

# 微分方程式 数値解法ハンドブック

ほの

2025 年 7 月 28 日

## 概要

本書は、科学技術計算において避けては通れない微分方程式の数値解法をテーマとした、実践的なハンドブックです。単なる手法の羅列に終始せず、目の前の問題に対して「なぜその手法を選ぶのか」という思考プロセスを身につけることを最大の目的としています。読者は、常微分方程式から偏微分方程式に至るまで、様々な問題の性質を見極め、適切な解法を判断し、さらにはその実装と評価を行うための一連の知識と技術を体系的に学ぶことができます。本書は、ご自身の研究や開発で微分方程式の数値計算を必要とするエンジニア、研究者、学生、データサイエンティスの皆様にとって、問題解決の指針となる「羅針盤」となることを目指します。

## 目次

第 I 部	基礎体力編 - 数値計算の共通言語	3
1	なぜ、どのように離散化するのか	3
1.1	微分から差分へ：テイラー展開という名の魔法	3
1.2	誤差を科学する：打ち切り誤差 vs 丸め誤差、局所誤差 vs 大域誤差	4
1.3	精度の「次数」を理解する： $O(h)$ と $O(h^2)$ はどれだけ違うのか	5
1.4	安定性こそが生命線：陽解法と陰解法、その本質的な違い	6
1.5	保存則を尊重する：物理現象をシミュレートする上での心構え	8
2	線形代数 - 巨大連立方程式という名のラスボス	10
2.1	なぜ線形代数が必要か：陰解法や有限要素法が必ず行き着く場所	10
2.2	直接法 vs 反復法：ガウスの消去法、LU 分解からヤコビ法、ガウス＝ザイデル法まで	11
2.3	疎行列を攻略せよ：疎行列の効率的な扱い方	12
2.4	切り札、共役勾配法 (CG 法)：対称な問題における高速ソルバー	14
3	フーリエ解析 - 安定性解析の万能ツール	16
3.1	周期現象とフーリエ級数	16
3.2	フォン・ノイマン安定性解析：差分スキームの安定性を”見る”方法	17
3.3	スペクトル法への誘い：超高精度計算の世界	18

第 II 部	常微分方程式 (ODE) 編 - 時間発展を追いかける	20
4	初期値問題 (IVP) - 基本の「き」	20
4.1	問題の見分け方：時刻 $t = 0$ の状態から未来を予測する問題	20
4.2	解法図鑑：Runge-Kutta ファミリー	21
5	発展的初期値問題	24
5.1	解法図鑑：線形多段階法	24
5.2	解法図鑑：力学系のためのシンプレクティック法	26
6	スティッフな方程式と境界値問題 (BVP)	29
6.1	スティッフ問題の見分け方：現象の時間スケールが極端に異なる場合	29
6.2	解法図鑑：スティッフ問題用ソルバー	30
6.3	境界値問題の見分け方：両端が固定された弦のたわみなど	32
6.4	解法図鑑：境界値問題	33
第 III 部	偏微分方程式 (PDE) 編 - 場と現象を捉える	36
7	三大離散化手法 - それぞれの哲学	36
7.1	有限差分法 (FDM)：シンプルで直交格子に強い	36
7.2	有限体積法 (FVM)：流体力学の主役。保存則の扱いに優れる	37
7.3	有限要素法 (FEM)：複雑な形状の扱いはお手の物。構造解析の王道	38
8	放物型方程式 - 拡散・熱伝導の世界	40
8.1	問題の見分け方：時間とともに”なまっていく”現象	40
8.2	解法図鑑	41
9	双曲型方程式 - 波動・移流の世界	44
9.1	問題の見分け方：情報が波として伝播する現象	44
9.2	解法図鑑：基礎スキーム	45
9.3	解法図鑑：高解像度スキーム	47
10	楕円型方程式 - 定常状態の世界	50
10.1	問題の見分け方：時間変化のない、釣り合いの状態	50
10.2	解法図鑑：反復法ソルバー	51

## 第1部

# 基礎体力編 - 数値計算の共通言語

## 1 なぜ、どのように離散化するのか

### 1.1 微分から差分へ：テイラー展開という名の魔法

物理学や工学の世界で出会う方程式のほとんどは、微分方程式の形で与えられます。惑星の運動から電子の状態まで、自然界のあらゆる現象は、ある量の「瞬間的な変化率」を記述する方程式によって支配されていると言っても過言ではありません。

しかし、これらの微分方程式を厳密に解ける（解析的に解ける）幸運なケースは、ごく僅かです。多くの場合、私たちはコンピュータの力を借りて、近似的な解を求める数値計算という手段に頼らざるを得ません。

#### この章の心

数値計算の本質は、コンピュータが直接は扱えない連続的な「微分」という操作を、四則演算で計算可能な離散的な「差分」で近似することにあります。この翻訳プロセスを離散化と呼びます。

では、どのようにして微分を差分に翻訳するのでしょうか。この翻訳作業において、驚くほど強力な道具となるのがテイラー展開です。

#### 補足：テイラー展開

ある点  $x$  での値  $f(x)$  が分かっているとき、少しだけ離れた点  $x+h$  での値  $f(x+h)$  は、テイラー展開によって次のように書き表せます。

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \dots$$

同様に、点  $x-h$  での値は次のようになります。

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \dots$$

これらの式を整理することで、様々な精度の差分近似式を導出できます。

#### 定義 1.1：前進差分 (Forward Difference)

テイラー展開の式で  $O(h^2)$  以降の項を無視し、 $f'(x)$  について解くと、最も単純な差分近似である前進差分が得られます。

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

### 定義 1.2 : 後退差分 (Backward Difference)

同様に、 $f(x - h)$  の展開式から導かれる近似式を後退差分と呼びます。

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x - h)}{h}$$

### 定義 1.3 : 中心差分 (Central Difference)

$f(x + h)$  と  $f(x - h)$  の展開式の差を取ると、 $O(h^2)$  の項が打ち消し合い、より精度の良い中心差分が得られます。多くの場面で前進・後退差分より優れた近似を与えます。

$$f'(x) \approx \frac{f(x + h) - f(x - h)}{2h}$$

このように、テイラー展開は、微分を差分に書き換えるための、いわば「魔法の呪文」なのです。この単純なアイデアを巧妙に組み合わせることで、私たちは複雑な微分方程式を、コンピュータが解ける巨大な連立一次方程式へと変換していきます。この章では、この離散化という操作が、どのようにして数値計算の世界の扉を開くのかを探求していきます。

## 1.2 誤差を科学する : 打ち切り誤差 vs 丸め誤差、局所誤差 vs 大域誤差

前節では、テイラー展開を用いることで、微分を差分で「近似」できることを見ました。この「近似」という言葉が示す通り、数値計算には必ず\*\*誤差\*\*が伴います。計算結果の信頼性を担保するためには、誤差がどこから来て、どのように振る舞うのかを科学的に理解することが不可欠です。

数値計算に現れる誤差は、その起源によって大きく二つの種類に分類できます。

### 定義 1.4 : 打ち切り誤差 (Truncation Error)

数学的な厳密な式を、計算可能な有限の項で近似することによって生じる誤差を打ち切り誤差と呼びます。

例えば、テイラー展開  $f(x + h) = f(x) + hf'(x) + O(h^2)$  を  $f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$  と近似したとき、無視した  $O(h^2)$  の項が打ち切り誤差の主要な原因となります。この誤差は、計算ステップの幅  $h$  を小さくすればするほど、原理的には小さくできます。

### 定義 1.5 : 丸め誤差 (Round-off Error)

コンピュータが有限の桁数（精度）しか扱えないために生じる誤差を丸め誤差と呼びます。例えば、円周率  $\pi$  を '3.1415926535' のように有限の桁で表現した時点で、本来の値との間に微小な差が生まれます。この小さな誤差が、膨大な回数の計算を繰り返す中で蓄積し、結果に影響を及ぼすことがあります。

## 打ち切り誤差と丸め誤差のトレードオフ

打ち切り誤差を減らすために計算の刻み幅  $h$  を極端に小さくすると、全体の計算ステップ数が増加します。その結果、各ステップで生じる丸め誤差が蓄積しやすくなり、かえって全体の精度が悪化することがあります。両者のバランスを考えることが、精度の良い計算を行う上での鍵となります。

さらに、誤差はその評価の仕方によって、局所的な視点と大域的な視点に分けられます。

### 局所誤差 vs 大域誤差

- **局所誤差 (Local Error):** 計算の「一歩」だけを進めたときに生じる誤差を指します。例えば、時刻  $t_n$  の値が真の値と完全に一致していると仮定したときに、次のステップ  $t_{n+1}$  でどれだけ真の値からずれるか、といった評価です。
- **大域誤差 (Global Error):** 計算の開始点から最終的な時刻までに蓄積した、誤差の総量を指します。私たちが最終的に知りたいのは、この大域誤差が十分に小さいかどうかです。安定な数値解法とは、局所誤差が小さければ、大域誤差もそれに比例して小さく抑えられるような手法を指します。

## 1.3 精度の「次数」を理解する： $O(h)$ と $O(h^2)$ はどれだけ違うのか

数値解法を選ぶ際、その性能を評価する最も重要な指標の一つが「精度 (Accuracy)」です。そして、その精度を定量的に表現するのが「次数 (Order)」という概念です。これは、計算の刻み幅  $h$  を小さくしていったときに、打ち切り誤差がどれくらいの速さでゼロに収束していくかを示しています。

### 定義 1.6 : 精度の次数 (Order of Accuracy)

ある数値解法の局所打ち切り誤差が、刻み幅  $h$  の  $p$  乗に比例して小さくなる時、その解法は  $p$  次精度であるといい、 $O(h^p)$  と表記します。

$$\text{Error} \propto h^p$$

$p$  の値が大きいほど、刻み幅  $h$  を小さくしたときの誤差の減少が急激であり、高精度な手法であると言えます。

では、 $O(h)$  の 1 次精度と  $O(h^2)$  の 2 次精度では、具体的にどれほどの違いがあるのでしょうか。その差は、想像以上に劇的です。

## 1 次精度と 2 次精度の違い

- **1 次精度 ( $O(h)$ ):** 誤差が刻み幅  $h$  に比例します。つまり、刻み幅を  $1/10$  にすると、誤差も約  $1/10$  になります。前進差分や後退差分はこの仲間です。
- **2 次精度 ( $O(h^2)$ ):** 誤差が刻み幅  $h^2$  に比例します。つまり、刻み幅を  $1/10$  にすると、誤差はなんと約  $1/100$  になります。中心差分はこの仲間です。

この違いを具体的な数値で見てみましょう。

### 計算例：次数による誤差の減少

仮に刻み幅  $h = 0.1$  のときの誤差が  $0.1$  だったとします。ここから刻み幅を小さくしていくと、誤差は以下のように減少していきます。

刻み幅 ( $h$ )	1 次精度の誤差 (例)	2 次精度の誤差 (例)
0.1	0.1	0.1
0.01	0.01	0.001
0.001	0.001	0.00001
0.0001	0.00001	0.0000001

同じ精度  $0.001$  を達成するのに、1 次精度の手法では  $h = 0.001$  まで刻む必要がありますが、2 次精度の手法なら  $h = 0.01$  の 10 倍粗い刻み幅で済んでしまいます（この例では誤差は  $0.001$  ですが、実際にはより小さい誤差が得られます）。

### なぜ高次精度が重要か？

計算精度を上げるために、単純に刻み幅  $h$  を小さくするのは必ずしも得策ではありません。計算ステップ数が増えることで、全体の計算時間が長くなるだけでなく、丸め誤差が蓄積するリスクも高まります。

より少ない計算ステップで高い精度を達成できる高次精度の手法は、計算効率と結果の信頼性の両面で、極めて重要なのです。多くの実用的な問題で、4 次のルンゲ=クッタ法のような高次の手法が標準的に使われるのは、まさにこのためです。

## 1.4 安定性こそが生命線：陽解法と陰解法、その本質的な違い

これまでに、計算の「誤差」と「精度」について学んできました。しかし、良い数値解法を特徴づける、もう一つの極めて重要な性質があります。それが「安定性 (Stability)」です。どれだけ高精度な手法であっても、不安定な手法は無価値です。なぜなら、計算を進めるうちに誤差が雪だるま式に増大し、最終的には物理的に意味のない、発散した解を与えてしまうからです。

この安定性を議論する上で、数値解法は根本的に二つのアプローチに大別されます。未来の値をどのように計算するか、その計算方式の違いが、安定性に決定的な差をもたらすのです。

### 定義 1.7 : 陽解法 (Explicit Method)

次のステップの値  $y_{n+1}$  を、現在  $n$  のステップまでの既知の値だけを用いて直接計算する手法を陽解法と呼びます。

最も簡単な例は、前進オイラー法です。

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot f(t_n, y_n)$$

右辺は全て既知の量であるため、 $y_{n+1}$  は代入するだけで簡単に計算できます。

### 定義 1.8 : 陰解法 (Implicit Method)

次のステップの値  $y_{n+1}$  を計算する式の中に、その未知であるはずの  $y_{n+1}$  自身が含まれる手法を陰解法と呼びます。

最も簡単な例は、後退オイラー法です。

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot f(t_{n+1}, y_{n+1})$$

$y_{n+1}$  が方程式の両辺に現れるため、各ステップで  $y_{n+1}$  に関する方程式を解く必要があります。

### 陽解法 vs 陰解法 : 本質的なトレードオフ

この二つの手法は、計算の手間と安定性において、明確なトレードオフの関係にあります。

- 陽解法 ●:
  - 長所: 1 ステップあたりの計算が非常に高速で、実装も容易です。
  - 短所: 条件付き安定であることが多いです。すなわち、計算が発散しないためには、刻み幅  $h$  をある厳しい条件 (安定性限界) より小さくしなければなりません。
- 陰解法 :
  - 長所: 無条件安定など、非常に優れた安定性を持つことが多いです。これにより、陽解法では発散してしまうような大きな刻み幅  $h$  を取るのが可能になります。
  - 短所: 1 ステップごとに方程式 (しばしば大規模な連立一次方程式) を解く必要があります、計算コストが高く、実装も複雑になります。

### どちらを選ぶべきか?

一見すると、常に安定な陰解法が優れているように見えるかもしれませんが、問題によっては陽解法の安定性限界が十分に緩やかで、小さな  $h$  でも高速に計算が終わる場合があります。

一方で、現象の中に非常に速い変化と遅い変化が混在するような「スティッフな方程式」(後の章で詳述) では、陽解法は絶望的に小さな  $h$  を要求されます。このような問題では、

陰解法が持つ安定性の恩恵が絶大となり、結果的にはるかに効率的な計算を実現します。問題の性質を見極め、適切な手法を選択することが、数値計算の「腕の見せ所」なのです。

## 1.5 保存則を尊重する：物理現象をシミュレートする上での心構え

これまでに見てきた「精度」や「安定性」は、数値解が数学的に正しい近似であるための重要な指標でした。しかし、物理現象のシミュレーションを行う際には、もう一つ忘れてはならない心構えがあります。それは、その物理系が従うべき根源的な保存則 (**Conservation Law**) を、数値計算のレベルでも尊重する、ということです。

物理法則は、多くの場合、何らかの対称性と、それに伴う保存則に基づいています。例えば、エネルギー保存則、運動量保存則、電荷保存則などがそれに当たります。もしシミュレーションがこれらの法則を破ってしまうと、たとえ計算が発散しなくても、得られる結果は非物理的で信頼性のないものになってしまいます。

### なぜ通常の解法では保存則が破れるのか？

例えば、惑星の公転運動を考えます。この系ではエネルギーが保存されるはずですが、この問題を単純な前進オイラー法で計算すると、各ステップで生じる打ち切り誤差がエネルギーをわずかに増加（または減少）させる方向に系統的に蓄積し、惑星は徐々に軌道を外れて宇宙の彼方へ飛び去ってしまう（あるいは中心星に墜落する）という、非物理的な結果を生み出します。

この問題を解決するため、特定の物理量を保存するように特別に設計された数値解法が存在します。

### 定義 1.9：シンプレクティック法 (Symplectic Method)

力学系のようにハミルトニアンで記述される系に対して用いられる、シンプレクティック法と呼ばれるクラスの解法があります。

この手法は、エネルギーそのものを厳密に保存するわけではありませんが、エネルギーの誤差が時間とともに一方的に増大・減少せず、ある真の値の周りで振動し続けるという、優れた性質を持ちます。そのため、惑星の軌道計算や分子動力学シミュレーションのような、長時間の計算安定性が求められる問題で絶大な威力を発揮します。代表例としてベルレ積分法が知られています。

### 保存則と有限体積法

流体力学などで重要となる質量や運動量の保存は、「ある領域から流れ出た量は、隣の領域に流れ込む量と等しい」という形で表現されます（連続の方程式  $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot j = 0$ ）。

このような問題に対しては、空間を微小な「セル（体積）」に分割し、各セル間の流束（フ

ラックス) の出入りを計算することで、領域全体の総量が厳密に保存されるように定式化された有限体積法 (**Finite Volume Method**) が非常に有効です。

シミュレーションの「正しさ」とは、単に数学的な誤差が小さいことだけを意味するものではありません。その計算が、対象とする物理現象の根底にある対称性や保存則という「物理法則の魂」を、きちんと再現しているかどうか問われるのです。どのような保存則が重要かを見極め、それを尊重する数値解法を選択することは、信頼性の高いシミュレーションを行うための重要なステップとなります。

## 2 線形代数 - 巨大連立方程式という名のラスボス

### 2.1 なぜ線形代数が必要か：陰解法や有限要素法が必ず行き着く場所

#### この部の心構え

「数値計算とは、解析学（微分・積分）を離散化して線形代数にする学問である」

この言葉は、数値計算の本質を鋭く突いています。私たちはこれまで、微分を差分に置き換える「離散化」という操作を学んできました。この操作は、たった一本の微分方程式を、無数の未知数（各格子点での値）が互いに連関しあう、巨大な代数方程式の群れへと姿を変えます。

そして、その方程式の群れが最終的に取る姿こそが、お馴染みの\*\*連立一次方程式\*\*なのです。

#### 計算例：離散化が連立方程式を生むまで

最も簡単な例として、1次元の棒の両端の温度が固定されている定常状態 ( $T(0) = T_A, T(1) = T_B$ ) を考えましょう。この物理現象は、ラプラス方程式  $d^2T/dx^2 = 0$  で記述されます。

2階微分を中心差分で近似すると、棒の内部の各格子点  $i$  において、

$$\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{h^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad -T_{i-1} + 2T_i - T_{i+1} = 0$$

という関係式が成り立ちます。棒の内部を4点 ( $T_1, T_2, T_3, T_4$ ) で分割した場合、この関係式は4本得られ、全体として次のような行列の形で書き表すことができます。

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_A \\ 0 \\ 0 \\ T_B \end{pmatrix}$$

これはまさに、大学1年生で学ぶ、行列  $A$ 、未知数ベクトル  $x$ 、既知のベクトル  $b$  を用いた方程式  $Ax = b$  そのものです。

この構造は、前のセクションで学んだ陰解法においても同様に現れます。陰解法では、各時間ステップで  $y_{n+1}$  に関する方程式を解く必要がありました。もし扱う問題が連立微分方程式であれば、これは未知のベクトル  $y_{n+1}$  に関する連立一次方程式を解く問題に帰着します。

#### 全ての道は線形代数に通ず

リー代数が非線形なり一群の問題を線形代数の問題に帰着させる強力な道具であったように、離散化は微分方程式という解析学の問題を線形代数の問題へと帰着させる、極めて強力な手続きなのです。

陰解法、境界値問題の有限差分法、そしてより高度な有限要素法 (FEM) に至るまで、多

くの実践的で強力な数値解法が最終的に行き着く場所、それがこの巨大な連立一次方程式  $Ax = b$  の求解です。この「ラスボス」をいかに効率よく、かつ正確に倒すかという問題が、大規模な数値シミュレーションの性能を決定づける鍵となります。

## 2.2 直接法 vs 反復法：ガウスの消去法、LU 分解からヤコビ法、ガウス＝ザイデル法まで

微分方程式の離散化という長い旅路の果てに、我々はいよいよ巨大な連立一次方程式  $Ax = b$  という「ラスボス」の元にたどり着きました。このボスを倒す（方程式を解く）ための戦略は、大きく二つの流派に分けられます。一つは有限の手順で厳密解を求める「直接法」、もう一つは近似解を逐次的に改善していく「反復法」です。

### 定義 2.1：直接法 (Direct Method)

有限回かつ、あらかじめ決まった手順の計算によって（丸め誤差を無視すれば）厳密な解を求める手法の総称を直接法と呼びます。アルゴリズムが決定論的であり、解が存在すれば必ずそれにたどり着きます。

- **ガウスの消去法**: 中学・高校の数学でお馴染みの、変数を一つずつ消去していくことで行列を上三角行列に変形し、後退代入によって解を求める方法です。
- **LU 分解**: ガウスの消去法をより系統的にしたもので、行列  $A$  を下三角行列  $L$  と上三角行列  $U$  の積に分解 ( $A = LU$ ) します。これにより、方程式は  $L(Ux) = b$  となり、まず  $Ly = b$  を前進代入で、次に  $Ux = y$  を後退代入で解くことで、効率的に解を得ることができます。

### 定義 2.2：反復法 (Iterative Method)

まず解の初期推測値  $x^{(0)}$  を与え、ある反復計算のルールに従って解を逐次的に更新していくことで、真の解に収束させていく手法の総称を反復法と呼びます。厳密解ではなく、十分な精度の近似解を求めることを目的とします。

- **ヤコビ法**:  $k + 1$  回目の近似解  $x^{(k+1)}$  を、全て  $k$  回目の近似解  $x^{(k)}$  のみを用いて計算する、最もシンプルな反復法です。
- **ガウス＝ザイデル法**: ヤコビ法を改良したもので、 $k + 1$  回目の近似解のある成分を計算する際に、そのステップですでに更新済みの他の成分を早速利用します。多くの場合、ヤコビ法より高速に収束します。

## 直接法 vs 反復法：どちらの武器を選ぶべきか？

どちらの手法が優れているかは、対峙する「ラスボス」の性質、すなわち行列  $A$  の性質に依存します。

- 直接法が有効な場面：
  - 行列のサイズが比較的小さい ( $N$  が数百～数千程度)。
  - 行列が密である (ゼロでない要素が多い)。
  - 計算コスト ( $O(N^3)$ ) を許容でき、厳密な解が欲しい場合。
- 反復法が有効な場面 ☒:
  - 行列のサイズが非常に大きい ( $N$  が数万～数百万以上)。
  - 行列が疎である (ほとんどの要素がゼロ)。これは偏微分方程式の離散化で典型的に現れる状況です。
  - メモリ使用量や計算時間を節約したい場合。

## 疎な行列と反復法の相性

偏微分方程式を離散化して得られる行列  $A$  は、ある格子点の値が隣接する格子点の値としか関係しないため、対角成分とその周辺にしか非ゼロの要素がない「疎な行列」となります。反復法では、行列とベクトルの積の計算が主となるため、この疎な性質を利用することで、1ステップあたりの計算量を劇的に削減できます。これが、大規模シミュレーションで反復法が主役に躍り出る理由です。

## 2.3 疎行列を攻略せよ：疎行列の効率的な扱い方

前節で、偏微分方程式を離散化すると、対角成分とその周辺にしか非ゼロ要素がない「疎行列」が現れることを見ました。この性質は、巨大な連立方程式を攻略する上で最大の鍵となります。10000 × 10000 の行列を考えてみましょう。もし通常の密行列として扱えば、 $10^8$  個 (1 億個) の数値をメモリ上に保持し、計算に使う必要があります。しかし、もし非ゼロ要素が全体の 0.1% しかなければ、その数はわずか 10 万個です。

## 疎行列攻略の基本戦略

疎行列計算の基本戦略は、膨大な数の「ゼロ」をいかにして無視するかに尽きます。ゼロを保存せず、ゼロとの計算をスキップすることで、メモリ使用量と計算時間を劇的に削減します。

この戦略を実現するため、非ゼロ要素だけを効率的に格納するための、特殊なデータ構造が考案されています。

### 定義 2.3 : 疎行列の格納形式

通常の 2 次元配列の代わりに、非ゼロ要素の位置と値だけを記録するデータ形式が用いられます。

- **座標形式 (Coordinate Format, COO)**: 最も直感的な形式です。非ゼロ要素の「行インデックス」、「列インデックス」、「値」を、それぞれ別の 3 本の配列に格納します。行列の構築には便利ですが、計算には非効率な場合があります。
- **圧縮行格納形式 (Compressed Sparse Row, CSR)**: 行列計算、特に反復法で中心となる行列とベクトルの積を高速に行うために最適化された形式です。非ゼロ要素の「値」とその「列インデックス」を格納した配列に加え、各行の非ゼロ要素がどこから始まるかを示すポインタ配列を持ちます。

### CSR 形式のイメージ

行列  $\begin{pmatrix} 4 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 4 \end{pmatrix}$  は、CSR 形式では以下のような 3 本の 1 次元配列で表現されます。

- **values**: [4, -1, -1, -1, 4, -1, -1, 4, -1, -1, -1, 4] (非ゼロの値を順番に)
- **indices**: [0, 1, 3, 0, 1, 2, 1, 2, 3, 0, 2, 3] (values に対応する列インデックス)
- **indptr**: [0, 3, 6, 9, 12] (0 行目は values[0] から, 1 行目は values[3] から, ...)

この形式により、メモリ使用量を大幅に削減しつつ、行ごとの計算を効率的に実行できます。

### 疎行列計算の実際 : ライブラリの活用

幸いなことに、これらの複雑なデータ構造や、それに対応する計算アルゴリズムを自前で実装する必要はほとんどありません。

Python の科学技術計算ライブラリ **SciPy** には、`scipy.sparse` という極めて強力な疎行列計算のためのモジュールが含まれています。COO や CSR といった様々な形式で疎行列を作成し、行列とベクトルの積はもちろん、疎行列専用の直接法や反復法のソルバーまで、高度に最適化された機能が提供されています。実践的な計算では、これらのライブラリを使いこなすことが標準的なアプローチとなります。

## 2.4 切り札、共役勾配法 (CG 法) : 対称な問題における高速ソルバー

ヤコビ法やガウス=ザイデル法は、反復法の基本的な考え方を理解する上で重要ですが、大規模な問題に対しては収束が非常に遅いことがあります。疎行列で構成される巨大な連立一次方程式、その中でも特に「対称」かつ「正定値」という性質を持つ問題に対して、切り札として登場するのが共役勾配法 (Conjugate Gradient Method, CG 法) です。

### CG 法の直感的イメージ : 賢い下山ルート

単純な反復法 (最急降下法など) が、常に谷の最も急な方向へ下ろうとして、結果的に非効率なジグザグのルートを辿ってしまうことがあるのに対し、CG 法はより賢い登山家のようなものです。

一度進んだ方向の情報を記憶し、次の一步はその方向とは「共役 (A に関して直交)」な、以前の努力を無駄にしない方向を選んで進みます。これにより、ジグザグの動きを劇的に抑制し、谷底 (真の解) へと遥かに速く、そして短い道のりでたどり着くことができます。

### 定義 2.4 : 共役勾配法 (CG 法)

方程式  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$  の係数行列  $\mathbf{A}$  が対称 ( $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$ ) かつ正定値 ( $\mathbf{x}^T \mathbf{Ax} > 0$ ) である場合に適用可能な、非常に高速な反復解法です。

CG 法の際立った特徴:

- 反復法でありながら、丸め誤差がなければ、N 次元の問題に対して高々 N 回の反復で厳密解に到達することが保証されています。
- 実際には、N よりずっと少ない反復回数で、実用上十分な精度の解が極めて高速に得られます。

アルゴリズムは、残差ベクトル  $\mathbf{r} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}$  を、毎回行列  $\mathbf{A}$  に対して共役な探索方向ベクトル  $\mathbf{p}$  を用いて効率的に小さくしていく、という操作を繰り返します。

### CG 法の立ち位置 : 反復法の王様

CG 法は、その驚異的な収束性能と適応範囲の広さから、「反復解法の王様」とも呼ばれることがあります。

物理シミュレーションの世界では、ポテンシャル問題や弾性問題など、対称正定値行列が現れる場面は非常に多くあります。そのような場面に遭遇した場合、共役勾配法 (CG 法) が第一選択肢となります。反復法の手軽さ (疎行列との相性の良さ) と、直接法のような確実性 (有限回での収束保証) を兼ね備えた、極めて強力な信頼性の高いソルバーなのです。

### 対称でない問題への拡張

CG 法そのものは対称な問題にしか適用できませんが、その成功を元に、対称でない行列に対して適用可能な様々な派生手法が開発されています。BiCG (Bi-Conjugate Gradient) 法や GMRES (Generalized Minimal RESidual) 法などがその代表例であり、現代の様々な科学技術計算を支えています。

### 3 フーリエ解析 - 安定性解析の万能ツール

これまでの章で、我々は数値計算の根幹をなす「離散化」と、その応用先である「線形代数」という二つの柱を見てきました。本章では、これまでとは少し毛色の違う、しかし数値解法の性質を深く理解するために不可欠な万能ツール、フーリエ解析を導入します。

フーリエ解析は信号処理や画像解析で有名ですが、数値計算の世界では、特に解法の安定性を解析するための、最も強力な武器として登場します。その核心は、複雑な形状を持つ関数（例えば、計算誤差の空間分布）を、単純な波（サイン波・コサイン波）の重ね合わせとして分解するというアイデアにあります。

#### 3.1 周期現象とフーリエ級数

##### フーリエ級数の基本思想

「どんなに複雑な周期関数も、実は単純な波のオーケストラである」。これがフーリエ級数の基本思想です。周期  $2L$  を持つ「まともな」関数  $f(x)$  は、基本周波数の整数倍の周波数を持つサイン波とコサイン波の無限和として、一意に表現することができます。

このアイデアは、次の数式で具体的に表現されます。

##### 定義 3.1 : フーリエ級数展開

周期  $2L$  を持つ関数  $f(x)$  のフーリエ級数は、以下のように定義されます。

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \left( a_n \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) + b_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \right)$$

ここで、係数  $a_n, b_n$  は、関数  $f(x)$  と各々の波の成分との「重なり」を積分によって計算したものです。

$$a_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$
$$b_n = \frac{1}{L} \int_{-L}^L f(x) \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

##### 複素指数関数による表現

物理学や安定性解析の文脈では、オイラーの公式  $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$  を用いて、フーリエ級数を複素指数関数で表現すると見通しが格段に良くなります。周期  $2\pi$  の関数（ブリルアンゾーンを念頭に置くと便利です）は、次のように極めてシンプルに書くことができます。

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k e^{ikx}$$

ここで、整数  $k$  は波数 (wavenumber) と呼ばれ、波の空間的な振動数を表します。各波数モードの複素振幅  $c_k$  が、その波がどれくらいの強さで含まれているかを示します。

では、なぜこれが安定性解析に繋がるのでしょうか。私たちが微分方程式を差分化して解くとき、計算誤差もまた、計算格子点上で定義された周期関数と見なすことができます。フーリエ解析を用いることで、この誤差を様々な波長の波 (エラーモード) に分解し、各々の波が時間ステップを一つ進めるごとに、その振幅を増大させるのか、それとも減衰させるのかを追跡することができるのです。もし、一つでも振幅が増大するモードが存在すれば、その解法は不安定であると結論できます。

この考え方こそが、次節で学ぶフォン・ノイマンの安定性解析の心髄なのです。

### 3.2 フォン・ノイマン安定性解析：差分スキームの安定性を”見る”方法

前節で、周期関数を単純な波の重ね合わせに分解するフーリエ解析を導入しました。この道具が、差分法の安定性を解析する上で絶大な威力を発揮します。フォン・ノイマンの安定性解析とは、計算誤差をフーリエ級数に分解し、各々の波の成分 (エラーモード) が時間とともに増大しないか、一つ一つチェックしていく手法です。

#### フォン・ノイマン安定性解析の考え方

1. 誤差を波に分解する: ある時刻の計算格子点上の誤差分布を、様々な波数  $k$  を持つ波  $e^{ikx}$  の重ね合わせ (フーリエ級数) として表現します。
2. 一つの波の運命を追う: 解析したい差分スキームが線形であれば、それぞれの波は独立に時間発展します。そこで、代表として一つの波 (エラーモード)  $E_j^n \sim \xi^n e^{ikx_j}$  が、1 ステップ時間発展した後にどうなるかを追跡します。
3. 増幅率を求める: 差分方程式にこのエラーモードを代入し、振幅が1ステップで何倍になるか、すなわち増幅率 (Amplification Factor)  $\xi$  を波数  $k$  の関数として求めます。
4. 安定性の判定: もし、全ての波数  $k$  に対して、増幅率の絶対値が1以下 ( $|\xi(k)| \leq 1$ ) であれば、どのエラーモードも時間とともに増大することはありません。このとき、その差分スキームは安定であると判断します。

この解析の威力を、具体的な例で見てください。

#### 計算例：FTCS スキームのフォン・ノイマン解析

最も基本的な波動方程式の一つである、1次元線形移流方程式  $\frac{\partial u}{\partial t} + v \frac{\partial u}{\partial x} = 0$  を考えます。これを時間前進・空間中心差分 (FTCS) で離散化すると、

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + v \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0$$

となります。このスキームの誤差  $E_j^n = \xi^n e^{ikj\Delta x}$  にも同じ関係が成り立つと仮定して代入し、共通因子を消去すると、

$$\frac{\xi - 1}{\Delta t} + v \frac{e^{ik\Delta x} - e^{-ik\Delta x}}{2\Delta x} = 0$$

オイラーの公式を用いて整理すると、増幅率  $\xi$  が求まります。

$$\xi = 1 - i \frac{v\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x)$$

この増幅率の絶対値の2乗は  $|\xi|^2 = 1^2 + \left(\frac{v\Delta t}{\Delta x} \sin(k\Delta x)\right)^2$  となります。sin の項がゼロでない限り、これは常に1より大きくなります ( $|\xi| > 1$ )。

結論: FTCS スキームは、移流方程式に対しては無条件に不安定であり、実用的な計算には使えないことがわかります。

### 安定なスキームと CFL 条件

一方で、同じ移流方程式に対して、風上差分と呼ばれる別のスキームを用いると、その増幅率は  $|\xi| \leq 1$  という安定条件が、有名な **CFL 条件** (クーラン・フリードリヒス・レヴィ条件)

$$\frac{v\Delta t}{\Delta x} \leq 1$$

を満たす場合にのみ成立することが示されます。これは、1ステップの時間内に情報(波)が格子幅の距離以上を進んではならない、という物理的な要請に対応しています。

このように、フォン・ノイマン安定性解析は、ある差分スキームが安定か不安定か、そして安定であるならばどのような条件を満たすべきかを、明確に示してくれる極めて強力なツールなのです。

## 3.3 スペクトル法への誘い：超高精度計算の世界

これまで学んできた有限差分法は、テイラー展開に基づき、各格子点の「局所的」な情報から微分を近似するものでした。その精度は、刻み幅  $h$  のべき乗 ( $O(h^p)$ ) で向上していきました。

本節で紹介するスペクトル法 (**Spectral Method**) は、これとは全く異なる哲学に基づいています。局所的な近似ではなく、求めたい関数を領域全体の滑らかな基底関数(例えば、領域全体に広がるサイン波)の重ね合わせで表現し、その展開係数を未知数として解く「大域的」なアプローチを取ります。

### スペクトル法の核心：なぜ「超高精度」なのか？

スペクトル法が「超高精度」と呼ばれる理由は、その誤差の減少速度にあります。

求めたい解が滑らかな関数である場合、有限差分法の誤差が  $h^p$  のように多項式的にしか減

少しないのに対し、スペクトル法の誤差は基底関数の数を  $N$  として  $e^{-cN}$  のように指数関数的に減少します。これは「スペクトル精度」と呼ばれ、他の手法とは比較にならないほどの速さで誤差が小さくなることを意味します。

この手法のイメージを掴むため、周期的な問題で最もよく使われるフーリエスペクトル法を見てみましょう。

### フーリエスペクトル法の考え方

周期的な領域上の関数  $u(x, t)$  を、フーリエ級数を用いて、時間依存する係数  $\hat{u}_k(t)$  と空間の波  $e^{ikx}$  の積の和として表現します。

$$u(x, t) = \sum_k \hat{u}_k(t) e^{ikx}$$

この表現の最大の利点は、空間微分が単なる掛け算に変わる点です。

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} &\xrightarrow{\text{フーリエ変換}} ik\hat{u}_k(t) \\ \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} &\xrightarrow{\text{フーリエ変換}} (ik)^2\hat{u}_k = -k^2\hat{u}_k \end{aligned}$$

この性質を利用すると、元の偏微分方程式 (PDE) は、フーリエ係数  $\hat{u}_k(t)$  に関する、ただの連立常微分方程式 (ODE) へと変換されます。複雑な空間微分の問題を、各波数モード  $k$  ごとの独立した時間発展の問題に帰着させることができるのです。

### スペクトル法の長所と短所

- 長所: 滑らかな解に対して、非常に少ない自由度 (波数モードの数) で極めて高い精度を達成できます。流体力学における乱流の直接シミュレーションや、全球規模の気象予測など、高い精度が要求される分野で主役となります。
- 短所:
  - フーリエスペクトル法は、周期境界条件を持つ問題にしか直接適用できません (非周期的な問題には、チェビシェフ多項式など別の基底関数を用います)。
  - 複雑な形状の領域を扱うのが苦手です。
  - 衝撃波のような不連続な解に対しては、ギブス現象と呼ばれる偽の振動が現れ、精度が著しく悪化します。

スペクトル法は万能薬ではありませんが、「適材適所」で用いることで、他の追随を許さない圧倒的な計算精度と効率を発揮する、強力な切り札なのです。

## 第 II 部

# 常微分方程式 (ODE) 編 - 時間発展を追いかける

## 4 初期値問題 (IVP) - 基本の「き」

### 4.1 問題の見分け方：時刻 $t = 0$ の状態から未来を予測する問題

ここからはいよいよ、具体的な微分方程式の種類ごとに、最適な数値解法を探る旅に出ます。しかし、闇雲に手法を試す前に、まず我々が解こうとしている問題がどのような性質を持つのかを正確に見極めることが、何よりも重要です。

本章で扱うのは、数ある微分方程式の問題の中で最も基本的かつ頻繁に登場する「初期値問題 (Initial Value Problem, IVP)」です。その名の通り、ある「初期状態」から出発して、その後の時間発展を追いかける問題の総称です。

#### 定義 4.1：常微分方程式の初期値問題 (IVP)

常微分方程式の初期値問題は、以下の二つの要素で構成されます。

1. 時間発展のルール (常微分方程式)：状態量  $y(t)$  が、時刻  $t$  とその時の状態  $y(t)$  自身に依存して、どのように変化するかを記述する方程式です。一般に次のように書かれます。

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t))$$

2. 出発点 (初期条件)：ある特定の時刻  $t_0$  (多くの場合  $t_0 = 0$ ) における状態が、確定した値  $y_0$  であることを指定します。

$$y(t_0) = y_0$$

この二つの情報をもとに、任意の未来の時刻  $t > t_0$  における状態  $y(t)$  を求めるのが、初期値問題の目的です。

#### 初期値問題 (IVP) の見分け方 Checklist ☒

あなたの目の前の問題が初期値問題 (IVP) かどうかは、以下の点で判断できます。

- 時間とともに変化する現象を扱っていますか？ ( $dy/dt$  のような時間微分の項があるか?)
- 系の状態が、ある一瞬の時刻 (通常は開始時刻) でのみ指定されていますか?
- 目的は、その初期状態から出発して、未来の状態を予測することですか?
- 未来の時刻における条件 (例: 「10 秒後にこの位置に到達せよ」など) は課せられて

いませんか？

これらの問いに全て「はい」と答えられるなら、それは初期値問題です。

### IVP の典型例

私たちの身の回りや科学の世界は、初期値問題であふれています。

- 物体の放物運動: 初速と初期位置を与え、空気抵抗を考慮しながら未来の軌道を計算する。
- 放射性物質の崩壊: ある時点での原子の個数から、未来の任意の時刻での残量を計算する。
- 化学反応: 反応開始時の各物質の濃度から、その後の濃度変化を追跡する。
- 人口モデル: ある年の人口を初期値として、その後の人口推移を予測する。

これらの問題はすべて、「ある一瞬の状態」を元に、時間発展の法則に従って「未来を予測する」という IVP の構造を持っています。

## 4.2 解法図鑑：Runge-Kutta ファミリー

初期値問題を解くための陽解法の中で、最も有名で強力な一族がルンゲ=クッタ (**Runge-Kutta**) 法です。その基本思想は、単純なオイラー法がステップ開始点の勾配しか見ないのに対し、ステップ区間内の複数の中間点でも勾配を評価し、それらを賢く平均することで精度を劇的に向上させる、というものです。

### 4.2.1 オイラー法：教育用と侮るなかれ、全ての基礎

#### 定義 4.2：オイラー法 (Euler Method / RK1)

最もシンプルなルンゲ=クッタ法 (1 次のルンゲ=クッタ法、RK1) です。時刻  $t_n$  での勾配  $f(t_n, y_n)$  を用いて、時刻  $t_{n+1}$  までまっすぐ進みます。

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot f(t_n, y_n)$$

精度:  $O(h)$  (1 次精度)。

長所: 非常にシンプルで、全ての数値解法の conceptual な基礎となります。

短所: 精度が低く、実用的な計算でそのまま使われることは稀です。

#### 4.2.2 ホイン法：オイラー法を改良する最初のステップ

##### 定義 4.3：ホイン法 (Heun's Method / RK2)

オイラー法を改良する最初のステップとして、2次の精度を持つルンゲ=クッタ法 (RK2) の一種を紹介します。これは予測子・修正子法とも呼ばれます。

1. 予測子 (**Predictor**): まずオイラー法で仮の終点  $\tilde{y}_{n+1}$  を予測します。

$$\tilde{y}_{n+1} = y_n + h \cdot f(t_n, y_n)$$

2. 修正子 (**Corrector**): 次に、始点と仮の終点での勾配を平均し、それを使って最終的な  $y_{n+1}$  を計算し直します。

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2} (f(t_n, y_n) + f(t_{n+1}, \tilde{y}_{n+1}))$$

精度:  $O(h^2)$  (2次精度)。1ステップで2回関数評価を行います。

#### 4.2.3 4次のルンゲ=クッタ法 (RK4)：迷ったらこれ

##### 定義 4.4：古典的ルンゲ=クッタ法 (RK4)

「ルンゲ=クッタ法」と言えば、通常はこの4次の手法を指します。精度、安定性、実装の手間のバランスが非常に良く、長年にわたり科学技術計算の標準的な手法として愛用されてきました。

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

ここで、 $k_1, k_2, k_3, k_4$  は、区間内の4つの点 (始点、中間点  $x_2$ 、終点) で評価した勾配です。

$$k_1 = f(t_n, y_n)$$

$$k_2 = f(t_n + h/2, y_n + hk_1/2)$$

$$k_3 = f(t_n + h/2, y_n + hk_2/2)$$

$$k_4 = f(t_n + h, y_n + hk_3)$$

精度:  $O(h^4)$  (4次精度)。1ステップで4回関数評価を行います。

#### 4.2.4 埋め込み対 (RK45 など)：誤差を推定し、刻み幅を自動調整する賢い手法

##### 適応的刻み幅制御：埋め込み対のアイデア

古典的な RK4 の弱点は、刻み幅  $h$  が固定である点です。解が滑らかに変化する領域では  $h$  を大きく、急激に変化する領域では  $h$  を小さくできれば、計算は遥かに効率的になります。これを実現するのが埋め込み対 (**Embedded Pair**) を用いた適応的刻み幅制御です。

RKF45 (Runge-Kutta-Fehlberg 4,5) や Dormand-Prince 法が有名です。

仕組み: 1 ステップの計算で、よく似た計算式を用いて 4 次精度の解 ( $y_{n+1}^{(4)}$ ) と 5 次精度の解 ( $y_{n+1}^{(5)}$ ) を同時に算出します。この二つの差  $|y_{n+1}^{(5)} - y_{n+1}^{(4)}|$  が、そのステップの局所打ち切り誤差の良い推定値を与えます。

- この誤差が許容範囲より大きければ、ステップをやり直し ( $h$  を小さくする)。
- 誤差が許容範囲よりずっと小さければ、次のステップでは  $h$  を大きくする。

これにより、精度を保証しながら、計算ステップ数を最小限に抑える賢い計算が可能になります。SciPy などの現代的な数値計算ライブラリの多くは、この適応的な手法を標準ソルバーとして採用しています。

#### 4.2.5 この手法が輝く場面：非スティッフな問題全般。汎用性が求められる場面

##### Runge-Kutta 法が輝く場面

ルンゲ=クッタ法の一族は、非スティッフな常微分方程式の初期値問題を解く際の、極めて汎用的で信頼性の高い選択肢です。

- とりあえず試すなら: まずは古典的な **RK4** を試すのが良いでしょう。多くの中程度の難易度の問題に対して、十分な精度と安定性を提供してくれます。
- 効率と精度を求めるなら: 解の振る舞いが時間とともに大きく変わるような問題や、厳密な精度管理が求められる場合には、適応的刻み幅制御を持つ埋め込み対 (**RKF45** など) が最適です。現代の科学技術計算における標準的なツールと言えます。

陽解法であるため、極端に時間スケールの異なる現象が混在する「スティッフな問題」には不向きですが、それ以外の広範な問題に対して、ルンゲ=クッタ法は最初に試すべき、強力な解法です。

## 5 発展的初期値問題

ルンゲ=クッタ法は、その堅牢性と高い精度から「万能ナイフ」のように多くの問題で活躍します。しかし、全ての道具がそうであるように、万能ナイフが常に最良の選択とは限りません。特定の構造を持つ問題に対しては、より専門的で、遥かに効率的な「専用工具」が存在します。

本節では、ルンゲ=クッタ法とは異なる哲学を持つ、二つの重要な手法ファミリーを探求します。一つは、計算の「歴史」を賢く再利用して効率を高める線形多段階法。もう一つは、物理的な保存則を尊重し、長期的な振る舞いを正確に捉えるシンプレクティック法です。これらの専用工具を使いこなすことで、我々はより高度で挑戦的な問題に取り組むことができるようになります。

### 5.1 解法図鑑：線形多段階法

ルンゲ=クッタ法が一つの時間ステップ  $[t_n, t_{n+1}]$  の内部で複数回勾配を評価し、精度を高める「単段階法」であったのに対し、線形多段階法 (**Linear Multistep Method, LMM**) は全く異なるアプローチを取ります。その核心は、次のステップ  $y_{n+1}$  を計算するために、すでに計算が完了した過去の複数のステップ  $(y_n, y_{n-1}, y_{n-2}, \dots)$  の情報を最大限に活用する、という点にあります。

#### 線形多段階法の基本戦略：補間と外挿

LMM の根底にある数学的なアイデアは、過去の複数の点  $(t_n, f_n), (t_{n-1}, f_{n-1}), \dots$  を通るような補間多項式を考え、その多項式を未来の時刻へと延長（外挿または内挿）して積分することで、次のステップの値を予測するというものです。これにより、ステップごとに何度も関数評価を行うことなく、高い次数を達成します。

#### 5.1.1 アダムス・バッシュフォース法：過去の計算結果を再利用する効率的な陽解法

##### 定義 4.5：アダムス・バッシュフォース法 (Adams-Bashforth Method)

過去の計算結果のみを用いて未来の値を外挿 (extrapolate) する、代表的な陽解法の線形多段階法です。ステップ数を  $p$  とすると、 $p$  個の過去の点を用いて  $p$  次精度を達成します。

例 (低次の公式) :  $(f_k = f(t_k, y_k)$  とする)

- 1 ステップ (オイラー法):  $y_{n+1} = y_n + hf_n$
- 2 ステップ:  $y_{n+1} = y_n + h \left( \frac{3}{2}f_n - \frac{1}{2}f_{n-1} \right)$
- 3 ステップ:  $y_{n+1} = y_n + h \left( \frac{23}{12}f_n - \frac{16}{12}f_{n-1} + \frac{5}{12}f_{n-2} \right)$

長所:  $p$  次精度を達成するために必要な新たな関数評価は、各ステップで  $f(t_n, y_n)$  の 1 回のみです。これは、4 次精度に 4 回の評価が必要な RK4 と比較して、驚異的な効率です。

短所:

- 自己開始不可能:  $p$  ステップ法は、計算開始時に  $p$  個の初期点が必要です。最初の  $p-1$  点は、ルンゲ=クッタ法などの単段階法を用いて別途計算する必要があります。
- 刻み幅の変更が困難: 上記の公式は、過去のステップが全て等しい刻み幅  $h$  で計算されていることを前提としています。途中で  $h$  を変更するのが複雑になります。

### 5.1.2 アダムス・ムルトン法：高精度な陰解法

#### 定義 4.6：アダムス・ムルトン法 (Adams-Moulton Method)

過去の点に加えて、これから求めようとする未来の点  $(t_{n+1}, y_{n+1})$  の情報も用いて内挿 (interpolate) する、代表的な陰解法の線形多段階法です。

例 (低次の公式) :

- 1 ステップ (後退オイラー法):  $y_{n+1} = y_n + hf_{n+1}$
- 2 ステップ:  $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{12}(5f_{n+1} + 8f_n - f_{n-1})$

長所: 同じステップ数の陽解法 (アダムス・バッシュフォース法) に比べて、一般に精度が高く、安定性も格段に優れています。

短所: 陰解法であるため、各ステップで  $y_{n+1}$  を求めるための方程式を解く必要があります。

#### 実践的な解法：予測子修正子法 (Predictor-Corrector Method)

陰解法であるアダムス・ムルトン法を単体で使うのは、方程式を解く手間がかかります。そこで、陽解法と陰解法を組み合わせた予測子修正子法が、実践では広く用いられます。

1. 予測 (**Predict**): まず、陽解法のアダムス・バッシュフォース法を用いて、次のステップの近似値  $\tilde{y}_{n+1}$  を「予測」します。
2. 評価 (**Evaluate**): 予測した値を用いて、未来の勾配  $\tilde{f}_{n+1} = f(t_{n+1}, \tilde{y}_{n+1})$  を計算します。
3. 修正 (**Correct**): この勾配の値を、陰解法のアダムス・ムルトン法の右辺に代入することで、より精度の高い最終的な値  $y_{n+1}$  を「修正」して得ます。

この手法 (PECE 法) は、陰解法の方程式を直接解く手間を回避しつつ、その高い精度と安定性の恩恵を享受できる、非常に効率的なアプローチです。

### 5.1.3 この手法が輝く場面：関数の評価コストが高い問題で、精度を求める場合

#### 線形多段階法が輝く場面

線形多段階法は、微分方程式の右辺の関数  $f(t, y)$  の評価コストが非常に高い場合に、他の追随を許さない性能を発揮します。

シナリオ: 例えば、関数  $f$  の値を 1 回計算するために、大規模な数値積分や複雑な物理モデルのシミュレーションが必要な場合を想像してみてください。このような状況では、計算全体のボトルネックは関数評価の回数そのものになります。

優位性: 4 次精度を達成するために、RK4 はステップごとに 4 回の関数評価を要求します。一方で、4 次のアダムス法に基づく予測子修正子法であれば、ステップごとにわずか 2 回の関数評価で済みます。もし関数評価に 1 時間かかるとすれば、計算時間は文字通り半分になります。

このような理由から、天体力学における精密な軌道計算や、大規模な回路シミュレーションなど、関数評価が律速段階となる高精度計算において、線形多段階法は標準的な選択肢として活躍しています。

## 5.2 解法図鑑：力学系のためのシンプレクティック法

シミュレーションの目的が、ある特定の時刻での値を高い精度で求めることではなく、系の「長期的な振る舞い」を正しく再現することである場合があります。特に、惑星の軌道や分子の運動のように、エネルギーが保存されるべきハミルトン力学系では、この長期的性質が極めて重要です。

#### なぜルンゲ=クッタ法では不十分なのか？

高精度なルンゲ=クッタ法といえども、長時間にわたる計算では、各ステップで生じる微小な打ち切り誤差が蓄積し、エネルギーのような保存量が徐々にずれていく（ドリフトする）現象が避けられません。その結果、シミュレーション上の惑星はエネルギーを得て軌道を外れてしまったり、分子系が非物理的に「加熱」されたりする、という問題が生じます。

このような問題に対し、系の幾何学的な構造そのものを保存するように設計された特別な解法がシンプレクティック法 (**Symplectic Method**) です。これらの手法は、物理系の長期的な安定性と定性的な正しさを保証するために作られた、専門的なツールです。

### 5.2.1 ベルレ積分法：長時間計算でもエネルギー保存性に優れる

#### 定義 4.7：ベルレ積分法 (Verlet Integration)

ニュートンの運動方程式  $m\ddot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{x})$  を解くために開発された、シンプレクティック法の中で最もシンプルで広く使われている手法です。時刻  $t + \Delta t$  と  $t - \Delta t$  でのテイラー展開を組み合わせることで、次のような美しい形式で与えられます。

$$\mathbf{x}_{n+1} = 2\mathbf{x}_n - \mathbf{x}_{n-1} + \frac{\mathbf{F}(\mathbf{x}_n)}{m}(\Delta t)^2$$

際立った特徴：エネルギー保存性：この手法で計算した系のエネルギーは、各時刻で厳密に保存されるわけではありません。しかし、その誤差は時間とともに一方的に増大（または減少）することなく、ある平均値の周りを有界に振動し続けます。これは、ベルレ法が、真のハミルトニアンに極めて近い「影のハミルトニアン」を厳密に保存しているためです。この性質により、何百万ステップもの長時間の計算を行っても、系が非物理的な振る舞いを起こすことはありません。

補足：速度ベルレ法：実用上は、位置と速度を陽に扱う「速度ベルレ法 (Velocity Verlet)」がよく用いられます。これは同等の優れた保存性を持ちつつ、より扱いやすい形式をしています。

### 5.2.2 この手法が輝く場面：惑星の軌道計算、分子動力学シミュレーション

#### シンプレクティック法が輝く場面

シンプレクティック法は、エネルギーなどの保存則が系の本質を決定づける、保守系の長時間シミュレーションにおいて、不可欠な選択肢となります。判断基準は「短期的な精度」よりも「長期的な安定性」です。

代表的な応用分野：

- 天体力学：太陽系の惑星や衛星の軌道を、数百万年から数億年といった天文学的なスケールでシミュレーションする際に標準的に用いられます。軌道が安定であること、エネルギーが保存されること、といった系の定性的な性質を正しく再現することが最優先されるためです。
- 分子動力学 (MD)：タンパク質の構造変化や新材料の物性評価など、無数の原子・分子の集団的な振る舞いを、ナノ秒からマイクロ秒のスケールで追跡します。系全体の温度が勝手に上がったり下がったりしない（＝エネルギーが保存される）ことは、統計力学的に意味のある結果を得るための絶対条件であり、ベルレ法が標準アルゴリズムとして採用されています。

もしあなたの課題が「ミサイルを正確に目標へ着弾させる」ことであれば、高次ルンゲ＝クッタ法が適しています。しかし、課題が「人工衛星を安定した軌道に千年間のせ続ける」

ことであれば、選ぶべきはベルレ法のようなシンプレクティック法なのです。

## 6 スティッフな方程式と境界値問題 (BVP)

これまでの章では、未来の状態が過去の状態のみから決まる、標準的な初期値問題 (IVP) を扱ってきました。しかし、IVP の中には、通常の陽解法 (ルンゲ=クッタ法など) がほとんど機能しなくなる、特殊で厄介な性質を持つ問題クラスが存在します。それが「スティッフな問題」です。

また、問題の種類も初期値問題だけではありません。時刻  $t = 0$  とはるか未来の時刻  $t = T$  の両方で条件が課せられるような「境界値問題」も、物理学や工学では頻繁に登場します。本章では、これらの発展的な問題を見分け、それぞれに適した解法を学ぶことを目的とします。

### 6.1 スティッフ問題の見分け方：現象の時間スケールが極端に異なる場合

「スティッフ (Stiff)」という言葉は、数値解析の文脈では「硬い」や「扱いにくい」といった意味合いで使われます。これは、方程式の見た目が複雑であることとは無関係です。問題の本質は、その方程式が記述する現象の時間スケールの分離にあります。

#### スティッフネスの正体：速い現象と遅い現象の同居

スティッフな問題とは、一つのシステムの中に、非常に速く減衰して消えていく「過渡的な現象」と、我々が本当に知りたい「ゆっくりとした現象」が同居している問題です。陽解法は、その安定性を保つために、このシステム内で最も速い現象の時間スケールに合わせて、極めて小さな時間刻み幅  $h$  を取ることを強制されます。その結果、本当に見たいゆっくりとした現象を追いかけるために、天文学的な回数のステップが必要となり、計算が事実上不可能になってしまうのです。

#### スティッフネスの直感的イメージ：ロケットと亀のレース

亀のレースをシミュレーションしたいとしましょう。しかし、そのコースの上空をロケットが超高速で飛び交っているとします。

- 本当に知りたい現象 (遅いスケール)：亀がゴールするまでの動き。数時間スケールの話です。
- 邪魔な現象 (速いスケール)：ロケットの運動。数秒、あるいはミリ秒スケールの話です。

陽解法でこの系をシミュレーションしようとする、ロケットの動きを正確に (そして安定に) 捉えるために、時間刻みをミリ秒単位にしなければなりません。亀の数時間のレースをミリ秒刻みで計算するのは、途方もない無駄です。スティッフな問題とは、まさにこのような状況を指します。

### 定義 5.1 : スティッフネスの定量的評価

より数学的には、スティッフネスは系のヤコビ行列  $J = \partial f / \partial y$  の固有値  $\lambda_i$  によって特徴づけられます。

ある系がスティッフであるとは、

1. 全ての固有値の実部が負であるか、非常に小さい。
2. 固有値の絶対値の最大値と最小値の比（スティッフネス比）が、非常に大きい ( $\gg 1$ )。

$$\frac{\max_i |\lambda_i|}{\min_i |\lambda_i|} \gg 1$$

が成り立つ場合を指します。絶対値の大きな固有値が「速い現象」に、小さな固有値が「遅い現象」に対応します。

### スティッフ問題の見分け方

あなたの問題がスティッフかどうかは、以下の点で推測できます。

- 化学反応: 反応速度が桁違いに異なる複数の素反応が混在していませんか？（例：燃焼と拡散）これはスティッフ問題の典型例です。
- 制御系: 非常に速く応答する制御回路と、ゆっくり動く機械部分が組み合わさっていませんか？
- 計算の挙動: 陽解法（例：RK45）で計算したとき、解自体は滑らかに変化しているように見えるのに、ソルバーが異常に小さな時間刻み幅を刻み、計算が全く進まなくなることはありませんか？ これはスティッフネスの最も強力な兆候です。

これらの問いに一つでも当てはまる場合、あなたの問題はスティッフである可能性が濃厚です。その場合、陽解法に見切りをつけ、次節以降で学ぶスティッフ問題専用のソルバー（陰解法など）に切り替えるべきです。

## 6.2 解法図鑑：スティッフ問題用ソルバー

前節で、スティッフな問題に対して陽解法が無力であることを学びました。その絶望的な安定性限界を克服するために設計されたのが、スティッフ問題専用のソルバー、すなわち陰解法の仲間たちです。

これらの手法は、1ステップあたりの計算コストが高いという代償を払う代わりに、陽解法とは比較にならないほどの優れた安定性を手に入れています。これにより、問題の速い時間スケールに縛られることなく、我々が知りたい遅い現象の時間スケールに合わせた、大きな時間刻み幅  $h$  での計算が可能になります。

### 6.2.1 後退オイラー法：最もシンプルな陰解法。安定性は抜群

#### 定義 5.2：後退オイラー法 (Backward Euler Method)

陽解法のオイラー法がステップの「始点」の勾配を用いたのに対し、後退オイラー法はステップの「終点」の勾配を用いる、最もシンプルな陰解法です。

$$y_{n+1} = y_n + h \cdot f(t_{n+1}, y_{n+1})$$

際立った特徴 (**L-安定性**)：後退オイラー法は、非常に強力な **L-安定性** という性質を持ちます。これは、系の速い過渡的な現象 (スティッフネスの原因) を、たった 1 ステップでほぼ完全に減衰させてしまう、理想的な安定性です。どんなにスティッフな問題に対しても、時間刻み幅  $h$  の大きさを問わず、計算が破綻することはありません。

長所: 抜群の安定性。陰解法の中で最も構造がシンプルです。

短所: 精度が  $O(h)$  (1 次精度) と低いため、高い精度を得るには  $h$  をある程度小さくする必要があります。

### 6.2.2 後退差分公式 (BDF)：スティッフ問題の標準装備

#### 定義 5.3：後退差分公式 (Backward Differentiation Formulas, BDF)

線形多段階法の一族であり、スティッフ問題の標準解法として広く採用されている強力な陰解法です。アダムス法が過去の勾配  $f$  を用いて値を「積分」したのに対し、BDF は過去の値  $y_n, y_{n-1}, \dots$  を用いて未来の「微分」 $y'_{n+1}$  を近似し、それを  $f_{n+1}$  と等しいと置きます。  
例 (低次の公式)：

- **BDF1** (後退オイラー法):  $\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = f(t_{n+1}, y_{n+1})$
- **BDF2**:  $\frac{3y_{n+1} - 4y_n + y_{n-1}}{2h} = f(t_{n+1}, y_{n+1})$

特徴: BDF 法は、高次の精度と、スティッフな問題に不可欠な優れた安定性を両立しています。特に、非常に速く振動する成分を効果的に抑制する能力に長けています。

### 6.2.3 この手法が輝く場面：化学反応の計算など、硬い方程式に

#### スティッフ問題用ソルバーが輝く場面

経験則: もしあなたの問題がスティッフであると判明したならば、陽解法でなんとかしようとする試みは諦め、直ちにスティッフソルバーに切り替えるべきです。

代表的な応用分野:

- 化学反応・燃焼シミュレーション: 複数の化学物質が、桁違いに異なる反応速度 (例: マイクロ秒で終わる反応と、数分続く反応) で相互作用する系は、スティッフ問題の

典型です。生成物のゆっくりとした時間変化を追跡するためには、スティッフソルバーが不可欠です。

- 電子回路シミュレーション: 回路内のコンデンサやトランジスタなどが持つ、時定数が大きく異なる多数の素子からなる系。
- 生物学モデル: 酵素反応や代謝ネットワークなど、速いプロセスと遅いプロセスが共存する生命現象のモデリング。

手法の選択:

- とにかく頑健な解が欲しい、精度はそこまで重要でない場合は、最も安定な後退オイラー法が適しています。
- 高い精度と効率が求められる一般的なスティッフ問題に対しては、**BDF** 法が標準的な選択肢です。MATLAB の `ode15s` や SciPy の `solve_ivp(method='BDF')` など、多くのプロフェッショナルな数値計算ライブラリには、この BDF 法（またはその亜種）が「スティッフ問題の標準装備」として組み込まれています。

### 6.3 境界値問題の見分け方：両端が固定された弦のたわみなど

初期値問題 (IVP) が、ある一点の初期状態から未来へと時間発展を追いかける「行進」の問題だったのに対し、境界値問題 (**Boundary Value Problem, BVP**) は全く異なる性質を持ちます。これは、時間発展ではなく、ある区間の両端の状態が指定され、その「中間」の状態を決定する問題です。

#### 初期値問題 vs 境界値問題

- 初期値問題 (**IVP**): 大砲を発射する問題に似ています。発射地点での位置と角度（初期条件）が分かれば、その後の弾道が決まります。条件は一箇所に集中しています。
- 境界値問題 (**BVP**): 2本の柱の間にロープを張る問題に似ています。ロープの両端を固定する位置（境界条件）が決まれば、ロープが描く曲線（たわみ）の形が決まります。条件が複数箇所に分かれています。

この違いは、問題の定式化に明確に現れます。

#### 定義 5.4：常微分方程式の境界値問題 (BVP)

(2 階の) 常微分方程式の境界値問題は、一般に以下の二つの要素で構成されます。

1. 区間内で成り立つ方程式 (常微分方程式) : 多くの場合、独立変数は時間  $t$  ではなく、空間座標  $x$  となります。区間  $x \in [a, b]$  で成り立つ方程式が与えられます。

$$y''(x) = f(x, y(x), y'(x))$$

2. 複数点での条件（境界条件）：解が満たすべき条件が、区間の端点である  $x = a$  と  $x = b$  の両方、あるいは複数点で指定されます。

$$\text{例: } y(a) = y_A \quad \text{かつ} \quad y(b) = y_B$$

IVP のように単純に一方の端から計算を始めることができないため、全く異なるアプローチが必要となります。

### 境界値問題 (BVP) の見分け方 Checklist

あなたの問題が境界値問題 (BVP) かどうかは、以下の点で判断できます。

- 時間発展ではなく、空間的な分布や定常状態を扱っていますか？（独立変数が  $x, r$  など）
- 解が満たすべき条件が、**2 点以上**の異なる場所で指定されていませんか？（例：「 $x = 0$  で  $y = 0$ 」かつ「 $x = L$  で  $y = 0$ 」）
- 目的は、それらの境界点に挟まれた区間内部の解を求めることですか？

これらの問いに当てはまるなら、それは境界値問題です。

### BVP の典型例

境界値問題は、物理学や工学における定常状態の解析で頻繁に現れます。

- 弦のたわみ: 両端を固定された弦に重力がかかったとき、どのような形になるか。
- 熱伝導の定常状態: 両端の温度が一定に保たれている金属棒の、内部の温度分布。
- 構造力学: 橋や梁など、両端が支持された構造物にかかる力と変形の関係。
- 量子力学: 井戸型ポテンシャル中の粒子の定常状態（固有状態）。波動関数が境界でゼロになるという条件から、許されるエネルギー準位が決定されます。

## 6.4 解法図鑑：境界値問題

境界値問題 (BVP) は、初期値問題 (IVP) のように一方の端から計算を開始することができません。そのため、全く異なる戦略が必要となります。ここでは、その代表的な二つのアプローチ、「射撃法」と「有限差分法」を紹介します。

#### 6.4.1 射撃法：初期値問題に帰着させて解く直感的な方法

##### 定義 5.5：射撃法 (Shooting Method)

射撃法は、境界値問題を、試行錯誤を通じて初期値問題へと帰着させる、非常に直感的で巧妙な手法です。

アルゴリズムの考え方：大砲で遠くの的を狙うアナロジーで考えることができます。

1. 目標設定： 的の位置は、区間の終点での境界条件  $y(b) = y_B$  に相当します。
2. 発射角度を推測： 我々は始点  $y(a) = y_A$  は知っていますが、そこからどの「角度」で撃ち出せば良いか、すなわち初期勾配  $y'(a)$  を知りません。そこで、この初期勾配の値をまず推測 (guess) します。
3. 発射 (IVP を解く)： 始点での値  $y(a)$  と推測した勾配  $y'(a)$  が揃えば、これは完全な初期値問題となります。この IVP を、ルンゲ=クッタ法などの信頼できるソルバーで区間の終点  $x = b$  まで解きます。
4. 着弾点の確認と調整： 計算結果として得られた終点での値と、本来の目標である境界条件  $y(b) = y_B$  との「誤差」を評価します。誤差がゼロになるまで、初期勾配の推測値を賢く (二分法やセカント法などの求根アルゴリズムを用いて) 更新し、何度も「射撃」を繰り返します。

長所： IVP ソルバーを再利用できるため、考え方が分かりやすいです。非線形な BVP にも比較的容易に適用できます。

短所： 解が初期値に非常に敏感な問題 (スティッフ問題に似た性質を持つ問題) では、初期勾配のわずかな違いで解が発散してしまい、収束しないことがあります。

#### 6.4.2 有限差分法：領域全体を連立一次方程式で一網打尽にする方法

##### 定義 5.6：有限差分法 (Finite Difference Method)

有限差分法は、射撃法とは対照的に、領域全体を一度に解くアプローチです。微分方程式を離散化することで、BVP を巨大な連立一次方程式の問題に変換します。

アルゴリズムの考え方：

1. 格子を引く： まず、解析したい区間  $[a, b]$  を、多数の格子点  $x_0, x_1, \dots, x_N$  に分割します。
2. 微分を差分に置き換える： 次に、各々の内部格子点  $x_i$  ( $i = 1, \dots, N - 1$ ) において、微分方程式に現れる微分項 ( $y''$  や  $y'$ ) を、中心差分などの差分公式で置き換えます。
3. 連立方程式を立てる： この操作により、各格子点での未知数  $y_i$  の間の代数的な関係式が得られます。これを全ての内部格子点について立てることで、未知数  $y_1, \dots, y_{N-1}$  に関する巨大な連立一次方程式  $\mathbf{A}\mathbf{y} = \mathbf{b}$  が出来上がります。境界条件  $y_0, y_N$  は既知

の値として、方程式の右辺  $\mathbf{b}$  に組み込まれます。

4. 一気に解く: 最後に、この連立一次方程式を、前章で学んだ線形代数のソルバー (LU 分解や、行列が疎であれば共役勾配法など) を用いて一気に解くことで、全ての格子点上の解を同時に求めます。

長所: 線形な BVP に対しては、一度の計算で直接解が得られるため、非常に頑健で信頼性が高いです。

短所: 非線形な BVP に適用すると、得られる代数方程式も非線形となり、その求解にはニュートン法などのより高度な反復解法が必要になります。

### 射撃法と有限差分法の使い分け

- 射撃法: まず手軽に試したい場合や、手元に高性能な IVP ソルバーがある場合に有効です。非線形性にも強いですが、収束しないリスクも念頭に置く必要があります。
- 有限差分法: より頑健な解法が求められる場合、特に線形の問題に対しては、非常に強力で信頼性の高い選択肢です。大規模な問題では、疎行列ソルバーの知識が鍵となります。

## 第 III 部

# 偏微分方程式 (PDE) 編 - 場と現象を捉える

これまでの部では、独立変数が時間  $t$  の一つだけであった常微分方程式 (ODE) の世界を探求してきました。しかし、物理現象の多くは、時間だけでなく、空間的な広がりの中で変化します。熱がどのように伝わり、波がどのように伝播し、物質がどのように変形するのか——これらの現象を記述するのが、複数の独立変数 (例:  $t, x, y, z$ ) を持つ偏微分方程式 (**Partial Differential Equation, PDE**) です。

PDE の数値計算は、ODE に比べて格段に複雑さと豊かさを増します。その核心は、空間をどのように離散化 (メッシュ化) するかにあります。本章では、そのための三大アプローチ、「有限差分法 (FDM)」 「有限体積法 (FVM)」 「有限要素法 (FEM)」 それぞれの哲学と特徴を見ていきます。

## 7 三大離散化手法 - それぞれの哲学

### 7.1 有限差分法 (FDM) : シンプルで直交格子に強い

有限差分法の哲学 : 微分を、そのまま差分に置き換える

有限差分法 (**Finite Difference Method, FDM**) は、三大手法の中で最も歴史が古く、そして最も直感的で分かりやすいアプローチです。その哲学は極めてシンプルで、偏微分方程式に現れる偏微分演算子  $\partial/\partial x, \partial^2/\partial y^2$  などを、これまで学んできた差分公式でそのまま置き換える、というものです。

FDM による数値計算は、主に三つのステップで進められます。

有限差分法 (FDM) の手順

1. 格子の生成: まず、計算したい物理的な空間を、碁盤の目のような規則正しい構造格子 (直交格子) で覆います。各々の交点が、未知数を計算すべき格子点となります。
2. 方程式の離散化: 次に、各々の内部格子点  $(i, j)$  において、PDE に登場する全ての偏微分項を、近隣の格子点の値を用いた差分公式で近似します。

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{(i,j)} \approx \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x}$$
$$\left. \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right|_{(i,j)} \approx \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{(\Delta y)^2}$$

3. 連立方程式の構築と求解: この操作を全ての内部格子点で行うと、未知数である格子点上の値  $u_{i,j}$  たちに関する、巨大な連立 (一次) 方程式が得られます。これを線形代数ソルバーで解くことで、全ての点における解を一度に求めます。

### 計算例：2次元ラプラス方程式の離散化

電磁気学や熱伝導で現れる、最も基本的な楕円型 PDE である 2次元ラプラス方程式  $\nabla^2 u = 0$  を考えます。

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$$

これを格子間隔が  $\Delta x = \Delta y = h$  の正方格子上で中心差分を用いて離散化すると、

$$\frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2} + \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{h^2} = 0$$

となり、整理すると非常に美しい関係式が得られます。

$$u_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1}}{4}$$

これは、ある格子点での値が、その上下左右4つの隣人の値の平均値になることを意味しています。FDM の局所的な性質がよく現れています。

### 有限差分法の長所と短所

- 長所:
  - 単純さと直感性: アプローチが直接的であるため、理解しやすく、プログラムとして実装するのも比較的容易です。
  - 構造格子での効率: 格子構造が単純であるため、行列構造も規則的になり、高速なソルバーを適用しやすいです。
- 短所:
  - 複雑な形状への弱さ: FDM 最大の弱点です。自動車や飛行機のような曲線的な境界を持つ領域を、四角い格子で正確に表現するのは非常に困難です（境界がギザギザになってしまいます）。
  - 格子の柔軟性の欠如: 流れが激しい部分だけ格子を細かくする、といった局所的な格子適合が難しいです。

FDM は、その単純さから今でも広く使われる強力な手法ですが、その適用範囲は、長方形や直方体のような、形状が単純な問題にほぼ限定されます。

## 7.2 有限体積法 (FVM) : 流体力学の主役。保存則の扱いに優れる

### 有限体積法の哲学：物理量の「流れ」を厳密に追跡する

有限差分法が微分方程式そのものを近似したのに対し、有限体積法 (**Finite Volume Method, FVM**) は、物理法則のより根源的な形である保存則の積分形から出発します。その哲学は、「ある検査体積 (セル) 内の物理量の時間変化は、その体積の境界を通過する流束 (フラックス) の総和に等しい」という物理的に極めて明快な原理を、離散的なレベル

で厳密に成り立たせることにあります。

この「入りをきっちり計算する」という哲学が、FVM を特に流体力学の分野で主役たらしめている理由です。

### 有限体積法 (FVM) の手順

1. **メッシュ生成:** まず、計算領域を「**検査体積 (Control Volume)**」または「セル」と呼ばれる、互いに重ならない小さな領域に分割します。FDM と異なり、メッシュは三角形や多角形など、非構造的な形状を許容します。
2. **方程式の積分:** 次に、各セル上で保存則を表す PDE を体積積分します。
3. **発散定理の適用:** ガウスの発散定理を用いて、体積積分をセルの境界面上の面積積分へと変換します。これにより、方程式は「セル内の量の時間変化 = 境界面を通過する流束の総和」という形になります。
4. **流束の計算と求解:** 各セルの境界面を通過する流束を、隣接するセルの値から近似的に計算します。この関係式を全てのセルについて立て、得られる巨大な連立方程式を解くことで、各セル内の平均的な物理量を求めます。

### 有限体積法の長所と短所

- **長所:**
  - **厳密な保存性:** セル間の流束のやり取りを直接計算するため、質量、運動量、エネルギーといった物理量の保存が、離散化されたレベルで厳密に保証されます。これは、衝撃波など不連続な現象を扱う流体計算において決定的に重要です。
  - **形状の柔軟性:** 非構造格子も扱えるため、FDM より複雑な形状の問題に対応できます。
- **短所:**
  - **実装の複雑さ:** FDM に比べ、特に非構造格子における流束計算などの実装は複雑になります。
  - **高次精度化:** 高次精度スキームの構築が、FDM や FEM に比べて直感的でない場合があります。

## 7.3 有限要素法 (FEM) : 複雑な形状の扱いはお手の物。構造解析の王道

### 有限要素法の哲学 : 近似解を「最適なピース」で組み立てる

有限要素法 (**Finite Element Method, FEM**) は、前二者とは大きく異なる、より洗練された数学的背景を持つ手法です。その哲学は、真の解を、各々が単純な形状を持つ「要素」の上で定義された、単純な関数 (例えば一次関数や二次関数) を多数つなぎ合わせることで近似するというものです。そして、その近似解が、ある意味で「最も誤差が小さくな

る」ように、各関数の係数を決定します。

このアプローチにより、FEM は特に複雑な形状を持つ問題に対して圧倒的な強みを発揮し、構造解析の分野では標準的な手法としての地位を確立しています。

### 有限要素法 (FEM) の手順

1. 弱形式の導出: まず、元の PDE に「重み関数」を掛けて領域全体で積分し、「弱形式」と呼ばれる積分方程式へと変換します。この操作により、解に要求される滑らかさの条件が緩和されます。
2. メッシュ生成: 計算領域を、三角形 (2次元) や四面体 (3次元) といった、単純な形状の「有限要素」の集まりで分割 (メッシュ化) します。これにより、どんなに複雑な形状でも正確に表現できます。
3. 解の近似: 各要素内で、解を単純な補間関数 (基底関数) の線形結合で近似します。未知数は、要素の頂点 (節点) における解の値  $u_i$  となります。
4. 連立方程式の構築と求解: 近似解を弱形式に代入することで、未知数である節点値  $u_i$  に関する巨大な連立一次方程式  $\mathbf{Ku} = \mathbf{f}$  が得られます。この  $\mathbf{K}$  は構造力学の用語を借りて剛性行列と呼ばれます。これを解くことで、全ての節点上の解が求められます。

### 有限要素法の長所と短所

- 長所:
  - 卓越した形状表現能力: FEM 最大の長所です。三角形や四面体のメッシュを用いることで、自動車のエンジン部品や航空機の翼といった、極めて複雑な工業製品の形状を忠実にモデル化できます。これが構造解析の王道たる所以です。
  - 強固な数学的基礎: 汎関数解析に基づいた厳密な理論背景を持ち、誤差評価などが数学的に保証されています。
- 短所:
  - 実装の複雑さ: 一般に三大手法の中では最も実装が複雑で、専門的な知識が要求されます。
  - 保存則: FVM のように、物理量の保存が自動的に保証されるわけではありません (ただし、保存するように特殊な定式化を施すことは可能です)。

## 8 放物型方程式 - 拡散・熱伝導の世界

ここからは、三大偏微分方程式 (PDE) のうち、時間発展を伴う最初のタイプである放物型方程式 (**Parabolic Equation**) を探求します。このタイプの方程式は、物理学や工学、さらには金融工学に至るまで、極めて広範な分野に現れます。

その振る舞いを一言で表すならば、「拡散」あるいは「散逸」です。熱いものと冷たいものが混ざり合って均一な温度になったり、水に落としたインクが一様に広がったりするような、シャープな特徴が時間とともにぼやけて「なまっていく」現象を記述するのが、この放物型方程式なのです。

### 8.1 問題の見分け方：時間とともに”なまっていく”現象

#### 放物型方程式の代表例：1次元熱伝導（拡散）方程式

ある PDE が放物型かどうかを見分ける最も確実な方法は、その典型例である熱伝導方程式 (**Heat Equation**) と比較することです。

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

この式の構造こそが、放物型方程式の本質を捉えています。

- $u(x, t)$ : 温度や濃度など、空間的に分布し、時間変化する物理量です。
- $\partial u / \partial t$ : 時間に関する **1 階微分**。これが、現象が時間とともに進んでいく「発展」の側面を記述します。
- $\partial^2 u / \partial x^2$ : 空間に関する **2 階微分**。これが「拡散」を引き起こす項です。直感的には、ある点の空間的な曲率（周りとの差）が、その点の時間変化を引き起こすことを意味します。もしある点が周りより冷たければ（下に凸）、その点は温められて温度が上昇します。

#### 放物型方程式の見分け方

あなたの目の前の PDE が放物型かどうかは、以下の特徴で判断できます。

- 時間微分: 時間  $t$  に関する微分が、**1 階微分**のみ含まれていますか？ ( $\partial / \partial t$ )
- 空間微分: 空間  $x$  に関する微分が、**2 階微分**を含んでいますか？ ( $\partial^2 / \partial x^2$ )
- 時間 2 階微分の不在: 時間  $t$  に関する **2 階微分** ( $\partial^2 / \partial t^2$ ) は含まれていないことを確認してください。これがあると、次の章で学ぶ双曲型（波動）方程式になります。
- 物理的直感: その方程式は、何かが「広がり」「混ざり合い」「均一になり」「滑らかになっていく」ような、不可逆な散逸過程を記述していませんか？

## 放物型方程式の仲間たち

同じ数学的構造が、全く異なる分野にも現れます。

- 物質の拡散: インクや汚染物質の広がりを記述するフィックの拡散方程式も、全く同じ形をしています。
- 流体力学: 粘性を持つ流体の速度場の時間発展を記述するナビエ=ストークス方程式も、拡散項を持つため放物型方程式の性質を含んでいます。
- 金融工学: 金融派生商品（オプション）の価格が満たすブラック=ショールズ方程式も、変数変換によって熱伝導方程式に帰着させることができます。

## 8.2 解法図鑑

放物型方程式を数値的に解く際の核心は、時間微分と空間の2階微分をどのように離散化するか、その組み合わせにあります。ここでは、1次元問題における基本的な3つの手法と、多次元問題で必須となる工夫を見ていきましょう。

### 8.2.1 FTCS, BTCS, クランク=ニコルソン法：一次元問題の基本セット

1次元の熱伝導方程式  $\partial u / \partial t = \alpha \cdot \partial^2 u / \partial x^2$  を例に、最も基本的な3つのアプローチを紹介します。空間微分は、いずれも中心差分で近似します。

#### FTCS 法 (Forward-Time Central-Space)

時間微分を前進差分で近似する、最もシンプルな陽解法です。

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}$$

$u_j^{n+1}$  を陽に書き下せるため、1ステップあたりの計算は非常に高速です。しかし、その安定性は非常に悪く、拡散数  $s = \alpha \Delta t / (\Delta x)^2$  が  $s \leq 1/2$  という厳しい条件を満たさない限り、計算は即座に発散します。このため、実用上はほとんど使われません。

#### BTCS 法 (Backward-Time Central-Space)

時間微分を後退差分で近似し、空間微分も未来の時刻  $n+1$  で評価する、最もシンプルな陰解法です。

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \alpha \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2}$$

未来の値  $u^{n+1}$  に関する連立一次方程式（三重対角行列）を各ステップで解く必要がありますが、その代償として無条件安定という極めて優れた安定性を持ちます。時間刻み幅  $\Delta t$  を自由に選べるのが最大の利点です。

## クランク=ニコルソン法 (Crank-Nicolson Method)

時間方向の中心差分 (台形公式) と見なせる、より洗練された陰解法です。空間微分項を現在時刻  $n$  と未来の時刻  $n+1$  で平均して評価します。

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{\alpha}{2} \left( \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} + \frac{u_{j+1}^{n+1} - 2u_j^{n+1} + u_{j-1}^{n+1}}{(\Delta x)^2} \right)$$

BTCS 法と同様に無条件安定でありながら、精度が時間・空間ともに 2 次 ( $O((\Delta t)^2, (\Delta x)^2)$ ) へと向上しています。BTCS 法 (時間 1 次精度) よりも少ないステップ数で高い精度を達成できます。

### 8.2.2 ADI 法 (交互方向陰解法) : 多次元問題の計算コストを劇的に下げる工夫

#### 多次元問題の壁

クランク=ニコルソン法のような陰解法を 2 次元問題にそのまま適用すると、各ステップで解くべき連立一次方程式の行列が、単純な三重対角行列ではなく、より複雑で巨大なブロック三重対角行列となり、計算コストが爆発的に増大するという壁に突き当たります。

#### 定義 6.1 : ADI 法 (Alternating-Direction Implicit Method)

**ADI 法**は、この多次元の壁を回避するための巧妙な「分割統治」戦略です。2 次元問題の場合、1 回の時間ステップを二つの半ステップに分割します。

1. 前半ステップ:  $x$  方向の微分を陰解的に、 $y$  方向の微分を陽解的に扱います。これにより、 $x$  方向の各ラインについて、独立な三重対角方程式を解けばよくなります。
2. 後半ステップ: 次に、 $x$  方向を陽解的に、 $y$  方向を陰解的に扱います。今度は、 $y$  方向の各ラインについて、独立な三重対角方程式を解きます。

この手法により、多次元の陰解法が持つ優れた安定性を保ちつつ、計算コストを「多数の、簡単な 1 次元問題の求解」のレベルにまで劇的に引き下げることができます。

### 8.2.3 この手法が輝く場面 : クランク=ニコルソン法は精度と安定性の両立に。ADI 法は 2 次元以上の問題に

#### 放物型方程式の解法選択

- 1 次元問題の標準解法: クランク=ニコルソン法が第一選択肢です。無条件安定性と時間・空間に関する 2 次精度を両立しており、精度と計算効率のバランスが最も優れています。
- 2 次元・3 次元問題の標準解法: 構造格子上の多次元問題では、**ADI 法**が標準的な選択肢となります。陰解法の安定性を、計算コストを抑えつつ実現するための、確立

された強力な手法です。

## 9 双曲型方程式 - 波動・移流の世界

前の章で探求した放物型方程式が、熱や物質が拡散し、時間とともに「なまっていく」不可逆な現象を記述したのに対し、本章で扱う双曲型方程式 (**Hyperbolic Equation**) は、全く異なる性質を持つ現象を記述します。

そのキーワードは「伝播」です。双曲型方程式が支配する世界では、情報は波 (Wave) として、その形をできるだけ保ったまま、ある一定の速度で空間を伝わっていきます。ギター の弦の振動や、水面に広がる波紋のように、エネルギーが散逸せず、系の中を駆け巡る可逆的な現象を捉えるのが、この双曲型方程式なのです。

### 9.1 問題の見分け方：情報が波として伝播する現象

#### 双曲型方程式の代表例：1次元 波動方程式

ある PDE が双曲型かどうかを見分けるための最も確実な試金石は、その典型例である波動方程式 (**Wave Equation**) と比較することです。

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

この式の構造は、放物型方程式のそれと似ていますが、決定的な違いが一つあります。

- $u(x, t)$ : 弦の変位や音波の圧力など、波の振幅を表す物理量です。
- $\partial^2 u / \partial t^2$ : 時間に関する 2 階微分。これが双曲型方程式を特徴づける最も重要な項です。物理的には「加速度」に対応し、振動現象に不可欠な要素です。
- $\partial^2 u / \partial x^2$ : 空間に関する 2 階微分。弦の張力や媒質の復元力など、波を元に戻そうとする力を表します。
- $c$ : 波の伝播速度です。

#### 双曲型方程式の見分け方 Checklist

あなたの目の前の PDE が双曲型かどうかは、以下の特徴で判断できます。

- 時間 2 階微分: 時間  $t$  に関する微分が、2 階微分 ( $\partial^2 / \partial t^2$ ) の形で現れていますか？これが最も重要な識別点です。
- 物理的直感: その方程式は、何らかの擾乱が形を保ったまま空間を伝わっていく「波」や「振動」の現象を記述していませんか？また、その現象は時間を巻き戻しても成立するような「可逆的な」プロセスですか？

### もう一つの重要な例：移流方程式

1 階の偏微分のみで構成される、次のような移流方程式 (Advection Equation) も、双曲型方程式の仲間と見なされます。

$$\frac{\partial u}{\partial t} + c \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

この方程式の解は  $u(x, t) = f(x - ct)$  となり、初期状態  $f(x)$  が形を全く変えずに、速度  $c$  で移動していく様子を記述します。これは、情報の「伝播」という双曲型の本質を最も純粋な形で体現しており、流体力学における対流項のモデルとして、また、双曲型方程式の数値解法をテストするための基本的な問題として、極めて重要です。

### 双曲型方程式の仲間たち

双曲型の性質は、様々な物理現象の根底に流れています。

- 弦・膜の振動: ギターの弦や太鼓の膜の振動。
- 音響学: 空気中の音波の伝播。
- 電磁気学: 電場と磁場が互いを生成しながら空間を伝播する、光や電波の振る舞い (マクスウェル方程式から波動方程式が導かれます)。
- 流体力学: 粘性を無視した流体の運動を記述するオイラー方程式は、非線形な双曲型方程式の代表例です。

## 9.2 解法図鑑：基礎スキーム

双曲型方程式の数値計算は、放物型方程式に比べて繊細な注意を要します。その目的は、波の形を崩さずに、正しく伝播させることにあります。安易な離散化は、「数値拡散」と呼ばれる、波が人為的に鈍ってしまう現象や、「数値振動」という、物理的に存在しない偽の波 (振動) を生み出す原因となります。

本節では、これらの問題点を浮き彫りにする基本的なスキームを紹介します。

### 9.2.1 中心差分、風上差分：基本だが、数値拡散や振動の問題点も

#### 中心差分法 (FTCS) の罫

移流方程式  $\partial u / \partial t + c \cdot \partial u / \partial x = 0$  に対し、時間も空間も最も素直な差分 (時間前進・空間中心) で離散化する FTCS 法は、フォン・ノイマン安定性解析が示す通り、無条件不安定となります。したがって、この単純な組み合わせは双曲型方程式には使用できません。

### 定義 7.1 : 風上差分法 (Upwind Scheme)

風上差分法は、情報の伝播方向を考慮する、物理的に非常に直感的な手法です。波が伝わってくる「風上」側の情報だけを用いて空間差分を計算します。

波が右向きに伝播する場合 ( $c > 0$ )、空間微分を後退差分で近似します。

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + c \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} = 0$$

長所: CFL 条件  $c\Delta t/\Delta x \leq 1$  の下で安定であり、数値振動を発生させません。

短所: 精度が 1 次 ( $O(\Delta x)$ ) と低く、その誤差は非常に強い数値拡散として現れます。これにより、鋭い波形も計算を進めるうちに鈍ってしまいます。

## 9.2.2 Lax-Friedrichs, Lax-Wendroff : 古典的だが重要な改良スキーム

### 定義 7.2 : Lax-Friedrichs 法

不安定な FTCS 法を安定化するための古典的な手法です。時間発展項の  $u_j^n$  を、その両隣の点の平均値  $\frac{1}{2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n)$  で置き換えます。

$$\frac{u_j^{n+1} - \frac{1}{2}(u_{j+1}^n + u_{j-1}^n)}{\Delta t} + c \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} = 0$$

これにより、人為的に大きな数値拡散項が導入され、計算は安定化されます。しかし、風上差分法と同様に 1 次精度であり、解が著しく鈍るという問題は残ります。

### Lax-Wendroff 法 : 高次精度への挑戦と代償

数値拡散を抑制するために、精度を 2 次にしたのが **Lax-Wendroff** 法です。これは、解の時間発展をテイラー展開し、2 階の時間微分を元の方程式を使って空間の 2 階微分に書き換えることで導出されます。

長所: 2 次精度を持つため、滑らかな波形を非常に正確に伝播させることができ、数値拡散は大幅に抑制されます。

短所: その代償として、衝撃波や矩形波のような不連続な部分の周辺に、激しい数値振動を発生させてしまうという深刻な欠点を持ちます。

### 9.3 解法図鑑：高解像度スキーム

#### 高解像度スキームの哲学：状況に応じて最適な手法を使い分ける

1次精度のスキーム（風上など）は、振動しないが鈍る。2次精度のスキーム（Lax-Wendroff など）は、シャープだが振動する。このジレンマを解決するために生まれたのが、高解像度スキーム (**High-Resolution Scheme**) と総称される現代的な手法群です。

その哲学は、解の様子を局所的に監視し、

- 解が滑らかに変化している領域では、Lax-Wendroff 法のような高次精度スキームを適用して、鈍りを防ぐ。
- 解が急激に変化している（不連続な）領域では、風上差分法のような低次精度で安定なスキームに切り替えて、振動を抑える。

という、適応的な制御を行うことにあります。この切り替えは、流束制限法 (**Flux Limiter**) などの巧妙な仕組みによって自動的に行われます。

#### 現代の標準的な手法

この高解像度スキームの考え方はさらに発展し、**TVD (Total Variation Diminishing)** スキームや、**MUSCL (Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws)** 法、さらに高精度な **WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory)** 法といった、現代の流体シミュレーションで標準的に用いられる手法へと繋がっています。これらの手法は、衝撃波や接触不連続面といった、双曲型方程式に特有の難しい現象を、物理的に正しく、かつ鮮明に捉えることを可能にします。

#### 9.3.1 流束制限法と TVD 条件：衝撃波や不連続面をシャープに捉える技術

##### 定義 7.3：流束制限法 (Flux Limiter)

1次精度（振動しないが鈍る）と高次精度（シャープだが振動する）のスキームを賢く融合させるための仕組みが流束制限法です。数値流束を、低次精度の流束  $F_{low}$  と高次精度への補正項の和として考えます。

$$F = F_{low} + \phi(r) (F_{high} - F_{low})$$

ここで、 $\phi(r)$  が流束制限関数 (**Flux Limiter**) です。この関数は、解の滑らかさの指標  $r$ （隣り合う勾配の比など）に応じて、補正項の大きさを「制限」します。

- 解が滑らかな領域 ( $r \approx 1$ )  $\rightarrow \phi(r) \approx 1$  となり、高次精度が実現される。
- 解が不連続な領域 ( $r$  が 1 から大きく外れる)  $\rightarrow \phi(r) \approx 0$  となり、補正項が抑制され、安定な低次精度スキームに近づく。

### TVD 条件：数値振動を抑えるための数学的保証

「良い」流束制限関数を設計するための数学的な指導原理が **TVD (Total Variation Diminishing)** 条件です。Total Variation とは、解の空間的な振動の総量  $\sum_j |u_{j+1} - u_j|$  を測る指標です。

あるスキームが TVD であるとは、時間発展させてもこの振動の総量が増加しないことを意味します ( $TV(u^{n+1}) \leq TV(u^n)$ )。これは、数値計算によって新たな振動（オーバーシュートなど）が人為的に生み出されることがない、という強力な保証を与えます。

### 9.3.2 MUSCL 法、WENO 法：より高度で高精度な現代的解法

#### MUSCL 法 (Monotone Upstream-centered Schemes for Conservation Laws)

**MUSCL 法**は、流束制限法の考え方を有限体積法へと拡張した、高解像度スキームの草分け的存在です。

1 次精度の手法がセル内の物理量を一定（平坦）と見なすのに対し、MUSCL 法では、隣接セルの情報を用いて各セル内の物理量分布を線形（傾きを持つ）に再構成 (**Reconstruction**) します。これにより、セル境界での流束をより正確に見積もり、全体の精度を 2 次以上に向上させます。もちろん、不連続面で振動が起きないように、再構成された勾配には流束制限法と同様の制限がかけられます。

#### WENO 法 (Weighted Essentially Non-Oscillatory)

**WENO 法**は、TVD 条件よりもさらに高度な考え方にに基づき、極めて高い精度（5 次以上も可能）と衝撃波での安定性を両立する、現代の標準的な高解像度スキームの一つです。

その核心は、解の補間に用いる「候補となる領域（ステンシル）」を複数用意し、それぞれの領域の滑らかさに応じて「重み」を変えることにあります。解が滑らかな領域では、全ての候補をバランス良く用いて高次精度を達成します。一方、衝撃波の近傍では、衝撃波を跨いでしまう「滑らかでない領域」の重みをほぼゼロにし、滑らかな領域の情報だけを用いて補間を行います。これにより、衝撃波の存在を賢く検知し、その影響を回避することで、振動のない高精度な計算を実現します。

### 9.3.3 この手法が輝く場面：衝撃波を含む流体計算、航空宇宙工学

#### 高解像度スキームが輝く場面

これらの高解像度スキームは、衝撃波や接触不連続面といった、解の急峻な変化を含む対流支配的な現象のシミュレーションにおいて、不可欠なツールです。

代表的な応用分野:

- 計算流体力学 (CFD): 超音速機周りの衝撃波、爆風の伝播、宇宙物理学におけるガ

スの降着流など、圧縮性流体の計算。これらの問題では、衝撃波の正確な位置と鋭さを捉えることが、物理的に正しい解を得るための鍵となります。

- **航空宇宙工学:** 超音速・極超音速飛行体の設計。機体に働く空力や、衝撃波による空力加熱の大きさを正確に予測することは、機体の設計において死活問題であり、高解像度スキームを用いた CFD 解析が標準的に用いられます。

物理現象が双曲型の保存則に支配され、解にシャープな構造が現れる場合、高解像度スキームは単なる改良手法ではなく、信頼できる解を得るための**唯一の選択肢**と言っても過言ではありません。

## 10 楕円型方程式 - 定常状態の世界

三大 PDE の最後を飾るのが、楕円型方程式 (**Elliptic Equation**) です。時間とともに「発展」する放物型や、「伝播」する双曲型とは異なり、楕円型方程式は、全ての時間変化が収束しきった後の、最終的な「定常状態」あるいは「釣り合いの状態」を記述します。

この方程式の解は、領域内部の一点の値が、その瞬間に領域全体の境界条件によって即座に決定されるという、大域的な性質を持ちます。そのため、解法も時間発展を追いかける IVP とは全く異なるアプローチ、すなわち BVP として解く必要があります。

### 10.1 問題の見分け方：時間変化のない、釣り合いの状態

#### 楕円型方程式の代表例：ラプラス方程式とポアソン方程式

楕円型方程式の最も代表的な例が、ラプラス方程式と、それにソース項を加えたポアソン方程式です。

$$\nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (\text{ラプラス方程式})$$

$$\nabla^2 u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y) \quad (\text{ポアソン方程式})$$

**構造の核心:** この方程式の最も重要な特徴は、時間微分の項が一切存在しないことです。方程式は空間微分のみで構成されており、物理量  $u$  の空間的な釣り合いの関係式そのものを表しています。ポアソン方程式は、電荷分布  $f(x, y)$  があるときの静電ポテンシャル  $u$  の分布など、ソース項と場が釣り合っている状態を記述します。

#### 楕円型方程式の見分け方 Checklist

あなたの目の前の PDE が楕円型かどうかは、以下の特徴で判断できます。

- **時間微分の不在:** 方程式に時間  $t$  に関する微分項が全く含まれていないですか？
- **空間 2 階微分:** 全ての空間方向に対して、2 階の微分項 ( $\partial^2/\partial x^2, \partial^2/\partial y^2$  など) が存在しますか？
- **境界値問題:** 問題は、領域を囲む閉じた境界全体で条件 (境界条件) が与えられていますか？ (楕円型方程式は必ず BVP として定式化されます)
- **物理的直感:** その方程式は、最終的に落ち着いた「定常状態」や「ポテンシャル場」の分布を記述していませんか？

## 10.2 解法図鑑：反復法ソルバー

楕円型方程式を有限差分法などで離散化すると、その問題は巨大な連立一次方程式  $\mathbf{A}\mathbf{u} = \mathbf{b}$  の求解に帰着します。特に大規模な問題では、前章で学んだ反復法が主役となります。基本的な考え方は、まず解の適当な初期値を与え、各格子点の値を繰り返し更新することで、真の解へと「緩和」させていくというものです。

### 10.2.1 ヤコビ法、ガウス=ザイデル法、SOR法：古典的だが教育的で実装も容易

#### 古典的な反復法

- ヤコビ法 (**Jacobi Method**): 最もシンプルな反復法。新しいステップ ( $k+1$ ) の各点の値  $u_{i,j}^{(k+1)}$  を、全て古いステップ ( $k$ ) の周辺の値だけを使って更新します。収束は非常に遅いですが、並列計算が容易です。
- ガウス=ザイデル法 (**Gauss-Seidel Method**): ヤコビ法を改良し、新しいステップの値を計算する際に、そのステップで既に更新済みの値をすぐに利用します。これにより、一般にヤコビ法の約2倍の速さで収束します。
- 逐次過緩和法 (**Successive Over-Relaxation, SOR**): ガウス=ザイデル法による更新を、少しだけ「過剰に」行うことで収束を加速させる手法です。最適な緩和係数  $\omega$  ( $1 < \omega < 2$ ) を選べば、収束速度を劇的に改善できます。

### 10.2.2 多重格子法 (Multigrid)：大規模問題に対する超高速ソルバーのコンセプト

#### 多重格子法 (Multigrid Method) の哲学

ヤコビ法などの古典的反復法は、ギザギザした局所的な誤差（高周波成分）を滑らかにするのは得意ですが、領域全体に広がる滑らかな誤差（低周波成分）を解消するのは極めて苦手です。

多重格子法は、この困難を克服する天才的なアイデアです。

1. まず、本来の密な格子 (Fine Grid) で数回反復を行い、高周波誤差を素早く除去します。
2. 残った滑らかな誤差は、より粗い格子 (Coarse Grid) 上でも正確に表現できます。そこで、問題を粗い格子へと移し、そこで解きます。
3. 粗い格子では問題のサイズが小さいため計算は高速です。さらに、密な格子での低周波誤差は、粗い格子では高周波誤差として現れるため、再び反復法で効率的に除去できます。
4. 粗い格子で得られた補正を、密な格子へと戻し、解を修正します。

このプロセスを複数の階層の格子にわたって再帰的に行うことで、あらゆる周波数の誤差

を効率的に除去し、他の反復法とは比較にならないほどの超高速な収束を実現します。

### 10.2.3 この手法が輝く場面：SOR 法は手軽な高速化に。多重格子法は本格的な大規模計算に楕円型方程式の反復解法選択

- ヤコビ法・ガウス＝ザイデル法: 反復法の基本を学ぶための教育的な手法、あるいは非常に単純な問題に適しています。
- **SOR 法**: ガウス＝ザイデル法からの「手軽な高速化」を実現する、優れた選択肢です。実装も比較的容易で、最適な緩和係数を見つければ大きな効果が得られます。
- 共役勾配法 (**CG 法**): 離散化後の行列が対称正定値であれば、CG 法は非常に頑健で強力な汎用ソルバーとなります。
- 多重格子法: 超大規模な格子を持つ問題（数百万点以上）において、最速の解法の一つです。実装は複雑ですが、その計算効率は圧倒的であり、本格的な科学技術計算では標準的な選択肢となります。