方程式になります。

- 数学的には、かなり熱方程式と異なり、色々調べるべきところがあります (ゼミのテキストであったスタンリー・ファーロウ [11] の第 3 章に色々説明してある)。
- 差分法の計算も一味違います。
- 空間次元により解の様子が大きく異なり、そういう意味でも面白いです。
- 桂田研的には、以前から何人かが挑戦しているけれど、なかなか解決に至らない「楕円形の酒場」という問題があります。

過去の卒研の内容は、桂田 [12] にありますが、熱方程式と比べるとまだまだ、という感じです。

6 2 次元長方形領域における熱方程式の初期値境界値問題の Fourier の方法による解

これはゼミの学生全員に理解してもらいたい (だから、なるべく誰かにやってもらって、漠然とでも覚えておいて欲しい) 内容です。

桂田 [6] の第 2 章で説明してあります。

7 2 次元長方形領域における熱方程式の初期値境界値問題の差分解 — 陽解法

これもゼミの学生全員に理解してもらいたい内容です。

差分方程式の導出は、桂田 [6] の第 3 章 2 節で説明してあります。

1 からプログラムを書くとそれなりに大変だけれど、たたき台プログラムがあります (http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/program/fdm/heat2d-e.c — ただし、GLSC に手を入れる必要があるかも)。安定性の条件、厳密解の差分解への収束条件を理解して、数値実験まですると良いでしょう (要領が良ければ 1 回で終わるかも, なんなら 3 次元でやってみます？)。

8 2 次元長方形領域における熱方程式の初期値境界値問題の差分解 — 陰解法

これは将来的に差分法を利用した数値計算をする人には必修事項です。

差分方程式の導出は、桂田 [6] の第 3 章 3 節で説明してあります。

連立１次方程式を作って解くことになりますが、方程式をきちんと作るのも、解くのも、それなりに難しいです。

桂田 [6] には、C 言語のプログラムが載っていますが、段階を追って、シンプルな (でも効率は低い) プログラムから、工夫をした (効率が高い) プログラムまで説明してあります。皆に説明するときは、一番素朴なプログラムと、一番工夫したプログラムの２つを取り上げるべきでしょうか。

C 言語のたたき台プログラムがありますが、今だったら、MATLAB か Python を使ってプログラムを書くことを勧めます。

熱方程式に限れば、完全な陰解法 (θ 法) よりは、**相互方向陰解法** (ADI 法) が効率的な優れた方法です。このアルゴリズムの解説は [6] の３章６節、その安定性の証明は [6] の４章６節にあります。

実は、陰解法が良いか、陽解法が良いかは、一般的には決着がついていなくて、現在でも大真面目で取り組んでいる人がいるようです。

9　差分解の厳密解への収束証明

数値計算の方法には色々なものがありますが、その妥当性、正当性のようなものが気にならないでしょうか？例えば、プリント「発展系の数値解析」の 7.7(5) の定理の証明に興味が持てたら、やってみましょう。

これは原理的なところが気になる人向けです。

誰かが試しにやってみて、他の人が聴けることが望ましいかな、と考えていますが、必要に迫られる人が出て来てからでもよいと思っています。

7.7(5) の説明だけなら、１回で終わりそうなので、その後に続くものをあげておきます。

- 熱方程式に対する差分法の、普通のノルムに関する安定性の定理
  これは過去の卒研で完了しているので ([6] の４章に書いてある)、ほどほどの課題です。
- 熱方程式に対する差分解の厳密解への収束 (普通のノルムに関する) の証明
  「よく知られている」はずだけど分かりやすく書いたものがないので、それが出来たら、卒研完了として良い。
- 双極型方程式に対する Courant-Friedrichs-Lewy の条件, Lax の同等性定理について
  有名な定理だけれど、日本語で分かりやすく説明したものが見当たらない。きちんと勉強してレポートにまとめられたら、それで卒研完了として良い。

10　有限要素法入門 (FreeFem++ 入門)

早い段階で有限要素法を見る機会を持つのが大事だと考えています。以前は敷居が高かったのですが、今は FreeFem++[4] のようなソフトウェアがあるので、とりあえず計算してみるだけならば気軽に試せるようになっています。誰かやる人はいないでしょうか。もしも誰も出てこなかったら、桂田自身が紹介しよう、と考えています。

差分法は、偏微分方程式の古典的な数値解法だけれど、それ以外にも、有限要素法、有限体積法というのが有名です。ある時期まで、差分法と有限要素法が二大数値解法とされていて、近年はそこに有限体積法が割って入ってきた感じです。

4

有限要素法は、数学的に非常にきれいに整備されていて、それを用いたプログラムの自動生成の研究も進んでいます。FreeFem++ はその研究の成果の 1 つです。色々な微分方程式の問題に対して、FreeFem++ では、ごく短いプログラムを書くことで数値的に解けます。

この課題をする人は、菊地 [13], 大塚・高石 [14] を持っていると良いでしょう。特に [13] を輪講で解説するのは有意義です。

より理論的なことも勉強の価値はあり、桂田は大学院に進学する人には、有限要素法の理論の勉強を強く勧めています。

11 連立 1 次方程式の数値解法の数理 (2) 反復法

連立 1 次方程式の数値解法には、Gauss の消去法に代表される**直接法**以外に、**反復法**と呼ばれる一群の解法があります。大規模な問題に現れる連立 1 次方程式を直接法で解くのは困難で、実際上、反復法で解くしかない、と考えられています。

反復法の代表例である**共役勾配法** (CG 法) について、基本的なアルゴリズムと数値実験をして、触れてみるのは良い経験になると思います。

CG 法のアルゴリズム:

初期ベクトル $\boldsymbol{x}_0$ をとる ; 目標とする相対残差 ε を決める ;
$\boldsymbol{r}_0 := \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}_0;\ \boldsymbol{p}_0 := \boldsymbol{r}_0;$
for $k := 0, 1, \cdots$ **until** $\|\boldsymbol{r}_k\| \le \varepsilon \|\boldsymbol{b}\|$ **do**
  begin
$$\alpha_k := \frac{(\boldsymbol{r}_k, \boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)};$$
$$\boldsymbol{x}_{k+1} := \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k;$$
$$\boldsymbol{r}_{k+1} := \boldsymbol{r}_k - \alpha_k A\boldsymbol{p}_k;$$
$$\beta_k := -\frac{(\boldsymbol{r}_{k+1}, A\boldsymbol{p}_k)}{(\boldsymbol{p}_k, A\boldsymbol{p}_k)};$$
$$\boldsymbol{p}_{k+1} := \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{p}_k;$$
  end

準備の時間がなかったので古い資料ですが、「連立 1 次方程式に対する CG 法」[5] を紹介しておきます。

参考文献

[1] 牧野淳一郎：パソコン物理実地指導, 共立出版 (1999).

[2] 三井斌友（たけとも）：数値解析入門, 朝倉書店 (1985).

[3] 三井斌友：常微分方程式の数値解法, 岩波書店 (2003).

[4] E. ハイラー, S. P. ネルセット, G. ヴァンナー：常微分方程式の数値解法 I 基礎編, シュプリンガー・ジャパン (2007).

[5] E. ハイラー, G. ヴァンナー：常微分方程式の数値解法 II 発展編, シュプリンガー・ジャパン (2008).

[5] `http://nalab.mind.meiji.ac.jp/2016/lesson04-new.pdf`

[6] 桂田祐史：熱方程式に対する差分法 I — 区間における熱方程式 —, http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/labo/text/heat-fdm-1.pdf (1998 年〜).

[7] 桂田祐史：発展系の数値解析の続き, http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/labo/text/heat-fdm-0-add.pdf (1997 年〜).

[8] 桂田祐史：連立 1 次方程式 I, http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/labo/text/linear-eq-1.pdf (2002 年〜).

[9] 桂田祐史：連立 1 次方程式 II, http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/labo/text/linear-eq-2.pdf (2002〜).

[10] 杉原正顯, 室田一雄：線形計算の数理, 岩波書店 (2009).

[11] Farlow, S. J.: *Partial Differential Equations for Scientists and Engineers*, John Wiley & Sons, Inc (1982), 邦訳: スタンリー・ファーロウ 著, 入理 正夫・入理 由美 訳, 偏微分方程式, 朝倉書店 (1996).

[12] 桂田祐史：波動方程式に対する差分法, http://nalab.mind.meiji.ac.jp/~mk/labo/text/wave.pdf (1999 年?〜).

[13] 菊地文雄：有限要素法概説, サイエンス社 (1980), 新訂版 1999.

[14] 大塚厚二, 高石武史：有限要素法で学ぶ現象と数理 — FreeFem++数理思考プログラミング —, 共立出版 (2014), http://comfos.org/jp/ffempp/book/ というサポート WWW サイトがある。