

DB

1311

1997

(+6)

ポアソン方程式における高次精度差分法と
SOR 法の収束率

1997 年 7 月

竹内 敏己

寄贈
竹内敏己氏

99006213

目次

1	序論	1
1.1	研究の背景	1
1.2	研究の概要	3
1.3	論文の構成	6
2	ポアソン方程式に対する差分公式	8
2.1	モデル問題の設定	8
2.2	格子点とシングルセル	10
2.3	1変数関数に対する一般の差分公式	14
2.4	2変数以上の関数に対する一般の差分公式	16
2.5	n 次元の場合の2次精度差分公式	23
2.6	右辺項の工夫による公式の高精度化	25
2.7	n 次元の場合の4次精度差分公式	31
2.8	2次元の場合の2,4,6次精度差分公式	36
2.9	3次元の場合の2,4,6次精度差分公式	45
2.10	2,3次元の場合の8次精度差分公式の検討	55
2.11	ICCG法による数値計算	59
3	係数行列の性質	65
3.1	係数行列とJacobi法	65
3.2	係数行列のテンソル積による表現	70
3.3	係数行列の固有値	73
3.4	係数行列の条件数とJacobi法の収束率	81
3.5	CG法による数値計算	91
4	SOR法の収束率	93
4.1	SOR法に対する既知の理論	93
4.2	マルチカラー法	97

4.3	各差分公式に対するSOR法の収束率	108
4.4	数値計算	112
5	まとめ	116
	参考文献	120
A	1 変数関数に対する差分公式	124
	A.1 概要	124
	A.2 1~4階導関数に対する差分公式	124

第 1 章

序論

本論文は、ポアソン方程式に対する高次精度差分法および差分法によって得られる係数行列をSOR法を用いて解く場合の収束率に関する研究をまとめたものである。

1.1 研究の背景

近年のコンピュータの発達はめざましく、その計算能力も急速に上昇している。計算能力の上昇は計算機の持つ能力を質的にも変化させつつある。現在では、物理現象を数学モデルに基づいて記述し、コンピュータを用いて数値シミュレーションを行うことにより現象の解明を行う、ということすら行われている。また、実験が不可能または困難な現象、例えば原子炉、気象、量子力学、船舶や航空機の特徴等に対する数値シミュレーションが日常的に行われている。コンピュータを使った数値シミュレーションでは、パラメータの変更が容易であるという利点もある。このため産業界では、実験可能な現象においても実験のコストを下げるために数値シミュレーションによる数値実験を行い、製品の生産効率を上げたり品質を向上させるのに役立たせる、ということも頻繁に行われている。通常これらの数値シミュレーションでは、物理現象を偏微分方程式を用いて記述し、それをなんらかの方法で離散化し、得られた大規模な連立一次方程式を解く、という方法が最も一般的である。

しかし、このような数値シミュレーションにおいて要求される計算能力は非常に大きい場合が多々あり、現在のスーパーコンピュータを持つ

てしてもまだ十分であるとはいえない。そのためにも、また数値シミュレーションの信頼性を高めるためにも数値計算法の研究が必要である。コンピュータのハードウェアが持つ一定の計算能力に対し、数値計算法を工夫することによりソフトウェアとしての能力を高め、全体としてコンピュータの計算能力および信頼性を高めるということは重要である。

さてポアソン方程式は、定常熱伝導、弾性膜の釣り合い、電場、磁場等多くの物理現象を偏微分方程式で記述するときに見られる。特に非圧縮性流体の数値計算においては、連続の式と等価に扱われる圧力のポアソン方程式を解くのに計算時間の大部分が費やされている。従って、ポアソン方程式に対する高速かつ高精度な数値計算法の確立が望まれている。

ポアソン方程式を初めとする偏微分方程式に対する数値計算法の研究には二つの大きなテーマがある。第一のテーマは偏微分方程式の離散化法である。これには差分法、有限要素法、境界要素法、スペクトル法等様々な方法があるが、本研究では古典的方法である差分法を取り扱う。差分法は、偏微分方程式の初期値・境界値問題を数値的に解く手法として最もよく知られている方法である。差分法の特徴としては、方程式の離散化の手順が比較的容易であり、離散化の精度やスキームの安定性がよく研究されているということが挙げられる。さらに差分法は規則的な演算をくり返すという点でスーパーコンピュータによく適合する方法である。

第二のテーマは、離散化の結果得られた大規模な連立一次方程式に対する数値計算法である。偏微分方程式を差分法を使って離散化したときに得られる連立一次方程式の左辺の係数行列は、規則的帯部分のみが非零である疎行列となる。実用レベルの数値シミュレーションを行う場合、係数行列は相当大規模なものになる。これらの数値計算を行う場合、計算機のメモリを節約するために Gauss の消去法に代表される直接法よりも反復法が用いられることが多い。反復法は、Jacobi 法、Gauss-Seidel 法、SOR 法等の比較的古くから使用されてきた反復法と、前処理法の開発により最近よく使用されている CG 法系統の反復法に大別される。CG 法系の反復法においては、性質の悪い係数行列に対しても比較的安定した収束特性を備えたアルゴリズムが開発されている。しかし、SOR 法等の古典的反復法においても、ベクトル、並列コンピュータ向きのアルゴリズムが開発され、CG 法系の反復法よりも高速な数値計算が行える場合もある。また、SOR 法はプログラミングが容易であり手軽に使うことができるため、まだまだ数値計算で用いられる場面も多い。本研究では、反復法として主に SOR 法を取り上げ、その収束性に対する理論的な性質を調べた。

以上の二つのテーマはそれぞれ重要であるが、決して独立ではなく相

互に干渉し合っており、総合的な数値計算法として同時に研究するのが望ましい。そこで本研究では、SOR法の収束特性が良い差分法やSOR法の最適加速係数が理論的に得られる差分法、またCG法の前処理の効率が良い差分法の開発、といった離散化法と反復法を統合した立場で研究を行った。

1.2 研究の概要

数値計算を行うにあたってはより正確に、より高速にという二点が重要なテーマとなる。差分法を用いた場合、より正確に解くためには高次精度の差分公式を求めることが必要である。これに対して今まで多くの研究がなされてきた。一般に高次精度の差分公式の導出は、方程式の離散化のときに使う格子点の数を増やして精度を向上させる、という考え方に基づいて行われる。このようにして導き出された高次精度の差分公式は、離散化しようとする点に対し隣接点以外の格子点を使ったものが多い。この場合、領域の境界付近では同じ差分公式は適用できなくなるという問題が生じる。このとき、境界付近だけ別の差分公式を用いて離散化しても、そこで得られる係数行列の規則性がくずれ、数値的に扱にくくなる場合が多い。また、一般に差分の精度が高くなるにつれ使用する格子点数が増加し、係数行列の非零要素が増え演算量も増加する。

そこで本論文では、シングルセルと呼ばれる2次元なら9点、3次元なら27点の隣接する格子点内の領域のみを使った差分公式を研究した。また、本研究で用いる格子点は直交等間隔格子とした。シングルセル内の格子点のみを使った差分公式の場合、境界以外のすべての格子点で同じ差分公式を用いることができる。その結果、得られる係数行列は規則的な帯行列となり反復法を用いて解くときに都合がよい。しかし通常の差分法を用いた場合、シングルセル内の格子点だけでは2次精度の公式しか得ることができない。

これに対し、ポアソン方程式の右辺項を利用し左辺の離散化の剰余項を消すことにより精度を高める方法がある。例えば、2次元ポアソン方程式に対する周囲の8点を使った4次精度の差分公式が古くから知られている。R.E. Lynchはこの考え方を拡張し、さらに高次の6次精度差分公式を得る方法を文献[23]で提唱した。具体的には、格子点と格子点の間に位置する補助的な点の上でのポアソン方程式の右辺項の関数の値を利用して左辺項の差分式の剰余項を消す、という方法である。ここで得られた6次精度の差分公式から得られる係数行列は、古くから知られて

いる周囲の 8 点を使った 4 次精度の差分公式から得られる係数行列と全く同じものになる。Lynch の方法はシングルセル内のできるだけ少ない格子点を用いた高次精度の差分公式である、ともいえる。Lynch は文献 [24],[25] においてもこの考え方を適用し、3 次元のポアソン方程式に対する簡潔な形の高次精度の差分公式を得ている。これら Lynch の差分公式は、HODIE method (High Order Difference approximation via Identity Expansions の略) という名称で多くの文献で引用され、その有用さは広く知られている。ただし、この考え方を適用するにはポアソン方程式の右辺項の関数がある程度なめらかであることが必要である。例えば右辺項の関数が微分不可能な場合にはこれらの公式は使用できない。しかし、実際の問題においては右辺項の関数が十分なめらかであることを仮定できる場合も多く、Lynch の差分公式が使える場合が多い。

ポアソン方程式における Lynch 型の公式は、Lynch の文献で尽くされているわけではなく、またその研究内容に関しても十分とはいえない。例えば、(i) 3 次元の 4 次精度、6 次精度の差分公式がそれぞれ一つだけしか記述されていない、(ii) 8 次精度の差分公式に対する考察が不足している、(iii) 計算機による実験が少なく計算機への実装に対する考察が不十分である、など明らかにすべき事柄も多い。

そこで、本研究では Lynch 流の考え方を一般化し、それによって得られる様々な差分公式を計算機への実装という観点から評価した。本研究では、まず n 次元のポアソン方程式に対して、中心となる格子点からの距離でシングルセル内の格子点を分類し、同じ距離の格子点には同じ差分係数を使った 2 次精度差分公式を導出した。ここで得られた 2 次精度の公式は Lynch 流の考え方とは無縁であり、ポアソン方程式の右辺項のなめらかさを必要としない一般的な公式である。さらに、Lynch 流の考え方を一般化して得られる、 n 次元ポアソン方程式に対する 4 次精度差分公式を導出した。これらの 2 次精度、4 次精度の差分公式は一般的な形で記述されており、Lynch の公式を初めとする Lynch 流の考え方をういて得られるすべての 4 次精度差分公式を含んでいる。

次いで、2,3 次元の場合に 6 次以上も含めた高次精度の差分公式について検討した。その結果、2,3 次元のこれまで知られていなかった 4 次、6 次精度の差分公式を得ることができた。特に 3 次元ポアソン方程式に対しては、Lynch によって得られた 4 次精度差分公式よりも少ない格子点数の 4 次精度差分公式を得ることができた。また、格子点と格子点の間に位置する補助的な点を使用しなくても、6 次精度の差分公式を作れることを示した。さらに、この方法では 8 次以上の差分公式は得られないことを示した。また、係数行列に対して ICCG 法を用いた場合、これらの

公式の中にベクトル計算機において前処理を効率的に行うことができるものがあることを示し、その場合 Lynch の公式と比較して高速な数値計算が行え、かつ同程度の精度が得られることを数値計算により示した。

次に、上記研究により得られたシングルセルのみを使った n 次元ポアソン方程式の一般的な形の差分公式に対して、その係数行列の性質を調べた。係数行列の性質としては行列の解きやすさの指標として使われる条件数を取り上げた。モデル問題として単位正方形領域における全周 Dirichlet 境界条件を伴うポアソン方程式を考え、直交等間隔格子を使った場合の係数行列のすべての固有値を理論的に求めた。なおこの固有値の値は、通常の 2 次精度中心差分から得られる係数行列に対してはすでに得られている [39]。本研究では、シングルセル内の様々な格子点を使った差分公式から得られる係数行列の理論的な固有値を求めた。そして、その結果を使って行列の条件数を理論的に求め、どの格子点を使った差分公式が良い性質の係数行列を持つかを調べた。その結果、通常の 2 次精度中心差分で用いられている格子点よりシングルセルの中心点からの距離の遠い格子点を使った差分公式の方が良い条件数が得られることがわかった。すなわち、2 次元ならばシングルセルの正方形の頂点に位置する格子点を使った差分公式が、また 3 次元ならばシングルセルの立方体の頂点に位置する格子点を使った 2 次精度の差分公式が、他のどの格子点を使った 2 次精度の差分公式より係数行列の条件数が良くなることがわかった。さらに、基本的な反復法である Jacobi 法をこれらの係数行列に適用した場合、距離の遠い格子点を使った差分公式から得られる係数行列に対する Jacobi 法の収束が、他の格子点を使った場合よりも速いという結果も得られた。

次に、2,3 次元のポアソン方程式に対する 4 次精度差分公式から得られる係数行列の性質を調べた。特に、3 次元ポアソン方程式に対して、Lynch の差分公式と本研究で導いたある差分公式から得られる係数行列の条件数と Jacobi 法の収束率を比較した結果、いずれも本研究で得られた差分公式に対するものが良い、という結果が得られた。

最後に SOR 法の収束率および最適加速係数に関する研究を行った。研究の対象としたのは、前述のモデル問題に 2,4 次精度差分公式を使った場合の係数行列に対する SOR 法である。モデル問題が 2 次元の場合には、2 次精度差分公式に対する SOR 法は文献 [39],[44] 等で、また 4 次精度差分公式に対する SOR 法は文献 [1],[35],[40] 等で研究成果が報告されている。そこで、本研究では 3 次元問題に対する研究を行った。ここでは、ベクトル計算機向けの手法であるマルチカラー法を使った SOR 法についても研究を行った。マルチカラー法とは、連立一次方程式の未知数

を何色かに色分けし、それを利用して通常とは異なる順序で未知数を並べることにより再帰参照関係を取り除く、という方法である。特に、色として赤と黒の2色を使い、隣り合う格子点に異なる色を与えるマルチカラー法およびそのときの未知数の順序はそれぞれ red-black 法、red-black ordering と呼ばれ、2次元のポアソン方程式に対する通常の2次精度中心差分公式から得られる係数行列において使用されている。この場合、通常の ordering である natural ordering を使ったSOR法と同じ収束率、最適加速係数が得られることが様々な方法で証明されている [22],[39],[46]。また、2次元のポアソン方程式に4次精度の差分公式を適用した場合のマルチカラー法を使ったSOR法およびそのときの収束率の変化についても文献 [1] ですでに報告されている。

本研究では、前述の3次元のモデル問題に対して、本研究で得られた4次精度差分公式を適用した場合の、natural ordering によるSOR法とred-black ordering によるSOR法に対する収束率、およびLynchの4次精度差分公式を適用した場合のSOR法の収束率を調べた。その結果、本研究で得られた差分公式に対するSOR法がred-black ordering によりベクトル化可能であること、またそのときの理論的な最適加速係数、収束率を求めることができた。さらに、そのときの収束率が natural ordering によるSOR法よりも良いことを理論的に証明することができた。また、いくつかの格子点数の場合に数値計算を行った結果、いずれの場合もLynchの公式より本研究で得られた公式を用いた方が、係数行列に対するSOR法の収束性が良いという結果が得られた。

すなわち、本研究で得られた3次元ポアソン方程式に対する4次精度差分公式は収束率、ベクトル化という二重の意味でベクトル計算機向きであるといえる。またこの結果は、元来ベクトル計算機向けに考案されたred-black ordering によるSOR法は、ベクトル計算機のためだけではなく一般の計算機においても有効な技法となる場合がある、ということを示している。

1.3 論文の構成

本論文は以下のような構成になっている。まず、第2章ではポアソン方程式に対する高次精度差分公式に関する研究結果を述べる。最初に、 n 次元のポアソン方程式に対する1次元のTaylor展開による一般的な差分公式の導出法を述べる。次いで、シングルセル内の格子点のみを使った n 次元のTaylor展開による2次精度の差分公式を導出する。さらに、ポア

第 2 章

ポアソン方程式に対する差分公式

一般にポアソン方程式に対する高次精度の差分公式は、使用する格子点の数を増やすことにより得られる。これに対して、ポアソン方程式の右辺項を利用して左辺の離散化の剰余項を消去することにより精度を高める方法がある。本章では、この考え方を一般化することにより得られる高次精度の差分公式について述べる。

2.1 モデル問題の設定

本章では、 n 次元単位超立方体 $I (= [0, 1]^n)$ におけるポアソン方程式を扱う。 I の内部 $I^\circ (= (0, 1)^n)$ およびその境界 ∂I において、次のような境界値問題を考える。

$$(2.1) \quad \Delta u = f \quad \text{in } I^\circ$$

$$(2.2) \quad u = g \quad \text{on } \partial I$$

ポアソン方程式の変数として、 n 次元の場合は x_1, x_2, \dots, x_n を、2次元の場合は $x (= x_1), y (= x_2)$ を、3次元の場合は $x (= x_1), y (= x_2), z (= x_3)$ を用いる。すなわち、 n 次元の場合は

$$(2.3) \quad u = u(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad f = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

であり、2次元の場合は

$$(2.4) \quad u = u(x, y), \quad f = f(x, y)$$

であり、3次元の場合は

$$(2.5) \quad u = u(x, y, z), \quad f = f(x, y, z)$$

である。また Δu は、 n 次元の場合は

$$(2.6) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial x_2^2} + \cdots + \frac{\partial^2 u}{\partial x_n^2}$$

を、2次元の場合は

$$(2.7) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

を、3次元の場合は

$$(2.8) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}$$

を表す。

なお、以下で扱う差分公式は場合によっては f がある程度なめらかであるという条件が必要である。この条件が必要な場合はその都度述べることにし、ここでは何も仮定しないでおく。また、境界条件としてDirichlet条件を課したが、差分公式はポアソン方程式に対するものであって境界条件に対するものではない。その意味では境界条件はDirichlet条件でなくともかまわないが、第3章以降で扱う係数行列がDirichlet条件のものに限るため、ここでもDirichlet条件を仮定した。なお、本章で得られた差分公式は領域内部のポアソン方程式に対するものとしてどんな境界条件の場合にも適用できる。

2.2 格子点とシングルセル

本研究では、 n 次元単位超立方体 $I (= [0, 1]^n)$ 上の各辺を $h = 1/N$ 刻みで N 等分した格子を用いる。そのとき、 I の内部 $I^\circ (= (0, 1)^n)$ の格子点の座標は、

$$(2.9) \quad (i_1 h, i_2 h, \dots, i_n h) \quad (1 \leq i_1, i_2, \dots, i_n \leq N - 1)$$

と書ける。特に、2次元の場合の格子点の座標は、

$$(2.10) \quad (ih, jh) \quad (1 \leq i, j \leq N - 1)$$

3次元の場合の格子点の座標は、

$$(2.11) \quad (ih, jh, kh) \quad (1 \leq i, j, k \leq N - 1)$$

と書ける。

本研究ではシングルセル内の格子点のみを使って差分公式を構成する。ここで、シングルセルとは座標

$$(2.12) \quad (i_1 h, i_2 h, \dots, i_n h) \quad (1 \leq i_1, i_2, \dots, i_n \leq N - 1)$$

の格子点を中心とする領域、

$$(2.13) \quad [(i_1 - 1)h, (i_1 + 1)h] \times [(i_2 - 1)h, (i_2 + 1)h] \times \dots \\ \times [(i_n - 1)h, (i_n + 1)h]$$

をさす。この領域内の格子点は、各座標軸に対する座標値が

$$(2.14) \quad i_m h - h, i_m h, i_m h + h \quad (m = 1, 2, \dots, n)$$

のいずれかである 3^n 個の点に限られる。

また、本章を通して

$$(2.15) \quad u(i_1h, i_2h, \dots, i_nh) = u, \quad f(i_1h, i_2h, \dots, i_nh) = f$$

と略記する。座標の表し方と同様にして、2次元の場合は、

$$(2.16) \quad u(ih, jh) = u, \quad f(ih, jh) = f$$

3次元の場合は、

$$(2.17) \quad u(ih, jh, kh) = u, \quad f(ih, jh, kh) = f$$

と略記する。

さて、本研究では差分の中心点からの距離が等しい点における差分係数が同じである差分公式のみを考える。そのために次の略記法を使う。すなわち、シングルセル内の点のうち中心点 $(i_1h, i_2h, \dots, i_nh)$ からの距離が $\sqrt{m}h$ ($m = 1, 2, \dots, n$) である点における関数 u の和を $\sum_m u$ という記法で表す。言い換えれば、 $\sum_m u$ は n 個の座標値のうち m 個が中心点の座標値と $\pm h$ だけ異なり $n - m$ 個の座標値が一致する $2^m {}_n C_m$ 個の点における関数 u の和である。 n 次元の場合の $\sum_m u$ を具体的に表すと、

$$(2.18) \quad \begin{aligned} \sum_1 u &= u(i_1h - h, i_2h, \dots, i_nh) + u(i_1h + h, i_2h, \dots, i_nh) \\ &\quad + u(i_1h, i_2h - h, \dots, i_nh) + u(i_1h, i_2h + h, \dots, i_nh) \\ &\quad \dots \dots \dots \\ &\quad + u(i_1h, i_2h, \dots, i_nh - h) + u(i_1h, i_2h, \dots, i_nh + h), \\ \\ \sum_2 u &= u(i_1h - h, i_2h - h, i_3h, \dots, i_nh) \\ &\quad + u(i_1h + h, i_2h - h, i_3h, \dots, i_nh) \\ &\quad + u(i_1h - h, i_2h + h, i_3h, \dots, i_nh) \\ &\quad + u(i_1h + h, i_2h + h, i_3h, \dots, i_nh) \\ &\quad \dots \dots \dots \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + u(i_1h - h, i_2h, \dots, i_{n-1}h, i_nh - h) \\
& + u(i_1h + h, i_2h, \dots, i_{n-1}h, i_nh - h) \\
& + u(i_1h - h, i_2h, \dots, i_{n-1}h, i_nh + h) \\
& + u(i_1h + h, i_2h, \dots, i_{n-1}h, i_nh + h) \\
& \dots\dots\dots \\
& + u(i_1h, \dots, i_{n-2}h, i_{n-1}h - h, i_nh - h) \\
& + u(i_1h, \dots, i_{n-2}h, i_{n-1}h + h, i_nh - h) \\
& + u(i_1h, \dots, i_{n-2}h, i_{n-1}h - h, i_nh + h) \\
& + u(i_1h, \dots, i_{n-2}h, i_{n-1}h + h, i_nh + h), \\
& \dots\dots\dots \\
\sum_n u & = u(i_1h - h, i_2h - h, \dots, i_nh - h) \\
& + u(i_1h + h, i_2h - h, \dots, i_nh - h) \\
& + u(i_1h - h, i_2h + h, \dots, i_nh - h) \\
& + u(i_1h + h, i_2h + h, \dots, i_nh - h) \\
& \dots \\
& + u(i_1h - h, i_2h - h, \dots, i_nh + h) \\
& \dots \\
& + u(i_1h + h, i_2h + h, \dots, i_nh + h)
\end{aligned}$$

となる。

2次元の場合は、さらに任意の i, j ($1 \leq i, j \leq N - 1$) に対して $u(ih, jh) = u_{i,j}$ と略記する。この記法を使えば、

$$\begin{aligned}
(2.19) \quad \sum_1 u & = u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1}, \\
\sum_2 u & = u_{i-1,j-1} + u_{i+1,j-1} + u_{i-1,j+1} + u_{i+1,j+1}
\end{aligned}$$

となる。Figure 2.1 に、 $\sum_1 u$, $\sum_2 u$ で使用される格子点の位置をそれぞれ ○印, ●印で示す。 $\sum_1 u$, $\sum_2 u$ で使用する格子点数はそれぞれ 4 点である。

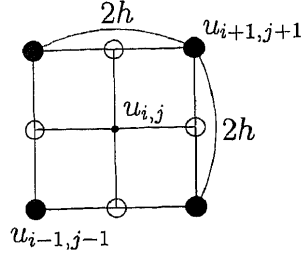


Figure 2.1: Two groups of grid points in a single cell in 2-dimensions.

3次元の場合も同様に、任意の i, j, k ($1 \leq i, j, k \leq N-1$) に対して $u(ih, jh, kh) = u_{i,j,k}$ と略記する。この記法を使えば、

$$(2.20) \quad \begin{aligned} \sum_1 u &= u_{i-1,j,k} + u_{i+1,j,k} + u_{i,j-1,k} \\ &\quad + u_{i,j+1,k} + u_{i,j,k-1} + u_{i,j,k+1}, \end{aligned}$$

$$(2.21) \quad \begin{aligned} \sum_2 u &= u_{i-1,j-1,k} + u_{i+1,j-1,k} + u_{i-1,j+1,k} \\ &\quad + u_{i+1,j+1,k} + u_{i,j-1,k-1} + u_{i,j+1,k-1} \\ &\quad + u_{i,j-1,k+1} + u_{i,j+1,k+1} + u_{i-1,j,k-1} \\ &\quad + u_{i+1,j,k-1} + u_{i-1,j,k+1} + u_{i+1,j,k+1}, \end{aligned}$$

$$(2.22) \quad \begin{aligned} \sum_3 u &= u_{i-1,j-1,k-1} + u_{i+1,j-1,k-1} + u_{i-1,j+1,k-1} \\ &\quad + u_{i+1,j+1,k-1} + u_{i-1,j-1,k+1} + u_{i+1,j-1,k+1} \\ &\quad + u_{i-1,j+1,k+1} + u_{i+1,j+1,k+1} \end{aligned}$$

となる。Figure 2.2に、 $\sum_1 u$, $\sum_2 u$, $\sum_3 u$ で使用される格子点の位置をそれぞれ○印、●印、◎印で示す。 $\sum_1 u$, $\sum_2 u$, $\sum_3 u$ で使用する格子点数はそれぞれ6点、12点、8点である。

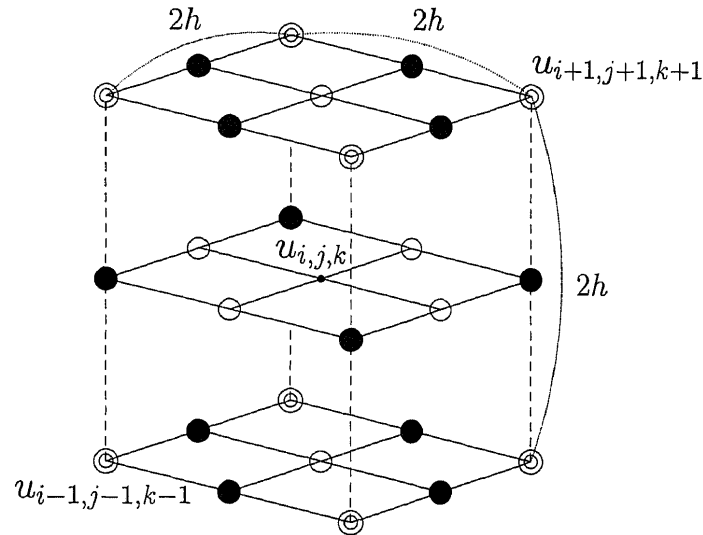


Figure 2.2: Three groups of grid points in a single cell in 3-dimensions.

また、記法 $\sum_m u$ ($m = 1, 2, \dots, n$) と同じ意味で、ポアソン方程式の右辺項 f についても、記法 $\sum_m f$ ($m = 1, 2, \dots, n$) を使うこととする。

2.3 1 変数関数に対する一般の差分公式

ここでは、一般的な差分法の考え方および差分公式の導き方を述べる。一般の差分法の場合、 n 変数関数の導関数に対する差分公式は 1 変数関数の導関数に対する差分公式 n 個を組み合わせて作る。2 変数以上の関数の導関数に対する差分公式の導出法については次節で述べることとし、本節では 1 変数関数 $u(x)$ の導関数に対する差分法についてのみ述べる。

$u(x)$ の導関数に対する差分公式でも、幅 h の等間隔格子を用いる。以下では、 $u(x+ih)$ を u_i と略記する。本節では、 $\frac{d^m u}{dx^m}(x)$ ($= u^{(m)}(x) = u_0^{(m)}$) に対する差分公式を導く。ここで、 n 個の格子点上の関数 u の値を使った差分公式について次が成り立つ。

定理 2.1 異なる n 個の格子点 $x + i_1h, x + i_2h, \dots, x + i_nh$ 上の関数 u の値 $u_{i_1}, u_{i_2}, \dots, u_{i_n}$ を使った、 $u(x)$ の m 階導関数 $u_0^{(m)}$ ($n > m$) に対する $n - m$ 次精度差分公式が一意に存在する。すなわち、次式

$$(2.23) \quad u_0^{(m)} = \frac{1}{h^m} (a_1 u_{i_1} + a_2 u_{i_2} + \dots + a_n u_{i_n}) + O(h^{n-m})$$

を満たす a_1, a_2, \dots, a_n が一意に存在する。

証明 Taylor 展開の公式より

$$(2.24) \quad u_{i_p} = \sum_{l=0}^{n-1} \frac{u_0^{(l)}}{l!} (i_p h)^l + O(h^n) \quad (p = 1, 2, \dots, n)$$

が成り立つ。従って、

$$(2.25) \quad \frac{1}{h^m} \sum_{p=1}^n a_p u_{i_p} = \frac{1}{h^m} \sum_{p=1}^n \sum_{l=0}^{n-1} a_p i_p^l \frac{h^l}{l!} u_0^{(l)} + O(h^{n-m})$$

となる。(2.25) 式の右边が、

$$(2.26) \quad u_0^{(m)} = \frac{1}{h^m} \sum_{l=0}^{n-1} \delta_{l,m} h^l u_0^{(l)}$$

に等しければ、(2.25) 式の左辺が $u_0^{(m)}$ に対する $n - m$ 次精度の差分公式となる。ここで、 δ は Kronecker の記号である。従って、

$$(2.27) \quad \sum_{p=1}^n a_p i_p^l = \delta_{l,m} l! \quad (l = 0, 1, \dots, n-1)$$

を満たす a_1, a_2, \dots, a_n の存在と一意性が示せればよい。(2.27) 式を行列で表せば、

$$(2.28) \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ i_1 & i_2 & \cdots & i_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ i_1^{n-1} & i_2^{n-1} & \cdots & i_n^{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \delta_{0,m} \\ 1!\delta_{1,m} \\ \vdots \\ (n-1)!\delta_{n-1,m} \end{pmatrix}$$

となる。(2.28) 式の係数行列は Vandermonde 行列ゆえ正則であり、係数 a_1, a_2, \dots, a_n は一意に決定する。 ■

2.4 2 変数以上の関数に対する一般の差分公式

2 変数以上の関数の導関数に対する一般的な差分公式は 1 変数関数の導関数に対する差分公式を組み合わせて作る。3 変数以上の場合も基本的には 2 変数の場合と同じであり、ここでは 2 変数関数の導関数に対する差分公式についてのみ説明する。なお、これらの一般的な差分公式は本論文で導出するポアソン方程式 (2.1) に対する差分公式において、左辺の離散化ではなく右辺の関数の離散化において使用される。

さて、本節で使用する格子点は 2.2 節において定義したものを使用する。ここでは、 $u = u_{i,j} (= u(ih, jh))$ における $\frac{\partial^{m_1+m_2} u}{\partial x^{m_1} \partial y^{m_2}}$ に対する n 次精度差分公式について考察する。まず、定理 2.1 の結果より、異なる $i_1, i_2, \dots, i_{n+m_1}$ に対して、

$$(2.29) \quad \frac{\partial^{m_1} u_{i,j}}{\partial x^{m_1}} = \frac{1}{h^{m_1}} \sum_{p=1}^{n+m_1} a_p u_{i_p,j} + O(h^n)$$

となる係数 $a_1, a_2, \dots, a_{n+m_1}$ が一意に存在する。ここで現れる $u_{i_p,j}$ に対して、同じく定理 2.1 より、

$$(2.30) \quad \frac{\partial^{m_2} u_{i_p,j}}{\partial y^{m_2}} = \frac{1}{h^{m_2}} \sum_{q=1}^{n+m_2} b_q u_{i_p,j_q} + O(h^n)$$

となる係数 $b_1, b_2, \dots, b_{n+m_2}$ が一意に存在する。(2.29) 式と (2.30) 式を組み合わせて、

$$(2.31) \quad \frac{\partial^{m_1+m_2} u_{i,j}}{\partial x^{m_1} \partial y^{m_2}} = \frac{1}{h^{m_1+m_2}} \sum_{p=1}^{n+m_1} \sum_{q=1}^{n+m_2} a_p b_q u_{i_p,j_q} + O(h^n)$$

が得られる。これは、 $\frac{\partial^{m_1+m_2}u}{\partial x^{m_1}\partial y^{m_2}}$ に対する $(n+m_1)(n+m_2)$ 点を使った n 次精度差分公式である。一例として、 $\frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial y^2}$ に対する 2 次精度の差分公式を求める。なお、 x の偏微分に対する差分としては片側差分を用いる。まず、定理 2.1 において

$$(2.32) \quad m = 2, n = 4, i_1 = 0, i_2 = 1, i_3 = 2, i_4 = 3$$

とおくと、

$$(2.33) \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 4 & 9 \\ 0 & 1 & 8 & 27 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

より、

$$(2.34) \quad a_1 = 2, a_2 = -5, a_3 = 4, a_4 = -1$$

が得られる。すなわち、

$$(2.35) \quad \frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2} (2u_{i,j} - 5u_{i+1,j} + 4u_{i+2,j} - u_{i+3,j}) + O(h^2)$$

である。 $\frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial y^2}$, $\frac{\partial^2 u_{i+1,j}}{\partial y^2}$, $\frac{\partial^2 u_{i+2,j}}{\partial y^2}$, $\frac{\partial^2 u_{i+3,j}}{\partial y^2}$ にも同じ公式を用いると、次の式が得られる。

$$(2.36) \quad \frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial y^2} = \frac{1}{h^2} (2u_{i,j} - 5u_{i,j+1} + 4u_{i,j+2} - u_{i,j+3}) + O(h^2),$$

$$(2.37) \quad \frac{\partial^2 u_{i+1,j}}{\partial y^2} = \frac{1}{h^2} (2u_{i+1,j} - 5u_{i+1,j+1} + 4u_{i+1,j+2} - u_{i+1,j+3}) + O(h^2),$$

$$(2.38) \quad \frac{\partial^2 u_{i+2,j}}{\partial y^2} = \frac{1}{h^2} (2u_{i+2,j} - 5u_{i+2,j+1} + 4u_{i+2,j+2} - u_{i+2,j+3}) + O(h^2),$$

$$(2.39) \quad \frac{\partial^2 u_{i+3,j}}{\partial y^2} = \frac{1}{h^2} (2u_{i+3,j} - 5u_{i+3,j+1} + 4u_{i+3,j+2} - u_{i+3,j+3}) + O(h^2).$$

(2.36)～(2.39) 式と (2.35) 式を組み合わせることにより次の 2 次精度差分公式が得られる。

$$(2.40) \quad \begin{aligned} \frac{\partial^4 u_{i,j}}{\partial x^2 \partial y^2} = & \frac{1}{h^4} (4u_{i,j} - 10u_{i+1,j} + 8u_{i+2,j} - 2u_{i+3,j} \\ & - 10u_{i,j+1} + 25u_{i+1,j+1} - 20u_{i+2,j+1} + 5u_{i+3,j+1} \\ & + 8u_{i,j+2} - 20u_{i+1,j+2} + 16u_{i+2,j+2} - 4u_{i+3,j+2} \\ & - 2u_{i,j+3} + 5u_{i+1,j+3} - 4u_{i+2,j+3} + u_{i+3,j+3}) \\ & + O(h^2). \end{aligned}$$

次に、2 次元ポアソン方程式に対する一般の差分公式を導出する。なお、ここでは中心差分公式のみを考える。定理 2.1 において

$$(2.41) \quad m = 2, \quad n = 3, \quad i_1 = -1, \quad i_2 = 0, \quad i_3 = 1$$

とおくと、

$$(2.42) \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}$$

より、

$$(2.43) \quad a_1 = 1, \quad a_2 = -2, \quad a_3 = 1$$

が得られる。すなわち、

$$(2.44) \quad \frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2}(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}) + O(h)$$

である。同様に、

$$(2.45) \quad \frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial y^2} = \frac{1}{h^2}(u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}) + O(h)$$

であるから、ポアソン方程式

$$(2.46) \quad \frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial y^2} = f_{i,j}$$

に対する1次精度差分公式として、

$$(2.47) \quad \frac{1}{h^2}(u_{i-1,j} + u_{i+1,j} + u_{i,j-1} + u_{i,j+1} - 4u_{i,j}) = f_{i,j} + O(h)$$

が得られる。この差分公式の精度は $n - m = 1$ であるから定理2.1より1次以上の精度であるということがわかる。次に、定理2.1において

$$(2.48) \quad m = 2, n = 4, i_1 = -1, i_2 = 0, i_3 = 1, i_4 = 2$$

とおくと、

$$(2.49) \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 1 & 4 \\ -1 & 0 & 1 & 8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

より、

$$(2.50) \quad a_1 = 1, a_2 = -2, a_3 = 1, a_4 = 0$$

が得られる。すなわち、

$$(2.51) \quad \frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2}(u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}) + O(h^2)$$

である。この式は (2.44) 式と同じ形の近似式であるから、(2.44) 式が 2 次精度で成り立っているということがわかる。同様に、2 次元ポアソン方程式に対する 1 次精度差分公式である (2.47) 式が 2 次精度の差分公式になっているということもわかる。なお、この 2 次精度の差分公式は 2 次元ポアソン方程式に対する 5 点差分公式として最もよく知られている基本的な差分公式である。

次にポアソン方程式に対する、さらに高次の差分公式を導出する。定理 2.1 において

$$(2.52) \quad m = 2, n = 5, i_1 = -2, i_2 = -1, i_3 = 0, i_4 = 1, i_5 = 2$$

とおくと、

$$(2.53) \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 2 \\ 4 & 1 & 0 & 1 & 4 \\ -8 & -1 & 0 & 1 & 8 \\ 16 & 1 & 0 & 1 & 16 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

より、

$$(2.54) \quad a_1 = -\frac{1}{12}, a_2 = \frac{4}{3}, a_3 = -\frac{5}{2}, a_4 = \frac{4}{3}, a_5 = -\frac{1}{12}$$

が得られる。すなわち、

$$(2.55) \quad \frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial x^2} = \frac{1}{12h^2}(-u_{i-2,j} + 16u_{i-1,j} - 30u_{i,j} + 16u_{i+1,j} - u_{i+2,j}) + O(h^3)$$

である。なお、ここで定理 2.1 の差分係数に関する一意性により、2 次精度差分公式 (2.47) が 3 次の精度ではなく、ちょうど 2 次の精度を持つ公式であることがわかる。また、

$$(2.56) \quad \frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial y^2} = \frac{1}{12h^2} (-u_{i,j-2} + 16u_{i,j-1} - 30u_{i,j} + 16u_{i,j+1} - u_{i,j+2}) + O(h^3)$$

であるから、2 次元ポアソン方程式に対する 3 次精度差分公式として、

$$(2.57) \quad \frac{1}{12h^2} (-u_{i-2,j} + 16u_{i-1,j} + 16u_{i+1,j} - u_{i+2,j} - u_{i,j-2} + 16u_{i,j-1} + 16u_{i,j+1} - u_{i,j+2} - 60u_{i,j}) = f_{ij}$$

が得られる。この差分公式の精度は $n - m = 3$ であるから定理 2.1 より 3 次以上の精度であるということがわかる。次に、定理 2.1 において

$$(2.58) \quad m = 2, n = 5, \\ i_1 = -2, i_2 = -1, i_3 = 0, i_4 = 1, i_5 = 2, i_6 = 3$$

とおくと、

$$(2.59) \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 1 & 2 & 3 \\ 4 & 1 & 0 & 1 & 4 & 9 \\ -8 & -1 & 0 & 1 & 8 & 27 \\ 16 & 1 & 0 & 1 & 16 & 81 \\ -32 & -1 & 0 & 1 & 32 & 243 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \\ a_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

より、

$$(2.60) \quad a_1 = -\frac{1}{12}, a_2 = \frac{4}{3}, a_3 = -\frac{5}{2}, a_4 = \frac{4}{3}, a_5 = -\frac{1}{12}, a_6 = 0$$

が得られる。すなわち、

$$(2.61) \quad \frac{\partial^2 u_{i,j}}{\partial x^2} = \frac{1}{12h^2} (-u_{i-2,j} + 16u_{i-1,j} - 30u_{i,j} + 16u_{i+1,j} - u_{i+2,j}) + O(h^4)$$

である。この式は(2.55)式と同じ形の近似式であり、(2.55)式が4次精度で成り立っているということがわかる。これより、2次元ポアソン方程式に対する3次精度差分公式である(2.56)式が4次精度の差分公式になっているということもわかる。Figure 2.3にこの4次精度差分公式で使用する格子点を示す。

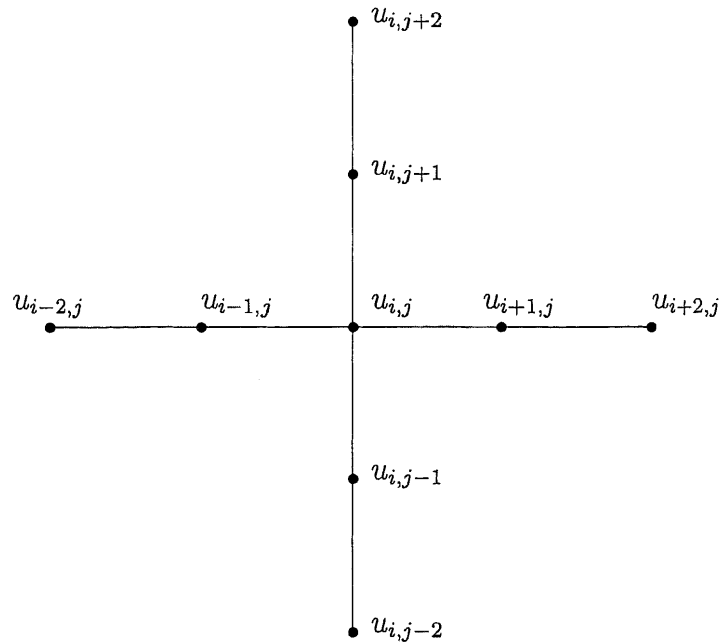


Figure 2.3: General 9-point difference approximation.

2次元ポアソン方程式に対するこの4次精度の差分公式は、シングルセル以外の格子点を使用するため、境界点の隣点においては適用するこ

とができない。従って、それらの点では別の差分公式を使用しなければならず、その場合係数行列の規則性がくずれ、数値的に扱いにくくなる場合が多い。また、係数行列も M 行列とはならず、一般に性質が悪く解きにくい。そこで、次節以降ではシングルセル内の格子点のみを使った差分公式を導出する。

2.5 n 次元の場合の 2 次精度差分公式

本節では、 n 次元のポアソン方程式に対するシングルセル内の格子点のみを使った 2 次精度の差分公式を導出する。なお、ここで導出する差分公式においては、ポアソン方程式の右辺項の関数 f に対する制限はない。

まず、 n 次元座標空間において、格子点

$$(i_1 h, i_2 h, \dots, i_n h)$$

およびその近傍点

$$(i_1 h + h_1, i_2 h + h_2, \dots, i_n h + h_n)$$

を考える。 $u(i_1 h + h_1, i_2 h + h_2, \dots, i_n h + h_n)$ に対する、点 $(i_1 h, i_2 h, \dots, i_n h)$ における Taylor 展開は、 $u = u(i_1 h, i_2 h, \dots, i_n h)$ とおくと、

$$\begin{aligned}
 (2.62) \quad & u(i_1 h + h_1, i_2 h + h_2, \dots, i_n h + h_n) \\
 &= u + \frac{1}{1!} \left(h_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + h_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \dots + h_n \frac{\partial}{\partial x_n} \right) u \\
 &\quad + \frac{1}{2!} \left(h_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + h_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \dots + h_n \frac{\partial}{\partial x_n} \right)^2 u \\
 &\quad + \frac{1}{3!} \left(h_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + h_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \dots + h_n \frac{\partial}{\partial x_n} \right)^3 u \\
 &\quad + O(\rho^4), \\
 &\quad \rho = \sqrt{h_1^2 + \dots + h_n^2}
 \end{aligned}$$

となる。また、多項展開の公式より

$$\begin{aligned}
 (2.63) \quad & \left(h_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + h_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \cdots + h_n \frac{\partial}{\partial x_n} \right)^m \\
 &= \sum_{m_1+m_2+\cdots+m_n=m} \frac{m!}{m_1!m_2!\cdots m_n!} \\
 & \quad \left(h_1 \frac{\partial}{\partial x_1} \right)^{m_1} \left(h_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right)^{m_2} \cdots \left(h_n \frac{\partial}{\partial x_n} \right)^{m_n} \\
 &= \sum_{m_1+m_2+\cdots+m_n=m} {}^m C_{m_1} \times {}^{m-m_1} C_{m_2} \times \cdots \times {}^{m-m_1-m_2-\cdots-m_{n-1}} C_{m_n} \\
 & \quad \left(h_1 \frac{\partial}{\partial x_1} \right)^{m_1} \left(h_2 \frac{\partial}{\partial x_2} \right)^{m_2} \cdots \left(h_n \frac{\partial}{\partial x_n} \right)^{m_n}
 \end{aligned}$$

が成り立つ。差分公式で使用する近傍点はシングルセル内の格子点であるから各 h_i ($1 \leq i \leq n$) は $-h, 0, h$ のいずれかである。

ここで、 $\sum_m u$ ($1 \leq m \leq n$) に対する 4 次精度の近似式を上記 Taylor 展開を使って求める。 $\sum_m u$ で使用される $2^m {}_n C_m$ 個の格子点のうち、 m_0 個の座標軸に対する座標値が $i_k h \pm h$ となる格子点の数は $2^{m-m_0} {}_{m-m_0} C_{m-m_0}$ 個である。これらの考察と、(2.62), (2.63) 式より次式が得られる。

$$(2.64) \quad \sum_m u = 2^m {}_n C_m u + 2^{m-n-1} {}_{m-1} C_{m-1} \frac{h^2}{2} \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 u}{\partial x_k^2} + O(h^4).$$

ここで、 h の項と h^3 の項が消えているのは $\sum_m u$ の持つ対称性より $+$ の項と $-$ の項が同数現れるからである。また、 h^2 の項は、

$$(2.65) \quad \Delta u = \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 u}{\partial x_k^2} = f$$

なる関係より f に置き換えることができ、次式が得られる。

$$(2.66) \quad \sum_m u = 2^m {}_n C_m u + 2^{m-1} {}_{n-1} C_{m-1} h^2 f + O(h^4).$$

この式を変形することにより、 n 次元ポアソン方程式に対する次の2次精度の差分公式が得られる。

$$(2.67) \quad \frac{1}{h^2} (\sum_m u - 2^m {}_n C_m u) = 2^{m-1} {}_{n-1} C_{m-1} f + O(h^2) \\ (m = 1, 2, \dots, n).$$

さて、この(2.67)式において $m = 1$ とおくと、次の差分公式が得られる。

$$(2.68) \quad \frac{1}{h^2} (\sum_1 u - 2nu) = f + O(h^2).$$

$n = 2, 3$ 、すなわち2,3次元の場合はこの(2.68)式はポアソン方程式に対する2次精度中心差分公式としてよく知られている基本的な公式である。また、(2.67)式において $m = 1$ から n までの1次結合の形である次式もポアソン方程式に対する2次精度の差分公式となる。

$$(2.69) \quad \frac{1}{h^2} \left\{ a_1 \sum_1 u + \dots + a_n \sum_n u - \left(\sum_{m=1}^n 2^m {}_n C_m a_m \right) u \right\} \\ = \sum_{m=1}^n \frac{2^{m-1} f}{{}_{n-1} C_{m-1}} + O(h^2).$$

ここで、 a_1, a_2, \dots, a_n は任意の実数である。ただし、

$$a_1 = a_2 = \dots = a_n = 0$$

となる場合は除く。

2.6 右辺項の工夫による公式の高精度化

次に、前節で利用した n 変数Taylor展開(2.62)式を利用して4次精度の差分公式を導出する。しかし、シングルセル内の格子点のみを利用

する場合、前節と同じ方法では4次精度の差分公式を得ることは不可能である。そこで何らかの工夫が必要となるが、ここではポアソン方程式の右辺項を利用して公式の精度を高める方法を利用する。

本節では、その考え方を明確にするために次の差分公式の導出方法を説明する。

$$(2.70) \quad \frac{1}{h^2} (4\Sigma_1 u + \Sigma_2 u - 20u) = 4f + \frac{1}{2}\Sigma_1 f + O(h^4).$$

この公式は2次元ポアソン方程式に対する4次精度の差分公式であり、9点差分公式としてすでに知られている [30]。ただし、ポアソン方程式の右辺項の関数 f が2回偏微分可能であるという条件が必要である。本節では、この条件を仮定する。この公式を導くにはまず、前節と同様に Σ_1 , Σ_2 に対する近似式を利用する。 Σ_1 , Σ_2 のそれぞれの関数に対して h^5 の項まで Taylor 展開し、和をとることにより次の二つの式が得られる。

$$(2.71) \quad \begin{aligned} \Sigma_1 u &= 4u + h^2(u_x + u_y) \\ &\quad + \frac{h^4}{12}(u_{xx} + u_{yy}) + O(h^6), \end{aligned}$$

$$(2.72) \quad \begin{aligned} \Sigma_2 u &= 4u + h^2(u_x + u_y) \\ &\quad + \frac{h^4}{6}(u_{xx} + 6u_{xy} + u_{yy}) + O(h^6). \end{aligned}$$

なお、ここで

$$(2.73) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = u_x, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = u_y$$

という記法を用いた。すなわち、 u の添え字の X , Y はそれぞれ u を x , y で2回偏微分するという意味を表す。従って、

$$(2.74) \quad u_{xx} = \frac{\partial^4 u}{\partial x^4}, \quad u_{yy} = \frac{\partial^4 u}{\partial y^4}, \quad u_{xy} = \frac{\partial^4 u}{\partial x^2 \partial y^2}$$

である。以下本論文ではこの記法を用いることとする。また、 u を f に置き換えた場合も同じ意味でこの記法を用いることとする。

さて次に、(2.71), (2.72) 式を組み合わせて 4 次精度の差分公式を導く。単純な一次結合では、差分公式が得られないので、ポアソン方程式およびそのラプラシアンをとった次の二つの関係式を使い、 u の偏微分の項を消去することを考える。

$$(2.75) \quad u_x + u_y = f,$$

$$(2.76) \quad u_{xx} + 2u_{xy} + u_{yy} = f_x + f_y.$$

具体的には (2.71) 式の 4 倍と (2.72) 式を足し合わせて (2.76) 式の左辺の形が現れる次の形にする。

$$(2.77) \quad \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u + \sum_2 u - 20u) \\ = 6(u_x + u_y) + \frac{h^2}{2} (u_{xx} + 2u_{xy} + u_{yy}) + O(h^4).$$

ここで、(2.75), (2.76) 式により次式が得られる。

$$(2.78) \quad \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u + \sum_2 u - 20u) = 6f + \frac{h^2}{2} (f_x + f_y) + O(h^4).$$

さらに、ここで右辺項は 2 回偏微分可能であるから次の近似式が利用できる。

$$(2.79) \quad \sum_1 f = 4f + h^2 (f_x + f_y) + O(h^4).$$

なお、この (2.79) 式は (2.71) 式を h^4 のオーダーで評価し u を f で置き換えれば得られる。この (2.79) 式を (2.78) 式に代入することにより、2 次元ポアソン方程式に対する 4 次精度の差分公式

$$(2.80) \quad \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u + \sum_2 u - 20u) = 4f + \frac{1}{2} \sum_1 f + O(h^4)$$

が得られる。ただし、この (2.80) 式はまわりの格子点上の f の値を参照するため、境界点の隣に位置する格子点では使用できない。そのときは、(2.78) 式の右辺に現れる次式に対する近似式を境界上の f の値を参照しないように変更しなければならない。

$$(2.81) \quad \frac{h^2}{2}(f_x + f_y) = \frac{h^2}{2} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right).$$

これには次のようにすればよい。まず、格子点

$$(2.82) \quad (ih, h) \quad (i = 2, 3, \dots, N-2)$$

に対する差分公式では、 $y = 0$ 上の格子点上の f の値を参照しないように $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$ に対して片側差分を用いる。差分公式 (2.35) より、

$$(2.83) \quad \frac{\partial^2 f_{i,1}}{\partial y^2} = \frac{1}{h^2}(2f_{i,1} - 5f_{i,2} + 4f_{i,3} - f_{i,4}) + O(h^2)$$

が成り立つ。 $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ に対しては通常の 2 次精度中心差分である次式を使う。

$$(2.84) \quad \frac{\partial^2 f_{i,1}}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2}(f_{i-1,1} - 2f_{i,1} + f_{i+1,1}) + O(h^2).$$

(2.83) 式と (2.84) 式を (2.78) 式に代入すれば次式が得られる。

$$(2.85) \quad \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u_{i,1} + \sum_2 u_{i,1} - 20u_{i,1}) \\ = 6f_{i,1} + \frac{1}{2}f_{i-1,1} + \frac{1}{2}f_{i+1,1} - \frac{5}{2}f_{i,2} + 2f_{i,3} - \frac{1}{2}f_{i,4} + O(h^4).$$

同様に、格子点

$$(2.86) \quad (ih, (N-1)h) \quad (i = 2, 3, \dots, N-2)$$

に対する差分公式でも、 $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$ に対して片側差分を、 $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ に対して中心差分を用いることにより、次の差分公式が得られる。

$$(2.87) \quad \begin{aligned} & \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u_{i,N-1} + \sum_2 u_{i,N-1} - 20u_{i,N-1}) \\ & = 6f_{i,N-1} + \frac{1}{2}f_{i-1,N-1} + \frac{1}{2}f_{i+1,N-1} \\ & \quad - \frac{1}{2}f_{i,N-4} + 2f_{i,N-3} - \frac{5}{2}f_{i,N-2} + O(h^4). \end{aligned}$$

次に、格子点

$$(2.88) \quad (h, jh) \quad (j = 2, 3, \dots, N-2)$$

に対しては、 $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ に対して片側差分を、 $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$ に対して中心差分を用いることにより、次の差分公式が得られる。

$$(2.89) \quad \begin{aligned} & \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u_{1,j} + \sum_2 u_{1,j} - 20u_{1,j}) \\ & = 6f_{1,j} + \frac{1}{2}f_{1,j-1} + \frac{1}{2}f_{1,j+1} - \frac{5}{2}f_{2,j} + 2f_{3,j} - \frac{1}{2}f_{4,j} + O(h^4). \end{aligned}$$

同様に、格子点

$$(2.90) \quad ((N-1)h, jh) \quad (j = 2, 3, \dots, N-2)$$

に対しても次の公式が得られる。

$$(2.91) \quad \begin{aligned} & \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u_{N-1,j} + \sum_2 u_{N-1,j} - 20u_{N-1,j}) \\ & = 6f_{N-1,j} + \frac{1}{2}f_{N-1,j-1} + \frac{1}{2}f_{N-1,j+1} \\ & \quad - \frac{1}{2}f_{N-4,j} + 2f_{N-3,j} - \frac{5}{2}f_{N-2,j} + O(h^4). \end{aligned}$$

次に、格子点

$$(2.92) \quad (h, h), (h, (N-1)h), ((N-1)h, h), ((N-1)h, (N-1)h)$$

については、 $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$, $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$ に対して片側差分を用いることにより、次の四つの差分公式が得られる。

$$(2.93) \quad \begin{aligned} & \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u_{1,1} + \sum_2 u_{1,1} - 20u_{1,1}) \\ & = 8f_{1,1} - \frac{5}{2}f_{1,2} + 2f_{1,3} - \frac{1}{2}f_{1,4} \\ & \quad - \frac{5}{2}f_{2,1} + 2f_{3,1} - \frac{1}{2}f_{4,1} + O(h^4), \end{aligned}$$

$$(2.94) \quad \begin{aligned} & \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u_{1,N-1} + \sum_2 u_{1,N-1} - 20u_{1,N-1}) \\ & = 8f_{1,N-1} - \frac{5}{2}f_{2,N-1} + 2f_{3,N-1} - \frac{1}{2}f_{4,N-1} \\ & \quad - \frac{1}{2}f_{1,N-4} + 2f_{1,N-3} - \frac{5}{2}f_{1,N-2} + O(h^4), \end{aligned}$$

$$(2.95) \quad \begin{aligned} & \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u_{N-1,1} + \sum_2 u_{N-1,1} - 20u_{N-1,1}) \\ & = 8f_{N-1,1} - \frac{1}{2}f_{N-4,1} + 2f_{N-3,1} - \frac{5}{2}f_{N-2,1} \\ & \quad - \frac{5}{2}f_{N-1,2} + 2f_{N-1,3} - \frac{1}{2}f_{N-1,4} + O(h^4), \end{aligned}$$

$$(2.96) \quad \begin{aligned} & \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u_{N-1,N-1} + \sum_2 u_{N-1,N-1} - 20u_{N-1,N-1}) \\ & = 8f_{N-1,N-1} - \frac{1}{2}f_{N-4,N-1} + 2f_{N-3,N-1} - \frac{5}{2}f_{N-2,N-1} \\ & \quad - \frac{1}{2}f_{N-1,N-4} + 2f_{N-1,N-3} - \frac{5}{2}f_{N-1,N-2} + O(h^4). \end{aligned}$$

以上の差分公式を使えば、境界点の隣に位置する格子点上でも4次精度の差分公式が適用でき、領域全体で同じ精度を保った近似を行うことが

できる。また、これらの公式では左辺の u の係数は同じであり、差分公式から得られる連立一次方程式においては、右辺項のみが異なり、未知数に対する係数行列は規則的帯行列となる。

2.7 n 次元の場合の 4 次精度差分公式

ここでは、ポアソン方程式の右辺項を利用して Taylor 展開で現れる項を消去するという前節の考え方を一般化して n 次元のポアソン方程式に対する 4 次精度の差分公式を導く。本節でもポアソン方程式の右辺項の関数 f の 2 回偏微分可能性を仮定する。

まず、2.5 節で利用した n 次元の Taylor 展開である (2.62) 式を高精度化することにより、

$$\begin{aligned}
 (2.97) \quad & u(i_1 h + h_1, i_2 h + h_2, \dots, i_n h + h_n) \\
 &= u + \frac{1}{1!} \left(h_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + h_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \dots + h_n \frac{\partial}{\partial x_n} \right) u \\
 &\quad + \frac{1}{2!} \left(h_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + h_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \dots + h_n \frac{\partial}{\partial x_n} \right)^2 u \\
 &\quad \dots \dots \dots \\
 &\quad + \frac{1}{5!} \left(h_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + h_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \dots + h_n \frac{\partial}{\partial x_n} \right)^5 u \\
 &\quad + O(\rho^6), \\
 &\quad \rho = \sqrt{h_1^2 + \dots + h_n^2}
 \end{aligned}$$

が得られる。2.5 節と同様にして、この (2.97) 式と多項展開式 (2.63) より次式が得られる。

$$\begin{aligned}
 (2.98) \quad \sum_m u &= 2^m {}_n C_m u + 2^{m-1} {}_{n-1} C_{m-1} \frac{h^2}{2} \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 u}{\partial x_k^2} \\
 &\quad + 2^{m-1} {}_{n-1} C_{m-1} \frac{h^4}{24} \sum_{k=1}^n \frac{\partial^4 u}{\partial x_k^4}
 \end{aligned}$$

$$+ 2^m {}_{n-2}C_{m-2} \cdot 4C_2 \frac{h^4}{24} \sum_{1 \leq k_1 \leq k_2 \leq n} \frac{\partial^4 u}{\partial x_{k_1}^2 \partial x_{k_2}^2} + O(h^6).$$

ただし、(2.98) 式第 4 項の ${}_{n-2}C_{m-2}$ は、 $n \leq 2$ または $m = 1$ となる場合は ${}_{n-2}C_{m-2} = 0$ と定める。 n 次元ポアソン方程式に対する 4 次精度の差分公式は、 $\sum_m u$ の 6 次の近似式である (2.98) 式から導かれる。1 種類の m ($1 \leq m \leq n$) に対する (2.98) 式から 4 次精度の差分公式を作るためには、(2.98) 式の左辺の第 2 項以降に現れる u に関する式をすべて消去しなければならない。そのためには、ポアソン方程式およびそこから導かれる次の二つの式を用いる。

$$(2.99) \quad \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 u}{\partial x_k^2} = f,$$

$$(2.100) \quad \sum_{k=1}^n \frac{\partial^4 u}{\partial x_k^4} + 2 \sum_{1 \leq k_1 \leq k_2 \leq n} \frac{\partial^4 u}{\partial x_{k_1}^2 \partial x_{k_2}^2} = \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_k^2} (= \Delta f).$$

(2.98) 式において、第 2 項の u に関する式は (2.99) 式を用いて消去できる。第 3,4 項の u に関する式を、(2.100) 式を用いて消去するためには、

$$(2.101) \quad 2^m {}_{n-1}C_{m-1} \frac{h^4}{24} : 2^m {}_{n-2}C_{m-2} \cdot 4C_2 \frac{h^4}{24} = 1 : 2$$

が必要十分である。これを解いて次式が得られる。

$$(2.102) \quad 3m - n - 2 = 0.$$

この関係式が成り立つ場合とそうでない場合に分けて 4 次精度の差分公式を導出する。

(A) $3m - n - 2 = 0$ のとき

この場合は、1 種類の m に対する (2.98) 式から 4 次精度の差分公式が得られる。すなわち、(2.98) 式は、(2.99), (2.100) 式を使えば、

$$(2.103) \quad \frac{\sum_m u}{2^{m-1} {}_{n-1}C_{m-1} h^2} = \frac{2n}{mh^2} u + f + \frac{h^2}{12} \Delta f + O(h^4)$$

と変形される。次に、この式の右辺の Δf を差分化する。 $\sum_m u$ の4次の近似式である(2.64)式において、 $u = f, m = 1$ とおくと、

$$(2.104) \quad \sum_1 f = 2nf + h^2 \Delta f + O(h^4)$$

となる。従って、

$$(2.105) \quad \Delta f = \frac{1}{h^2} (\sum_1 f - 2nf) + O(h^2)$$

である。この式を(2.103)式に代入すると、次の4次精度の差分公式が得られる。

$$(2.106) \quad \frac{\sum_m u}{2^{m-1} {}_{n-1}C_{m-1} h^2} - \frac{2n}{mh^2} u = \left(1 - \frac{n}{6}\right) f + \frac{1}{12} \sum_1 f + O(h^4).$$

(B) $3m - n - 2 \neq 0$ のとき

この場合は2種類の $m(1 \leq m_1 < m_2 \leq n)$ に対する(2.98)式を組み合わせ、4次精度の差分公式を導く。 $m = m_1, m = m_2$ の場合の近似式(2.98)はそれぞれ次のようになる。

$$(2.107) \quad \begin{aligned} \sum_{m_1} u &= 2^{m_1} {}_n C_{m_1} u + 2^{m_1-1} {}_{n-1} C_{m_1-1} h^2 \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 u}{\partial x_k^2} \\ &\quad + 2^{m_1-3} {}_{n-1} C_{m_1-1} \frac{h^4}{3} \sum_{k=1}^n \frac{\partial^4 u}{\partial x_k^4} \\ &\quad + 2^{m_1-2} {}_{n-2} C_{m_1-2} h^4 \sum_{1 \leq k_1 \leq k_2 \leq n} \frac{\partial^4 u}{\partial x_{k_1}^2 \partial x_{k_2}^2} \\ &\quad + O(h^6), \end{aligned}$$

$$(2.108) \quad \sum_{m_2} u = 2^{m_2} {}_n C_{m_2} u + 2^{m_2-1} {}_{n-1} C_{m_2-1} h^2 \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 u}{\partial x_k^2}$$

$$\begin{aligned}
& + 2^{m_2-3} {}_{n-1}C_{m_2-1} \frac{h^4}{3} \sum_{k=1}^n \frac{\partial^4 u}{\partial x_k^4} \\
& + 2^{m_2-2} {}_{n-2}C_{m_2-2} h^4 \sum_{1 \leq k_1 \leq k_2 \leq n} \frac{\partial^4 u}{\partial x_{k_1}^2 \partial x_{k_2}^2} \\
& + O(h^6).
\end{aligned}$$

ここで、

$$(2.109) \quad c_0 = \frac{{}_n C_{m_2}}{{}_n C_{m_1}}$$

とおき、(2.107) 式 $\times 2^{m_2-m_1} m_2(3m_2-n-2)$ +(2.108) 式 $\times m_1(n-3m_1+2)$ を計算すると、

$$\begin{aligned}
(2.110) \quad & 2^{m_2-m_1} c_0 m_2(3m_2-n-2) \sum_{m_1} u + m_1(n-3m_1+2) \sum_{m_2} u \\
& = \left\{ 2^{m_1} 2^{m_2-m_1} {}_n C_{m_1} c_0 m_2(3m_2-n-2) \right. \\
& \quad \left. + 2^{m_2} {}_n C_{m_2} m_1(n-3m_1+2) \right\} u \\
& + \left\{ 2^{m_1-1} 2^{m_2-m_1} {}_{n-1} C_{m_1-1} c_0 m_2(3m_2-n-2) \right. \\
& \quad \left. + 2^{m_2-1} {}_{n-1} C_{m_2-1} m_1(n-3m_1+2) \right\} h^2 \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 u}{\partial x_k^2} \\
& + \left\{ 2^{m_1-3} 2^{m_2-m_1} {}_{n-1} C_{m_1-1} c_0 m_2(3m_2-n-2) \right. \\
& \quad \left. + 2^{m_2-3} {}_{n-1} C_{m_2-1} m_1(n-3m_1+2) \right\} \frac{h^4}{3} \sum_{k=1}^n \frac{\partial^4 u}{\partial x_k^4} \\
& + \left\{ 2^{m_1-2} 2^{m_2-m_1} {}_{n-2} C_{m_1-2} c_0 m_2(3m_2-n-2) \right. \\
& \quad \left. + 2^{m_2-2} {}_{n-2} C_{m_2-2} m_1(n-3m_1+2) \right\} h^4 \sum_{1 \leq k_1 \leq k_2 \leq n} \frac{\partial^4 u}{\partial x_{k_1}^2 \partial x_{k_2}^2} \\
& + O(h^6) \\
& = \left\{ 2^{m_2} {}_n C_{m_2} (m_2 - m_1) (3m_1 + 3m_2 - n - 2) \right\} u
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left\{ 3 \cdot 2^{m_2-1} {}_{n-1}C_{m_2-1} m_1 (m_2 - m_1) \right\} h^2 \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 u}{\partial x_k^2} \\
& + \left\{ 2^{m_2-3} {}_{n-1}C_{m_1-1} m_1 (m_2 - m_1) \right\} h^4 \sum_{k=1}^n \frac{\partial^4 u}{\partial x_k^4} \\
& + \left\{ 2^{m_2-2} {}_{n-1}C_{m_1-1} m_1 (m_2 - m_1) \right\} h^4 \sum_{1 \leq k_1 \leq k_2 \leq n} \frac{\partial^4 u}{\partial x_{k_1}^2 \partial x_{k_2}^2} \\
& + O(h^6) \\
& = \left\{ 2^{m_2} {}_n C_{m_2} (m_2 - m_1) (3m_1 + 3m_2 - n - 2) \right\} u \\
& + \left\{ 3 \cdot 2^{m_2-1} {}_{n-1}C_{m_2-1} m_1 (m_2 - m_1) \right\} h^2 \Delta u \\
& + \left\{ 2^{m_2-3} {}_{n-1}C_{m_1-1} m_1 (m_2 - m_1) \right\} h^4 \Delta \Delta u + O(h^6)
\end{aligned}$$

となる。(2.99), (2.100) 式を使って上の (2.110) 式を変形すると、次の 4 次精度の差分公式が得られる。

$$\begin{aligned}
(2.111) \quad & \frac{3m_2 - n - 2}{3 \cdot 2^{m_1-1} {}_{n-1}C_{m_1-1} (m_2 - m_1) h^2} \sum_{m_1} u \\
& + \frac{n - 3m_1 + 2}{3 \cdot 2^{m_2-1} {}_{n-1}C_{m_2-1} (m_2 - m_1) h^2} \sum_{m_2} u \\
& - \frac{2n(3m_1 + 3m_2 - n - 2)}{3m_1 m_2 h^2} u = \left(1 - \frac{n}{6} \right) f + \frac{1}{12} \sum_1 f + O(h^4)
\end{aligned}$$

$$(1 < m_1 < m_2 < n).$$

なお、本節で得られた 4 次精度の差分公式についても、まわりの格子点上の f の値を参照するため、境界点の隣に位置する格子点上では使用できない。しかし、前節と同様にして定理 2.1 において片側差分を用いることにより、同じ精度を保ち、かつ境界点上の f の値を参照しない差分公式を作ることができる。また、このとき前節と同じく差分公式から得られる連立一次方程式の係数行列は規則的帯行列となる。

2.8 2次元の場合の2,4,6次精度差分公式

ここでは、 n 次元のポアソン方程式に対して得られた結果を2次元の場合に適用するとともに、さらに高次精度の差分公式を導く。

n 次元のポアソン方程式に対する2次精度差分公式(2.67)において $n = 2$ とおき変形すると、

$$(2.112) \quad \frac{\sum_m u}{2^{m-1} h^2 C_{m-1}} - \frac{4}{h^2 m} u = f + O(h^2)$$

が得られる。 $m = 1, 2$ であるから、これより2次元ポアソン方程式に対する2種類の差分公式が得られる。

1. $m = 1$ のとき、

$$(2.113) \quad \frac{1}{h^2} (\sum_1 u - 4u) = f + O(h^2).$$

2. $m = 2$ のとき、

$$(2.114) \quad \frac{1}{2h^2} (\sum_2 u - 4u) = f + O(h^2).$$

$m = 1$ の場合の公式(2.113)は2.4節で一般的な差分公式として導いた(2.47)式と同じものであり、5点差分公式としてよく知られた公式である。(2.114)式はシングルセルの正方形の頂点に位置する格子点を使った差分公式である。

次に、2次元ポアソン方程式に対する4次精度差分公式を求める。 $n = 2$ の場合、 $3m - n - 2 = 0$ となる自然数 m は存在しないから差分公式(2.106)は適用できない。そこで、差分公式(2.111)において $n = 2$ とおき公式を導く。この場合はさらに $m_1 = 1, m_2 = 2$ と m_1, m_2 が決定される。これらを(2.111)式に代入し左辺の係数を整数にするために式全体を定数倍すれば、2.6節で導いた4次精度の差分公式(2.70)と同じ次式が得られる。

$$(2.115) \quad \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u + \sum_2 u - 20u) = 4f + \frac{1}{2}\sum_1 f + O(h^4).$$

この (2.115) 式の右辺の $4f + \frac{1}{2}\Sigma_1 f$ は $6f + \frac{h^2}{2}\Delta f$ の近似式であるが、これは別の近似式であってもよい。例えば 2.6 節の (2.72) 式を h^4 のオーダーで評価し u を f で置き換えれば、

$$(2.116) \quad \Sigma_2 u = 4u + h^2(u_x + u_y) + O(h^4)$$

が得られる。この式を使えば次の 4 次精度の差分公式

$$(2.117) \quad \frac{1}{h^2} (4\Sigma_1 u + \Sigma_2 u - 20u) = 5f + \frac{1}{4}\Sigma_2 f + O(h^4)$$

が得られる。ただし、右辺に別の近似式を用いるときは、差分公式の精度を 4 次に保つため、右辺の近似式も 4 次、すなわち右辺の Δf に対する 2 次精度の近似式を用いる必要がある。

なお、(2.115) 式と (2.117) 式の違いは右辺のみであり、それぞれの差分公式を用いてポアソン方程式を解く場合、そこから得られる連立一次方程式の係数行列は全く同じものとなる。

また、境界点の隣に位置する格子点では、2.6 節で述べた差分公式を使用する必要がある。この場合も、差分公式の左辺は変化せず、そこから得られる連立一次方程式の係数行列は規則的な帯行列となる。

次に、2 次元ポアソン方程式に対するさらに高次の差分公式を導出する。まず、 Σ_1 、 Σ_2 に対する 6 次精度の近似式である (2.71) 式、(2.72) 式の高精度化を考える。これには、左辺の Σ_1 、 Σ_2 のそれぞれ関数をさらに高次の項まで Taylor 展開すればよい。ここでは、 h^7 の項まで Taylor 展開した次の式を用いる。

$$(2.118) \quad \Sigma_1 u = 4u + h^2(u_x + u_y) + \frac{h^4}{12}(u_{xx} + u_{yy}) \\ + \frac{h^6}{360}(u_{xxx} + u_{yyy}) + O(h^8),$$

$$(2.119) \quad \Sigma_2 u = 4u + 2h^2(u_x + u_y) + \frac{h^4}{6}(u_{xx} + 6u_{xy} + u_{yy}) \\ + \frac{h^6}{180}(u_{xxx} + 15u_{xxy} + 15u_{xyy} + u_{yyy}) + O(h^8).$$

ここで、4次精度差分公式 (2.115) の左辺を (2.118), (2.119) 式を使って計算すれば、

$$\begin{aligned}
 (2.120) \quad & \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u + \sum_2 u - 20u) \\
 & = 6(u_x + u_y) + \frac{h^2}{2}(u_{xx} + 2u_{xy} + u_{yy}) \\
 & \quad + \frac{h^4}{60}(u_{xxx} + 5u_{xxy} + 5u_{xyy} + u_{yyy}) + O(h^6)
 \end{aligned}$$

が得られる。さらに、ポアソン方程式から得られる三つの式、

$$(2.121) \quad u_x + u_y = f,$$

$$(2.122) \quad u_{xx} + 2u_{xy} + u_{yy} = f_x + f_y,$$

$$(2.123) \quad u_{xxx} + 3u_{xxy} + 3u_{xyy} + u_{yyy} = f_{xx} + 2f_{xy} + f_{yy}$$

を使えば (2.120) 式は、

$$\begin{aligned}
 (2.124) \quad & \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u + \sum_2 u - 20u) \\
 & = 6f + \frac{h^2}{2}(f_x + f_y) + \frac{h^4}{60}(f_{xx} + 4f_{xy} + f_{yy}) + O(h^6)
 \end{aligned}$$

と変形できる。次に、(2.124) 式の右辺に対する 6 次精度の近似式を導出する。ここでは、まず論文 [25] で述べられている方法を紹介する。なお、ここでは f に対する 4 回偏微分可能性を仮定している。まず、次の三つの式を使う。

$$(2.125) \quad \sum_1 f = 4f + h^2(f_x + f_y) + \frac{h^4}{12}(f_{xx} + f_{yy}) + O(h^6),$$

$$(2.126) \quad \sum_2 f = 4f + 2h^2(f_x + f_y) + \frac{h^4}{6}(f_{xx} + 6f_{xy} + f_{yy}) + O(h^6),$$

$$(2.127) \quad \sum_{\frac{1}{2}} f = 4f + \frac{h^2}{2}(f_x + f_y) + \frac{h^4}{96}(f_{xx} + 6f_{xy} + f_{yy}) + O(h^6).$$

ここで、 $\Sigma_{\frac{1}{2}}f$ の定義は次の通りである。

$$(2.128) \quad \Sigma_{\frac{1}{2}}f = f(ih - \frac{1}{2}h, jh - \frac{1}{2}h) + f(ih + \frac{1}{2}h, jh - \frac{1}{2}h) \\ + f(ih - \frac{1}{2}h, jh + \frac{1}{2}h) + f(ih + \frac{1}{2}h, jh + \frac{1}{2}h).$$

これはシングルセルの正方形の対角線上に位置する4点での f の値の和である。Figure 2.4に、 $\Sigma_1 u$, $\Sigma_2 u$, $\Sigma_{\frac{1}{2}} u$ で使用される格子点の位置をそれぞれ○, ●, ◎印で示す。

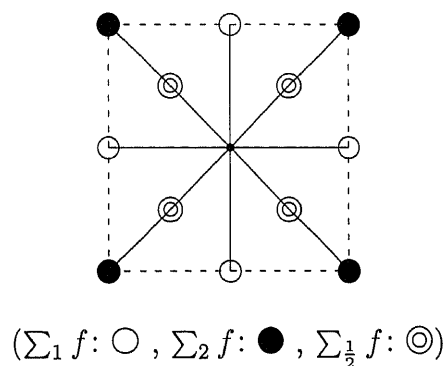


Figure 2.4: Three groups of grid points in a single cell.

ここで、(2.125), (2.126), (2.127) 式を組み合わせることにより次式を得る。

$$(2.129) \quad \frac{1}{15}\Sigma_1 f + \frac{1}{60}\Sigma_2 f + \frac{4}{5}\Sigma_{\frac{1}{2}} f \\ = \frac{53}{15}f + \frac{h^2}{2}(f_x + f_y) \\ + \frac{h^4}{60}(f_{xx} + 4f_{xy} + f_{yy}) + O(h^6).$$

この (2.129) 式と (2.124) 式により、次の6次精度差分公式が得られる。

$$(2.130) \quad \frac{1}{h^2} (4\Sigma_1 u + \Sigma_2 u - 20u) = \frac{1}{15}\Sigma_1 f + \frac{1}{60}\Sigma_2 f + \frac{4}{5}\Sigma_{\frac{1}{2}} f + \frac{37}{15}f + O(h^6).$$

なお、この公式は論文 [25] にすでに記載されている。また、(2.124) 式の右辺の近似式は 6 次精度であればよく、様々なバリエーションがある。一例として、次の四つの格子点を使った差分式を導出する。

$$(2.131) \quad (ih - \frac{1}{2}h, jh), (ih + \frac{1}{2}h, jh), (ih, jh - \frac{1}{2}h), (ih, jh + \frac{1}{2}h).$$

また、この四つの格子点上の f の値の和を $\Sigma_{\frac{1}{4}}$ で表す。すなわち、

$$(2.132) \quad \Sigma_{\frac{1}{4}} f = f(ih - \frac{1}{2}h, jh) + f(ih + \frac{1}{2}h, jh) + f(ih, jh - \frac{1}{2}h) + f(ih, jh + \frac{1}{2}h)$$

と定義する。Figure 2.5 に、 $\Sigma_1 u$, $\Sigma_2 u$, $\Sigma_{\frac{1}{4}} u$ で使用される格子点の位置をそれぞれ \circ , \bullet , \odot 印で示す。

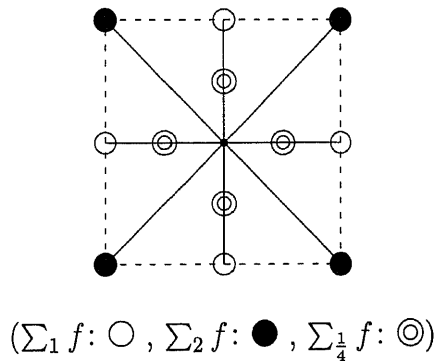


Figure 2.5: Another three groups of grid points in a single cell.

Taylor 展開により (2.132) 式の近似式として次式を得る。

$$(2.133) \quad \Sigma_{\frac{1}{4}} f = 4f + \frac{h^2}{4}(f_x + f_y) + \frac{h^4}{192}(f_{xx} + f_{yy}) + O(h^6).$$

ここで、(2.125), (2.126), (2.133) 式を組み合わせることにより次式を得る。

$$\begin{aligned}
 (2.134) \quad & -\frac{1}{30}\sum_1 f + \frac{1}{15}\sum_2 f + \frac{8}{5}\sum_{\frac{1}{2}} f \\
 & = \frac{98}{15}f + \frac{h^2}{2}(f_x + f_y) \\
 & + \frac{h^4}{60}(f_{xx} + 4f_{xy} + f_{yy}) + O(h^6).
 \end{aligned}$$

この (2.134) 式と (2.124) 式により、次の 6 次精度差分公式が得られる。

$$\begin{aligned}
 (2.135) \quad & \frac{1}{h^2}(4\sum_1 u + \sum_2 u - 20u) = \\
 & -\frac{1}{30}\sum_1 f + \frac{1}{15}\sum_2 f + \frac{8}{5}\sum_{\frac{1}{2}} f - \frac{8}{15}f + O(h^6).
 \end{aligned}$$

さて、(2.130), (2.135) 式は格子点と格子点の間接点の上での関数の値を利用している。Lynch はこの考え方を使得様々な差分公式を得ている [23],[24],[25]。しかし、格子点と格子点の間接点を使うということはそれだけ多くの情報を必要とし、実際の数値計算において計算機上でメモリを多く必要とすることになる。また、Lynch の論文には境界点の隣の格子点での処理法も記載されておらず、計算機への実装という点で不十分である。そこで、本論文では、格子点と格子点の間接点を使用せず、従来の格子点上の f の値のみを使得た 6 次精度の差分公式を導出する。

そのためには、まず (2.124) 式の右辺の 6 次精度の近似式を格子点上の f の値のみを使得て構成する。それには、定理 2.1 を使得、(2.124) 式の右辺に現れる、

$$(2.136) \quad \frac{\partial^2 f_{i,j}}{\partial x^2}, \quad \frac{\partial^2 f_{i,j}}{\partial y^2}$$

に対する 4 次精度の差分公式を、また

$$(2.137) \quad \frac{\partial^4 f_{i,j}}{\partial x^4}, \quad \frac{\partial^4 f_{i,j}}{\partial x^2 \partial y^2}, \quad \frac{\partial^4 f_{i,j}}{\partial y^4}$$

に対する 2 次精度の差分公式を利用する。中心差分に対して、定理 2.1 を使えば、次の差分公式が得られる。

$$(2.138) \quad \frac{\partial^2 f_{i,j}}{\partial x^2} = \frac{1}{12h^2}(-f_{i-2,j} + 16f_{i-1,j} - 30f_{i,j} + 16f_{i+1,j} - f_{i+2,j}) + O(h^4),$$

$$(2.139) \quad \frac{\partial^2 f_{i,j}}{\partial y^2} = \frac{1}{12h^2}(-f_{i,j-2} + 16f_{i,j-1} - 30f_{i,j} + 16f_{i,j+1} - f_{i,j+2}) + O(h^4),$$

$$(2.140) \quad \frac{\partial^4 f_{i,j}}{\partial x^4} = \frac{1}{h^4}(f_{i-2,j} - 4f_{i-1,j} + 6f_{i,j} - 4f_{i+1,j} + f_{i+2,j}) + O(h^2),$$

$$(2.141) \quad \frac{\partial^4 f_{i,j}}{\partial x^2 \partial y^2} = \frac{1}{h^4}(f_{i-1,j-1} - 2f_{i,j-1} + f_{i+1,j-1} - 2f_{i-1,j} + 4f_{i,j} - 2f_{i+1,j} + f_{i-1,j+1} - 2f_{i,j+1} + f_{i+1,j+2}) + O(h^2),$$

$$(2.142) \quad \frac{\partial^4 f_{i,j}}{\partial y^4} = \frac{1}{h^4}(f_{i,j-2} - 4f_{i,j-1} + 6f_{i,j} - 4f_{i,j+1} + f_{i,j+2}) + O(h^2).$$

この (2.138)~(2.142) 式により、次の近似式が得られる。

$$(2.143) \quad \begin{aligned} & 6f + \frac{h^2}{2}(f_x + f_y) + \frac{h^4}{60}(f_{xx} + 4f_{xy} + f_{yy}) \\ &= \frac{113}{30}f_{i,j} + \frac{17}{30}(f_{i-1,j} + f_{i+1,j} + f_{i,j-1} + f_{i,j+1}) \\ &+ \frac{1}{60}(f_{i-1,j-1} + f_{i+1,j-1} + f_{i-1,j+1} + f_{i+1,j+1}) \\ &- \frac{1}{40}(f_{i-2,j} + f_{i+2,j} + f_{i,j-2} + f_{i,j+2}) + O(h^6). \end{aligned}$$

ここで、次の略記法の定義をする。

$$\Sigma_4 u = u_{i-2,j} + u_{i+2,j} + u_{i,j-2} + u_{i,j+2}.$$

さらに、記法 Σ_1 , Σ_2 を使えば、最終的に次の6次精度差分公式が得られる。

$$(2.144) \quad \frac{1}{h^2} (4\Sigma_1 u + \Sigma_2 u - 20u) \\ = \frac{113}{30} f + \frac{17}{30} \Sigma_1 f + \frac{1}{60} \Sigma_2 - \frac{1}{40} \Sigma_4 + O(h^6).$$

この差分公式は、Lynch の差分公式のように格子点と格子点の間点での f の値は使わないが、まわりのより多くの格子点上の f の値を参照するため、境界付近の右辺項の処理は複雑になる。例えば、4次精度公式(2.115)の場合は、境界点の隣に位置する格子点での差分公式のみ右辺の近似式を変更すればよいが、6次精度差分公式(2.144)式では境界から二つ内側の格子点においても右辺の近似式を境界上の f の値を参照しないように変更しなければならない。しかし、定理2.1において片側差分を使用すれば、4次精度差分公式での手順と同様にして右辺の近似式を変更できる。そこで使用される片側差分公式を一覧表の形で付録Aに示した。ここでは、例として格子点 (h, h) における6次精度差分公式(2.124)の右辺の近似式について述べる。

まず、定理2.1を使えば、偏微分(2.136)に対する4次精度の片側差分公式が、また(2.137)に対する2次精度の片側差分公式が次のように求まる。

$$(2.145) \quad \frac{\partial^2 f_{1,1}}{\partial x^2} = \frac{1}{12h^2} (45f_{1,1} - 154f_{2,1} + 214f_{3,1} \\ - 156f_{4,1} + 61f_{5,1} - 10f_{6,1}) + O(h^4),$$

$$(2.146) \quad \frac{\partial^2 f_{1,1}}{\partial y^2} = \frac{1}{12h^2} (45f_{1,1} - 154f_{1,2} + 214f_{1,3} \\ - 156f_{1,4} + 61f_{1,5} - 10f_{1,6}) + O(h^4),$$

$$(2.147) \quad \frac{\partial^4 f_{1,1}}{\partial x^4} = \frac{1}{h^4} (3f_{1,1} - 14f_{2,1} + 26f_{3,1}$$

$$\begin{aligned}
& -24f_{4,1} + 11f_{5,1} - 2f_{6,1}) + O(h^2), \\
(2.148) \quad & \frac{\partial^4 f_{1,1}}{\partial x^2 \partial y^2} = \frac{1}{h^4} (4f_{1,1} - 10f_{2,1} + 8f_{3,1} - 2f_{4,1} \\
& -10f_{1,2} + 25f_{2,2} - 20f_{3,2} + 5f_{4,2} \\
& +8f_{1,3} - 20f_{2,3} + 16f_{3,3} - 4f_{4,3} \\
& -2f_{1,4} + 5f_{2,4} - 4f_{3,4} + f_{4,4}) \\
& +O(h^2),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(2.149) \quad & \frac{\partial^4 f_{1,1}}{\partial y^4} = \frac{1}{h^4} (3f_{1,1} - 14f_{1,2} + 26f_{1,3} \\
& -24f_{1,4} + 11f_{1,5} - 2f_{1,6}) + O(h^2).
\end{aligned}$$

この (2.145)~(2.149) 式より、(2.124) 式の右辺に対する 6 次精度の近似式である次式が求まる。

$$\begin{aligned}
(2.150) \quad & 6f + \frac{h^2}{2}(f_x + f_y) + \frac{h^4}{60}(f_{xx} + 4f_{xy} + f_{yy}) \\
& = \frac{607}{60}f_{1,1} - \frac{439}{60}f_{2,1} + \frac{593}{60}f_{3,1} - \frac{211}{30}f_{4,1} + \frac{109}{40}f_{5,1} \\
& - \frac{9}{20}f_{6,1} - \frac{439}{60}f_{1,2} + \frac{5}{3}f_{2,2} - \frac{4}{3}f_{2,3} + \frac{1}{3}f_{2,4} \\
& + \frac{593}{60}f_{1,3} - \frac{4}{3}f_{2,3} + \frac{16}{15}f_{3,3} - \frac{4}{15}f_{3,4} - \frac{211}{30}f_{1,4} \\
& + \frac{1}{3}f_{2,4} - \frac{4}{15}f_{3,4} + \frac{1}{15}f_{4,4} + \frac{109}{40}f_{1,5} - \frac{9}{20}f_{1,6} + O(h^6).
\end{aligned}$$

この式を (2.124) 式に代入すれば、格子点 (h, h) での 6 次精度差分公式である次式が求まる。

$$\begin{aligned}
(2.151) \quad & \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u + \sum_2 u - 20u) \\
& = \frac{607}{60}f_{1,1} - \frac{439}{60}f_{2,1} + \frac{593}{60}f_{3,1} - \frac{211}{30}f_{4,1} + \frac{109}{40}f_{5,1}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{9}{20}f_{6,1} - \frac{439}{60}f_{1,2} + \frac{5}{3}f_{2,2} - \frac{4}{3}f_{2,3} + \frac{1}{3}f_{2,4} \\
& + \frac{593}{60}f_{1,3} - \frac{4}{3}f_{2,3} + \frac{16}{15}f_{3,3} - \frac{4}{15}f_{3,4} - \frac{211}{30}f_{1,4} \\
& + \frac{1}{3}f_{2,4} - \frac{4}{15}f_{3,4} + \frac{1}{15}f_{4,4} + \frac{109}{40}f_{1,5} - \frac{9}{20}f_{1,6} + O(h^6).
\end{aligned}$$

境界点付近の他の格子点での差分公式においても、(2.144) 式が境界点上の f の値を参照するときは、同様の手順で (2.124) 式の右辺に対する近似式を片側差分公式を使って近似することにより、境界点上の f の値を参照しない差分公式を導出することができる。4 次精度差分公式の場合と同じく、この場合も左辺の u に対する係数は全く変化せず、差分公式から得られる連立一次方程式の係数行列は規則的帯行列となる。

2.9 3 次元の場合の 2,4,6 次精度差分公式

ここでは、 n 次元のポアソン方程式に対して得られた結果を 3 次元の場合に適用するとともに、前節の方法に従ってさらに高次精度の差分公式を導く。

n 次元のポアソン方程式に対する 2 次精度差分公式 (2.67) において $n = 3$ とおくと、

$$(2.152) \quad \frac{\sum_m u}{2^{m-1}h^2 C_{m-1}} - \frac{6}{h^2 m} u = f + O(h^2)$$

となる。これより 3 次元ポアソン方程式に対する 3 種類の差分公式が得られる。

1. $m = 1$ のとき、

$$(2.153) \quad \frac{1}{h^2} (\sum_1 u - 6u) = f + O(h^2).$$

2. $m = 2$ のとき、

$$(2.154) \quad \frac{1}{h^2} (\sum_2 u - 12u) = 4f + O(h^2).$$

3. $m = 3$ のとき、

$$(2.155) \quad \frac{1}{h^2} (\sum_3 u - 8u) = 4f + O(h^2).$$

$m = 1$ の場合の公式 (2.153) は、中心差分による 2 次精度 7 点差分公式としてよく知られている。これに対して、 $m = 2$ の場合の公式 (2.154) はシングルセルの立方体の辺の中点の格子点を使った 13 点差分公式、 $m = 3$ の場合の公式 (2.155) はシングルセルの立方体の頂点の格子点を使った 9 点差分公式である。

次に、3 次元ポアソン方程式に対する 4 次精度差分公式を求める。 $n = 3$ の場合も $n = 2$ の場合と同じく、 $3m - n - 2 = 0$ となる自然数 m は存在しないから差分公式 (2.106) は適用できない。そこで、差分公式 (2.111) において $n = 3$ とおいた次式を利用する。

$$(2.156) \quad \begin{aligned} & \frac{3m_2 - 5}{3 \cdot 2^{m_1-1} {}_2C_{m_1-1}(m_2 - m_1)h^2} \sum_{m_1} u \\ & + \frac{5 - 3m_1}{3 \cdot 2^{m_2-1} {}_2C_{m_2-1}(m_2 - m_1)h^2} \sum_{m_2} u \\ & - \frac{6(3m_1 + 3m_2 - 5)}{3m_1 m_2 h^2} u = \left(1 - \frac{1}{2}\right) f + \frac{1}{12} \sum_1 f + O(h^4) \end{aligned}$$

($1 < m_1 < m_2 < 3$).

この (2.156) 式において m_1, m_2 の値を変え、式全体を定数倍することにより、次の 3 種類の差分公式が得られる。

1. $m_1 = 1, m_2 = 2$ のとき、

$$(2.157) \quad \frac{1}{3h^2} (2\sum_1 u + \sum_2 u - 24u) = f + \frac{1}{6} \sum_1 f + O(h^4).$$

2. $m_1 = 1, m_2 = 3$ のとき、

$$(2.158) \quad \frac{1}{6h^2} (8\Sigma_1 u + \Sigma_3 u - 56u) = f + \frac{1}{6}\Sigma_1 f + O(h^4).$$

3. $m_1 = 2, m_2 = 3$ のとき、

$$(2.159) \quad \frac{1}{6h^2} (4\Sigma_2 u - \Sigma_3 u - 40u) = f + \frac{1}{6}\Sigma_1 f + O(h^4).$$

この (2.157) 式は Lynch の文献 [25] によりすでに知られているが、(2.158) 式と (2.159) 式は本研究により得られた 4 次精度の差分公式である [14]。これらの差分公式の右辺は、2 次元ポアソン方程式に対する 4 次精度差分公式と同様に、同じ精度を保った様々な右辺のバリエーションがある。また、境界点の隣に位置する格子点では、境界上の f の値を参照しないように右辺を変更する必要があるのも同様である。右辺の変更の方法は、2 次元ポアソン方程式に対する差分公式の場合と同様であり、ここでは省略する。

次に、3 次元ポアソン方程式に対する 6 次精度の差分公式を導出する。なお、2 次元の場合と同様に f に対する 4 回偏微分可能性を仮定する。まず、 $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3$ に対する 8 次精度の近似式を求める。これは n 次元の場合の Σ_m に対する近似式である (2.98) 式を $n = 3$ の場合に高精度化すればよい。具体的には $\Sigma_1, \Sigma_2, \Sigma_3$ のそれぞれ関数を h^7 の項まで Taylor 展開し、和をとることによって次の三つの式が得られる。

$$(2.160) \quad \begin{aligned} \Sigma_1 u = & 6u + h^2(u_x + u_y + u_z) + \frac{h^4}{12}(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) \\ & + \frac{h^6}{360}(u_{xxx} + u_{yyy} + u_{zzz}) + O(h^8), \end{aligned}$$

$$(2.161) \quad \begin{aligned} \Sigma_2 u = & 12u + 4h^2(u_x + u_y + u_z) + \frac{h^4}{3}(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) \\ & + h^4(u_{xy} + u_{yz} + u_{zx}) + \frac{h^6}{90}(u_{xxx} + u_{yyy} + u_{zzz}) \\ & + \frac{h^6}{6}(u_{xxy} + u_{xyy} + u_{yyz} + u_{yzz} + u_{zxx} + u_{zzx}) \\ & + O(h^8), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(2.162) \quad \Sigma_3 u &= 8u + 4h^2(u_x + u_y + u_z) + \frac{h^4}{3}(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) \\
&\quad + 2h^4(u_{xy} + u_{yz} + u_{zx}) + \frac{h^6}{90}(u_{xxx} + u_{yyy} + u_{zzz}) \\
&\quad + \frac{h^6}{6}(u_{xxy} + u_{xyy} + u_{yyz} + u_{yzz} + u_{zxx} + u_{zzx}) \\
&\quad + h^6 u_{xyz} + O(h^8).
\end{aligned}$$

なお、ここで用いた u に対する添え字の X, Y, Z は、2次元の場合と同様にそれぞれ x, y, z , で2回偏微分するという意味である。

さて、ポアソン方程式に対する差分公式を導くためには、前節で4次精度差分公式を導いたときと同じように右边に現れる u の偏微分の項をポアソン方程式から導かれる関係式、

$$(2.163) \quad u_x + u_y + u_z = f,$$

$$\begin{aligned}
(2.164) \quad u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} + 2(u_{xy} + u_{yz} + u_{zx}) \\
= f_x + f_y + f_z,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(2.165) \quad u_{xxx} + u_{yyy} + u_{zzz} \\
+ u_{xxy} + u_{xyy} + u_{yyz} + u_{yzz} + u_{zzx} + u_{zxx} \\
= f_{xx} + f_{yy} + f_{zz},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(2.166) \quad u_{xxy} + u_{xyy} + u_{yyz} + u_{yzz} + u_{zzx} + u_{zxx} + 3u_{xyz} \\
= f_{xy} + f_{yz} + f_{zx}
\end{aligned}$$

を使って消去しなければならない。

ここでは、 u の偏微分の項を消去するための必要十分条件を求める。そのため、(2.160), (2.161), (2.162) 式にそれぞれ α, β, γ なる重みをつけた次式を考える。

$$\begin{aligned}
(2.167) \quad \alpha \Sigma_1 u + \beta \Sigma_2 u + \gamma \Sigma_3 u &= (6\alpha + 12\beta + 8\gamma)u \\
&\quad + h^2(\alpha + 4\beta + 4\gamma)(u_x + u_y + u_z) \\
&\quad + h^4 \left(\frac{\alpha}{12} + \frac{\beta}{3} + \frac{\gamma}{3} \right) (u_{xx} + u_{yy} + u_{zz})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +h^4(\beta + 2\gamma)(u_{XY} + u_{YZ} + u_{ZX}) \\
& +h^6\left(\frac{\alpha}{360} + \frac{\beta}{90} + \frac{\gamma}{90}\right)(u_{XXX} + u_{YYY} + u_{ZZZ}) \\
& +h^6\left(\frac{\beta}{12} + \frac{\gamma}{6}\right)(u_{XXY} + u_{XYX} + u_{YYZ} \\
& \quad + u_{YZZ} + u_{ZXX} + u_{ZZX}) \\
& +h^6\gamma u_{XYZ} + O(h^8).
\end{aligned}$$

ここで、(2.167) 式の右辺に現れた u の偏微分の項を消去するための条件を α, β, γ に関する条件として求める。まず、(2.167) 式の右辺の第 2 項の u の 2 階偏微分の項は (2.163) 式を使って消去可能である。次に、第 3, 4 項の u の 4 階偏微分の項を (2.164) 式を使って消去するためには、

$$(2.168) \quad 2\left(\frac{\alpha}{12} + \frac{\beta}{3} + \frac{\gamma}{3}\right) = \beta + 2\gamma$$

が必要条件となる。また仮に、第 5, 6, 7 項の u の 6 階偏微分の項が (2.165) 式を使って消去できたとすると、 X, Y, Z に対する対称性により、第 5, 6, 7 項の式は係数 a, b を使って次のように置くことができる。

$$\begin{aligned}
(2.169) \quad & \left(\frac{\alpha}{360} + \frac{\beta}{90} + \frac{\gamma}{90}\right)(u_{XXX} + u_{YYY} + u_{ZZZ}) + \gamma u_{XYZ} \\
& + \left(\frac{\beta}{12} + \frac{\gamma}{6}\right)(u_{XXY} + u_{XYX} + u_{YYZ} + u_{YZZ} + u_{ZXX} + u_{ZZX}) \\
& = a(f_{XX} + f_{YY} + f_{ZZ}) + b(f_{XY} + f_{YZ} + f_{ZX}).
\end{aligned}$$

ここで、(2.169) 式は (2.165), (2.166) 式を使うと、

$$\begin{aligned}
(2.170) \quad & \left(\frac{\alpha}{360} + \frac{\beta}{90} + \frac{\gamma}{90}\right)(u_{XXX} + u_{YYY} + u_{ZZZ}) + \gamma u_{XYZ} \\
& + \left(\frac{\beta}{12} + \frac{\gamma}{6}\right)(u_{XXY} + u_{XYX} + u_{YYZ} + u_{YZZ} + u_{ZXX} + u_{ZZX})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= a(u_{xxx} + u_{yyy} + u_{zzz}) + 3bu_{xyz} \\
&+ (a+b)(u_{xxy} + u_{xyy} + u_{yyz} + u_{yzz} + u_{zxx} + u_{zzx})
\end{aligned}$$

と変形できる。これより、次の関係式が導かれる。

$$(2.171) \quad a = \frac{\alpha}{360} + \frac{\beta}{90} + \frac{\gamma}{90},$$

$$(2.172) \quad a + b = \frac{\beta}{12} + \frac{\gamma}{6},$$

$$(2.173) \quad 3b = \gamma.$$

(2.168), (2.171), (2.172), (2.173) 式の四つの式が、(2.167) 式の右辺に現れた u の偏微分の項をすべて消去するための必要十分条件である。これらの四つの式を α, β, γ に関して連立して解くと、 t を 0 以外の任意のパラメータとして次の解が得られる。

$$(2.174) \quad \alpha = 14t, \quad \beta = 3t, \quad \gamma = t.$$

これより、ポアソン方程式の 6 次精度の差分公式では、シングルセル内の 27 個の格子点すべてが左辺の離散化で必要になることがわかる。ここで、(2.167) 式の右辺の u を消去した式に上の関係式 (2.174) を代入して両辺を t で割ると、

$$\begin{aligned}
(2.175) \quad &14\Sigma_1 u + 3\Sigma_2 u + \Sigma_3 u \\
&= 128u + 30h^2 f + \frac{5}{2}h^4(f_x + f_y + f_z) \\
&+ \frac{1}{12}h^6(f_{xx} + f_{yy} + f_{zz}) \\
&+ \frac{1}{3}h^6(f_{xy} + f_{yz} + f_{zx}) + O(h^8)
\end{aligned}$$

となり、ポアソン方程式に対する次の 6 次精度の近似式が得られる。

$$\begin{aligned}
(2.176) \quad & \frac{1}{h^2} (14\Sigma_1 u + 3\Sigma_2 u + \Sigma_3 u - 128u) \\
& = 30f + \frac{5h^2}{2}(f_x + f_y + f_z) + \frac{h^4}{12}(f_{xx} + f_{yy} + f_{zz}) \\
& \quad + \frac{h^4}{3}(f_{xy} + f_{yz} + f_{zx}) + O(h^6).
\end{aligned}$$

さて、ポアソン方程式に対する 6 次精度差分公式を得るためには、(2.176) 式の右辺項に対する 6 次精度の近似式を求めなければならない。そのためには、シングルセル内の 27 個の格子点における関数 f の値だけでは不可能である。ここでは、まず Lynch の考え方を一般化し、シングルセル内の中心点からの距離が $h, \sqrt{2}h, \sqrt{3}h$ となる 27 個の格子点の外に、格子点と格子点の間接点 (中心点からの距離が $\frac{1}{2}h, \frac{\sqrt{2}}{2}h, \frac{\sqrt{3}}{2}h$ となる) での関数 f の値を使った公式を導く。格子点と格子点の間接点における f の値に対しても、格子点での f の値の場合と同じく次のような記法を用いる。

$$\begin{aligned}
(2.177) \quad \Sigma_{\frac{1}{4}} f & = f(ih - \frac{1}{2}h, jh, kh) + f(ih + \frac{1}{2}h, jh, kh) \\
& \quad + f(ih, jh - \frac{1}{2}h, kh) + f(ih, jh + \frac{1}{2}h, kh) \\
& \quad + f(ih, jh, kh - \frac{1}{2}h) + f(ih, jh, kh + \frac{1}{2}h),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(2.178) \quad \Sigma_{\frac{1}{2}} f & = f(ih - \frac{1}{2}h, jh - \frac{1}{2}h, kh) + f(ih + \frac{1}{2}h, jh - \frac{1}{2}h, kh) \\
& \quad + f(ih - \frac{1}{2}h, jh + \frac{1}{2}h, kh) + f(ih + \frac{1}{2}h, jh + \frac{1}{2}h, kh) \\
& \quad + f(ih, jh - \frac{1}{2}h, kh - \frac{1}{2}h) + f(ih, jh + \frac{1}{2}h, kh - \frac{1}{2}h) \\
& \quad + f(ih, jh - \frac{1}{2}h, kh + \frac{1}{2}h) + f(ih, jh + \frac{1}{2}h, kh + \frac{1}{2}h) \\
& \quad + f(ih - \frac{1}{2}h, jh, kh - \frac{1}{2}h) + f(ih + \frac{1}{2}h, jh, kh - \frac{1}{2}h) \\
& \quad + f(ih - \frac{1}{2}h, jh, kh + \frac{1}{2}h) + f(ih + \frac{1}{2}h, jh, kh + \frac{1}{2}h),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(2.179) \quad \Sigma_{\frac{3}{4}} f & = f(ih - \frac{1}{2}h, jh - \frac{1}{2}h, kh - \frac{1}{2}h) \\
& \quad + f(ih + \frac{1}{2}h, jh - \frac{1}{2}h, kh - \frac{1}{2}h)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + f\left(ih - \frac{1}{2}h, jh + \frac{1}{2}h, kh - \frac{1}{2}h\right) \\
& + f\left(ih + \frac{1}{2}h, jh + \frac{1}{2}h, kh - \frac{1}{2}h\right) \\
& + f\left(ih - \frac{1}{2}h, jh - \frac{1}{2}h, kh + \frac{1}{2}h\right) \\
& + f\left(ih + \frac{1}{2}h, jh - \frac{1}{2}h, kh + \frac{1}{2}h\right) \\
& + f\left(ih - \frac{1}{2}h, jh + \frac{1}{2}h, kh + \frac{1}{2}h\right) \\
& + f\left(ih + \frac{1}{2}h, jh + \frac{1}{2}h, kh + \frac{1}{2}h\right).
\end{aligned}$$

(2.176) 式の右辺の近似式を求めるために、次の式を用いる。

$$(2.180) \quad \Sigma_1 f = 6f + h^2(f_x + f_y + f_z) + \frac{h^4}{12}(f_{xx} + f_{yy} + f_{zz}) + O(h^6),$$

$$(2.181) \quad \Sigma_2 f = 12f + 4h^2(f_x + f_y + f_z) + \frac{h^4}{3}(f_{xx} + f_{yy} + f_{zz}) + h^4(f_{xy} + f_{yz} + f_{zx}) + O(h^6),$$

$$(2.182) \quad \Sigma_3 f = 8f + 4h^2(f_x + f_y + f_z) + \frac{h^4}{3}(f_{xx} + f_{yy} + f_{zz}) + 2h^4(f_{xy} + f_{yz} + f_{zx}) + O(h^6),$$

$$(2.183) \quad \Sigma_{\frac{1}{2}} f = 6f + \frac{h^2}{4}(f_x + f_y + f_z) + \frac{h^4}{192}(f_{xx} + f_{yy} + f_{zz}) + O(h^6),$$

$$(2.184) \quad \Sigma_{\frac{1}{2}} f = 12f + h^2(f_x + f_y + f_z) + \frac{h^4}{48}(f_{xx} + f_{yy} + f_{zz}) + \frac{h^4}{16}(f_{xy} + f_{yz} + f_{zx}) + O(h^6),$$

$$(2.185) \quad \Sigma_{\frac{3}{4}} f = 8f + h^2(f_x + f_y + f_z) + \frac{h^4}{48}(f_{xx} + f_{yy} + f_{zz}) + \frac{h^4}{8}(f_{xy} + f_{yz} + f_{zx}) + O(h^6).$$

これらの式はいずれも左辺の関数を h^5 の項まで Taylor 展開することによって得られる。(2.180)~(2.185) 式のうち (2.180), (2.181), (2.182) 式の中から二つの式と (2.183), (2.184), (2.185) 式の中から一つの式を選んだ 9 通りの組み合わせにより、3 次元ポアソン方程式に対する 9 通りの公式が導出できる。Table 2.1 に 9 通りの差分公式を示す。ただし、表中の a_1, a_2, \dots, a_7 の欄は、差分公式を

$$\begin{aligned}
 (2.186) \quad & \frac{1}{h^2} (14\sum_1 u + 3\sum_2 u + \sum_3 u - 128u) \\
 & = a_1 \sum_1 f + a_2 \sum_2 f + a_3 \sum_3 f + a_4 \sum_{\frac{1}{2}} f \\
 & \quad + a_5 \sum_{\frac{1}{2}} f + a_6 \sum_{\frac{3}{4}} f + a_7 f
 \end{aligned}$$

と表したときの係数の値を表す。なお、Table 2.1 の (iv) 式は Lynch の文献 [25] にも記載されている。

Table 2.1: Coefficients of the right-hand side of approximate expression.

差分公式	係数 (格子点)			係数 (中間点)			a_7
	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	
(i)	$-\frac{5}{6}$	$\frac{1}{3}$		8			-17
(ii)	$-\frac{1}{3}$	$\frac{5}{24}$			2		$\frac{11}{2}$
(iii)	$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{12}$				2	12
(iv)	$-\frac{1}{6}$		$\frac{1}{6}$	8			$-\frac{55}{3}$
(v)	$\frac{1}{12}$		$\frac{5}{48}$		2		$\frac{14}{3}$
(vi)	$\frac{1}{3}$		$\frac{1}{24}$			2	$\frac{35}{3}$
(vii)		$-\frac{1}{12}$	$\frac{5}{24}$	8			$-\frac{56}{3}$
(viii)		$\frac{1}{24}$	$\frac{1}{12}$		2		$\frac{29}{6}$
(ix)		$\frac{1}{6}$	$-\frac{1}{24}$			2	$\frac{37}{3}$

さて、前節で導出した2次元ポアソン方程式に対する6次精度差分公式と同様に、3次元ポアソン方程式に対する6次精度差分公式でも、格子点と格子点の中間点上の f の値を参照しない差分公式の導出が可能である。このためには、(2.176) 式の右辺項に対する6次精度の近似式を格子点上の f の値だけを使ったものしなければならない。まず、次の略記法の定義をする。

$$\begin{aligned}
 (2.187) \quad \Sigma_4 f &= f(ih - 2h, jh, kh) + f(ih + 2h, jh, kh) \\
 &\quad + f(ih, jh - 2h, kh) + f(ih, jh + 2h, kh) \\
 &\quad + f(ih, jh, kh - 2h) + f(ih, jh, kh + 2h).
 \end{aligned}$$

ここで、2次元ポアソン方程式に対する6次精度差分公式の導出に使った差分公式(2.138)~(2.142)と同様の公式を使えば、次の近似式が得られる。

$$(2.188) \quad \frac{1}{h^2} (14\sum_1 u + 3\sum_2 u + \sum_3 u - 128u) \\ = \frac{67}{4}f + \frac{5}{3}\sum_1 f + \frac{1}{3}\sum_2 f - \frac{1}{8}\sum_4 f + O(h^6).$$

この差分公式(2.188)も、2次元ポアソン方程式に対する6次精度差分公式(2.144)式と同様に境界点付近では、右辺項を変更する必要がある。その場合も2次元ポアソン方程式に対する場合と同様に、(2.176)式の右辺に対する6次精度近似式を、定理2.1で片側差分を考えることにより求めることができる。具体的な手順は前節と同様であり、本節では省略する。

2.10 2,3次元の場合の8次精度差分公式の検討

ここでは、2,3次元のポアソン方程式に対する8次精度差分公式の実現について検討する。まず2次元の場合、8次精度差分公式を得るためには $\sum_1 u$, $\sum_2 u$ に対する8次精度近似式(2.118), (2.119)を10次精度に変更する必要がある。Taylor展開をさらに高次の項まで行うことにより、次式を得る。

$$(2.189) \quad \sum_1 u = 4u + h^2(u_x + u_y) + \frac{h^4}{12}(u_{xx} + u_{yy}) \\ + \frac{h^6}{360}(u_{xxx} + u_{yyy}) \\ + \frac{h^8}{20160}(u_{xxxx} + u_{yyyy}) + O(h^8),$$

$$(2.190) \quad \sum_2 u = 4u + 2h^2(u_x + u_y) + \frac{h^4}{6}(u_{xx} + 6u_{xy} + u_{yy}) \\ + \frac{h^6}{180}(u_{xxx} + 15u_{xxy} + 15u_{xyy} + u_{yyy}) \\ + \frac{h^8}{10080}(u_{xxxx} + 28u_{xxxxy} + 70u_{xxxyy} \\ + 28u_{xyyyy} + u_{yyyyy}) + O(h^{10}).$$

この (2.189), (2.190) 式を使い (2.120) 式の左辺を計算すれば、

$$\begin{aligned}
 (2.191) \quad & \frac{1}{h^2} (4\sum_1 u + \sum_2 u - 20u) \\
 &= 6(u_x + u_y) + \frac{h^2}{2}(u_{xx} + 2u_{xy} + u_{yy}) \\
 &\quad + \frac{h^4}{60}(u_{xxx} + 5u_{xxy} + 5u_{xyy} + u_{yyy}) \\
 &\quad + \frac{h^6}{10080}(u_{xxxx} + 28u_{xxxxy} + 70u_{xxxyy} \\
 &\quad + 28u_{xyyyy} + u_{yyyyy}) + O(h^8) \\
 &= 6f + \frac{h^2}{2}(f_x + f_y) + \frac{h^4}{60}(f_{xx} + 4f_{xy} + f_{yy}) \\
 &\quad + \frac{h^6}{10080}(3u_{xxxx} + 28u_{xxxxy} + 70u_{xxxyy} \\
 &\quad + 28u_{xyyyy} + 3u_{yyyyy}) + O(h^8)
 \end{aligned}$$

が得られる。2次元ポアソン方程式に対する8次精度差分公式を得るためには、この (2.191) 式の h^6 の項の u を f を使って消去しなければならない。消去した後の式は、 X, Y の対称性より係数 a, b を使って次のように書ける。

$$\begin{aligned}
 (2.192) \quad & 3u_{xxxx} + 28u_{xxxxy} + 70u_{xxxyy} + 28u_{xyyyy} + 3u_{yyyyy} \\
 &= a(f_{xxx} + f_{yyy}) + b(f_{xxy} + f_{xyy}) \\
 &= a(u_{xxxx} + u_{yyyy}) \\
 &\quad + (a + b)(u_{xxxxy} + u_{xyyyy}) + 2bu_{xxxyy}.
 \end{aligned}$$

これより、

$$(2.193) \quad a = 3, \quad a + b = 28, \quad 2b = 70$$

なる三つの式が得られるが、これは解を持たない。従ってこの方法による2次元ポアソン方程式に対する8次精度差分公式は不可能である。

次に3次元の場合を考える。この場合も2次元の場合と同じ手順である。まず、8次精度差分公式を得るために $\sum_1 u$, $\sum_2 u$, $\sum_3 u$ に対する8次精度近似式(2.160), (2.161), (2.162)を10次精度に変更する。2次元の場合と同様にTaylor展開をさらに高次の項まで行うことにより、次式を得る。

$$(2.194) \quad \begin{aligned} \sum_1 u &= 6u + h^2(u_x + u_y + u_z) + \frac{h^4}{12}(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) \\ &+ \frac{h^6}{360}(u_{xxx} + u_{yyy} + u_{zzz}) \\ &+ \frac{h^8}{20160}(u_{xxxx} + u_{yyyy} + u_{zzzz}) + O(h^{10}), \end{aligned}$$

$$(2.195) \quad \begin{aligned} \sum_2 u &= 12u + 4h^2(u_x + u_y + u_z) + \frac{h^4}{3}(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) \\ &+ h^4(u_{xy} + u_{yz} + u_{zx}) + \frac{h^6}{90}(u_{xxx} + u_{yyy} + u_{zzz}) \\ &+ \frac{h^6}{6}(u_{xxy} + u_{xyy} + u_{yyz} + u_{yzz} + u_{zxx} + u_{zzx}) \\ &+ \frac{h^8}{360}(u_{xxxy} + u_{xyyy} + u_{yyyz} + u_{yzzz} + u_{zzzx} + u_{zxxx}) \\ &+ \frac{h^8}{144}(u_{xxyy} + u_{yyzz} + u_{zzxx}) \\ &+ O(h^{10}), \end{aligned}$$

$$(2.196) \quad \begin{aligned} \sum_3 u &= 8u + 4h^2(u_x + u_y + u_z) + \frac{h^4}{3}(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) \\ &+ 2h^4(u_{xy} + u_{yz} + u_{zx}) + \frac{h^6}{90}(u_{xxx} + u_{yyy} + u_{zzz}) \\ &+ \frac{h^6}{6}(u_{xxy} + u_{xyy} + u_{yyz} + u_{yzz} + u_{zxx} + u_{zzx}) \\ &+ h^6 u_{xyz} \\ &+ \frac{h^8}{5040}(u_{xxxx} + u_{yyyy} + u_{zzzz}) \\ &+ \frac{h^8}{180}(u_{xxxy} + u_{xyyy} + u_{yyyz} + u_{yzzz} + u_{zzzx} + u_{zxxx}) \\ &+ \frac{h^8}{72}(u_{xxyy} + u_{yyzz} + u_{zzxx}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{h^8}{12}(u_{xxyyz} + u_{yyzxx} + u_{zzxy}) \\
& + O(h^{10}).
\end{aligned}$$

この (2.194), (2.195), (2.196) 式を使い (2.175) 式の左辺を計算すれば、次式が得られる。

$$\begin{aligned}
(2.197) \quad & \frac{1}{h^2} (14\sum_1 u + 3\sum_2 u + \sum_3 u - 128u) \\
& = 30f + \frac{5h^2}{2}(f_x + f_y + f_z) + \frac{h^4}{12}(f_{xx} + f_{yy} + f_{zz}) \\
& \quad + \frac{h^4}{3}(f_{xy} + f_{yz} + f_{zx}) \\
& \quad + \frac{h^6}{672}(u_{xxxx} + u_{yyyy} + u_{zzzz}) \\
& \quad + \frac{h^6}{72}(u_{xxxxy} + u_{xyyy} + u_{yyyz} \\
& \quad \quad + u_{yzzz} + u_{zzzx} + u_{zxxx}) \\
& \quad + \frac{5h^6}{144}(u_{xxyy} + u_{yyzz} + u_{zzxx}) \\
& \quad + \frac{h^6}{12}(u_{xxyyz} + u_{yyzxx} + u_{zzxy}) + O(h^8).
\end{aligned}$$

ポアソン方程式に対する 8 次精度差分公式を得るためには、上の式の右辺の u の偏微分に関する項を、関係式 $u_x + u_y + u_z = f$ を使ってすべて消去しなければならない。消去した後の式は、 X, Y, Z の対称性より係数 a, b, c を使って次のように書ける。

$$\begin{aligned}
(2.198) \quad & \frac{1}{672}(u_{xxxx} + u_{yyyy} + u_{zzzz}) \\
& + \frac{1}{72}(u_{xxxxy} + u_{xyyy} + u_{yyyz} + u_{yzzz} + u_{zzzx} + u_{zxxx}) \\
& + \frac{5}{144}(u_{xxyy} + u_{yyzz} + u_{zzxx}) \\
& + \frac{1}{12}(u_{xxyy} + u_{yyzz} + u_{zzxx}) \\
& = a(f_{xxx} + f_{yyy} + f_{zzz}) + cf_{xyz}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +b(f_{xxy} + f_{xyy} + f_{yyz} + f_{yzz} + f_{zxx} + f_{zzx}) \\
= & a(u_{xxxx} + u_{yyyy} + u_{zzzz}) \\
& +(a+b)(u_{xxxy} + u_{xyyy} + u_{yyyz} + u_{yzzz} + u_{zzzx} + u_{zxxy}) \\
& +2b(u_{xxyy} + u_{yyzz} + u_{zzxx}) \\
& +(2b+c)(u_{xxyy} + u_{yyzz} + u_{zzxx}).
\end{aligned}$$

これより、

$$a = \frac{1}{672}, \quad a + b = \frac{1}{72}, \quad 2b = \frac{5}{144}, \quad 2b + c = \frac{1}{12}$$

なる四つの式が得られるが、これは解を持たない。従って2次元の場合と同じく、右辺項を修正し精度を上げる方法では、3次元ポアソン方程式に対する8次精度差分公式の導出が不可能であることがわかった。

2.11 ICCG 法による数値計算

第2章の最後に、3次元ポアソン方程式のいくつかの差分公式に対する数値計算結果について述べる。ここでは、連立一次方程式の解法としてICCG(Incomplete Cholesky Conjugate Gradient)法を採用した。また、2.1節で定義したモデル問題を解いた。最初にICCG法のIC分解のベクトル化について考察する。

ICCG法で連立1次方程式を解くとき、IC分解の前進消去と後退代入のベクトル化はいわゆる超平面法を使って行われることが多い。そのとき、三つの4次精度差分公式(2.157), (2.158), (2.159)および6次精度差分公式(2.186)における方程式の左辺で使用される格子点数と超平面の数は、2.2節で定義した N (分割数)を用いて下のようによまとめられる。

差分公式	左辺の格子点数	超平面の数
(2.157) 式	19 点	$6N + 1$
(2.158) 式	15 点	$5N + 1$
(2.159) 式	21 点	$7N + 1$
6次精度公式	27 点	$7N + 1$

超平面の数が多いほどベクトル長は短くなり、計算効率は悪くなる。これからわかるように、4次精度差分公式の中で(2.159)式は、(2.157), (2.158)式に比べて、左辺で使用する格子点数も超平面の数も多いので効率がよくないと予想される。事実、実際の数値実験でも他の二つに比べて効率がよくなかった。また、第3章で(2.159)式から得られる連立一次方程式の係数行列の性質が悪いことを示す。従って、以後の実験結果の表からは(2.159)式の結果を省いた。

まず、Lynch による差分公式 (2.157) と本研究で得られた差分公式 (2.158) の比較を行う。ここでは、精度の検証のために2次精度の差分公式である通常の7点差分公式 (2.153) に対する数値計算も行った。

本節の以下の数値計算においては、IC分解のベクトル化は超平面法で行い、反復計算の収束判定条件は相対残差 L_2 ノルムが 10^{-12} 以下とした。計算はすべて倍精度で行った。ポアソン方程式の右辺項 f は下記に示した厳密解が u_1 または u_2 になるように定めた。

$$\text{厳密解 } u_1 : u_1(x, y, z) = \sin(\pi x) + \sin(\pi y) + \sin(\pi z),$$

$$\text{厳密解 } u_2 : u_2(x, y, z) = e^{x+y+z}.$$

なお、2.1節のモデル問題の定義に従い、境界条件は全周 Dirichlet 条件を課した。また、計算機は富士通の VP-2600 を用いた。

Table 2.2 に各差分公式の最大誤差を示す。ここで、15点の欄は差分公式 (2.158) の結果を、19点の欄は差分公式 (2.157) の結果を、また通常の7点の欄は差分公式 (2.153) の結果をそれぞれ表している。また、ここでは厳密解 u_1 に対して数値計算を行った。さらに、各行の下段の括弧内の数字は最上行の結果を1.0としたときの比率である。格子間隔が $\frac{1}{2}$ になるにしたがって誤差がそれぞれおよそ $(\frac{1}{2})^2$, $(\frac{1}{2})^4$ になっており差分公式が4次精度であることがわかる。また、本研究で提案した15点差分公式の誤差は、Lynch の19点差分公式の誤差と同程度であることがわかる。

Table 2.2: Maximum errors of the 2nd and 4th-order approximation.

格子 点数	格子 間隔	2次精度		4次精度	
		通常の7点	15点	19点	
5^3	$\frac{1}{4}$	6.77×10^{-2} (1.0)	2.26×10^{-3} (1.0)	2.28×10^{-3} (1.0)	
9^3	$\frac{1}{8}$	1.77×10^{-2} $(\frac{1}{1.96})^2$	1.39×10^{-4} $(\frac{1}{2.01})^4$	1.39×10^{-4} $(\frac{1}{2.01})^4$	
17^3	$\frac{1}{16}$	4.47×10^{-3} $(\frac{1}{3.89})^2$	8.66×10^{-6} $(\frac{1}{4.02})^4$	8.66×10^{-6} $(\frac{1}{4.03})^4$	

Table2.3に通常の2次精度の差分公式および4次精度の差分公式の L_2 ノルムでの誤差を示す。厳密解 u_2 に対する数値計算では誤差に多少の差はあるが、本研究で提案した15点差分公式とLynchの19点差分公式はほぼ同程度の誤差であることがわかる。

Table 2.3: Error measured in L_2 -norm.

格子 点数	厳密解	2次精度		4次精度	
		通常の7点	15点	19点	
40^3	u_1	3.56×10^{-4}	9.74×10^{-8}	9.74×10^{-8}	
	u_2	1.95×10^{-5}	5.78×10^{-9}	1.50×10^{-9}	

Table2.4に収束までに要したICCG法の反復回数とCPU時間(秒)を示す。この表から、4次精度の15点および19点差分公式に対するICCG法の反復回数は7点差分のときとほとんど変わらないこと、そして新たに提案した15点差分公式の方がLynchによる19点差分公式より計算効率が良いことがわかる。これは、15点差分公式の方が19点差分公式よりも左辺の離散化で使う点が少なく、また超平面法でベクトル化したときベクトル長が長いためである。実際にTable2.4に示した例では、15点差分公式におけるベクトル長が約320、Lynchの19点差分公式におけるベクトル長が約267となっており、約2割ほど15点差分公式の方が長く

なっている。

Table 2.4: Iteration counts and CPU time (in seconds).

格子 点数	厳密解	2 次精度		4 次精度	
		通常の 7 点	15 点	19 点	
40^3	u_1	57 回 (0.508)	56 回 (0.712)	58 回 (0.831)	
	u_2	64 回 (0.510)	64 回 (0.768)	63 回 (0.948)	

次に、Table2.1に示した 9 種類の 3 次元ポアソン方程式に対する 6 次精度の差分公式のうち、Lynch による公式 (iv) と新たに提案した 8 種類の公式の中から公式 (ii) に対する数値計算結果を示す。公式 (ii) を選んだ理由は、あとに示す Table2.6において公式 (ii) の誤差の大きさが 8 種類の公式の中でちょうど中間に位置することが多かったためである。ただし、各公式間の誤差の差は極めて小さかったことも付記する。またここでも、比較のために 2 次精度の差分公式である通常の 7 点差分公式 (2.153) に対する数値計算を同時に行った。

Table2.5に通常の 2 次精度および 6 次精度の各差分公式の最大誤差を示す。厳密解は u_1 とする。各行の下段の括弧内の数字は最上行の結果を 1.0 としたときの比率である。格子間隔が $\frac{1}{2}$ になるにしたがって誤差がそれぞれおよそ $(\frac{1}{2})^2$, $(\frac{1}{2})^6$ になっており、差分公式が 6 次精度であることがわかる。

Table 2.5: Maximum errors of the 2nd and 6th-order approximation.

格子 点数	格子 間隔	2次精度		6次精度	
		通常の7点	公式(ii)	公式(iv)	
5^3	$\frac{1}{4}$	6.77×10^{-2} (1.0)	2.79×10^{-6} (1.0)	2.79×10^{-6} (1.0)	
9^3	$\frac{1}{8}$	1.77×10^{-2} $(\frac{1}{1.96})^2$	4.26×10^{-8} $(\frac{1}{2.01})^6$	4.26×10^{-8} $(\frac{1}{2.01})^6$	
17^3	$\frac{1}{16}$	4.47×10^{-3} $(\frac{1}{1.97})^2$	6.63×10^{-10} $(\frac{1}{2.00})^6$	6.63×10^{-10} $(\frac{1}{64.9})^2$	

本研究で提案した公式(ii)とLynchによる公式(iv)の最大誤差と L_2 ノルムでの誤差をTable2.6に示す。下線を付けたところは公式(iv)と比較して値が違うところである。その他の8種類の公式についても、Lynchの公式(iv)の結果を1.0としたとき、厳密解 u_1, u_2 のどちらの場合も、最大誤差は0.9933 ~ 1.0084、 L_2 ノルムでの誤差は0.99997 ~ 1.00012の範囲に入っていた。以上のことから、新しく提案した差分公式の誤差はLynchの公式(iv)と同程度であることがわかる。なお、格子点数は 40^3 とした。

Table 2.6: Maximum and L_2 -norm errors of the 6th-order approximation.

厳密解	差分公式	最大誤差	L_2 ノルム
u_1	公式(iv)	7.6195×10^{-12}	1.79931×10^{-12}
	公式(ii)	7.6192×10^{-12}	1.79934×10^{-12}
u_1	公式(iv)	5.938×10^{-11}	1.7317×10^{-11}
	公式(ii)	5.934×10^{-11}	1.7317×10^{-11}

Table2.7に収束までに要したICCG法の反復回数とCPU時間(秒)を示す。格子点数はTable2.6と同じ 40^3 である。この表から、6次精度の差分公式を使ったときのICCG法の反復回数は7点差分のそれと同程度かわずかに少ないこと、そして本研究で提案した公式(ii)はLynchによる

公式 (iv) と計算効率が同じであることがわかる。なお、Table2.1の残りの7種類の差分公式についてもほとんど同じ結果が得られたことを付記する。

Table 2.7: Iteration counts and CPU time.

格子 点数	厳密解	2次精度	6次精度	
		通常の7点	公式 (ii)	公式 (iv)
$20 \times 20 \times 20$	u_1	31回 (.144)	31回 (.203)	31回 (.203)
	u_2	36回 (.179)	33回 (.214)	33回 (.214)
$40 \times 40 \times 40$	u_1	59回 (.422)	59回 (.963)	59回 (.963)
	u_2	66回 (.435)	60回 (1.03)	60回 (1.03)

第 3 章

係数行列の性質

本章では、第 2 章で得られた代表的な差分公式から得られる係数行列に対する性質について述べる。また、基礎的な反復解法である Jacobi 法を適用した場合の収束率についても述べる。

3.1 係数行列と Jacobi 法

本章でも、第 2 章 2.1 節で定義したモデル問題を考える。また、格子点も同じものを用いる。まず、 n 次元の場合の未知数の略記法として次を定義する。

$$(3.1) \quad u(i_1 h, i_2 h, \dots, i_n h) = u_{i_1, i_2, \dots, i_n}$$

この記法を用いて、シングルセル内の格子点 (境界点は除く) 上の未知数を次の順序で並べたベクトルを定義する。なお、ベクトルの右肩の t は転置を表す。

$$(3.2) \quad \mathbf{u} = (u_{1,1,\dots,1}, u_{2,1,\dots,1}, \dots, u_{N-1,1,\dots,1}, \\ u_{1,2,\dots,1}, u_{2,2,\dots,1}, \dots, u_{N-1,2,\dots,1}, \\ \dots \dots \dots \\ u_{1,N-1,\dots,1}, u_{2,N-1,\dots,1}, \dots, u_{N-1,N-1,\dots,1},$$

と書ける。

次に、ここで定義した natural ordering を用いて係数行列を考える。まず、2.1節で定義したモデル問題で1次元の場合を取り扱う。すなわち、

$$(3.6) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f \quad (0 < x < 1),$$

$$(3.7) \quad u(0) = g_1, \quad u(1) = g_2$$

を考える。また、差分公式としては通常の2次精度の中心差分公式である次式を使用する。

$$(3.8) \quad \frac{1}{h^2}(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}) = f_i \quad (1 \leq i \leq N-1).$$

なお、ここで用いた h, N は第2章で定義したものと同一のものである。また、

$$(3.9) \quad u(ih) = u_i, \quad f(ih) = f_i$$

とおいた。ここで、natural ordering により未知数を並べ、連立一次方程式を作ると次のようになる。

$$(3.10) \quad \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h^2 f_1 - g_1 \\ h^2 f_2 \\ \vdots \\ h^2 f_{N-2} \\ h^2 f_{N-1} - g_2 \end{pmatrix}.$$

なお、この(3.10)式における行列の次数は $N-1$ である。(3.10)式は簡単に、

$$(3.11) \quad \mathbf{A}u = \mathbf{f}$$

と書くことができる。ここで A が差分公式 (3.8) から得られる係数行列である。2次元以上の場合も同様にして係数行列を定義する。すなわち、未知数を natural ordering によって並べ、それに対する係数の行列として係数行列を定義する。

なお本研究で扱う、差分公式から得られる係数行列は、実対称かつ正則行列である。また本研究では、係数行列の性質の指標として条件数を取り上げる。実対称かつ正則な係数行列 A に対する条件数 $\text{Cond}(A)$ の定義は次の通りである。

$$(3.12) \quad \text{Cond}(A) = \frac{A \text{ の絶対値最大固有値}}{A \text{ の絶対値最小固有値}}$$

実対称かつ正則行列に対する固有値は実数になることが知られており、この場合の条件数は正の実数になる。また、条件数が小さければ小さいほど係数行列としての性質が良い (連立一次方程式の解が係数行列に対して安定である) ことが知られている [32]。

また、本章では差分公式の性質の善し悪しの指標として最も基本的な反復法である Jacobi 法を取り上げる。これは、1次元の例では、(3.8) 式において非対角成分に相当する項を右辺に移行した次の形の反復を行う方法である。

$$(3.13) \quad u_i^{(k+1)} = \frac{1}{2}(u_{i-1}^{(k)} + u_{i+1}^{(k)} - h^2 f_i).$$

ここで、未知数の右肩にかかれた数字は反復のステップ数を表す。Jacobi 法は行列の形で表現することもできる。まず、任意の行列 A に対して次のように分割を行う。

$$(3.14) \quad A = D - E - F.$$

ここで、 D は A の対角部分、 E は狭義下三角、 F は狭義上三角部分のみを取り出し残りの要素を零とした行列を表す。Jacobi 法は次のように表される。

$$(3.15) \quad \mathbf{u}^{(k+1)} = D^{-1}(E + F)\mathbf{u}^{(k)} + D^{-1}\mathbf{f}.$$

行列 $D^{-1}(E + F)$ は Jacobi 反復行列と呼ばれる。なお、この行列による表現は任意の係数行列に対して成り立つ。すなわち、任意の連立一次方程式 $Au = \mathbf{f}$ に対する Jacobi 法として (3.15) 式は用いられる。

本論文では、Jacobi 法の収束率を Jacobi 反復行列のスペクトル半径で定義する。 B を任意の Jacobi 反復行列とすると、スペクトル半径 $\rho(B)$ は B の次数を m 、 B の固有値を $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ とするとき、次で定義される。

$$(3.16) \quad \rho(B) = \max_{1 \leq i \leq m} |\lambda_i|.$$

さて、ここで (3.10) 式に対する Jacobi 反復行列を求める。(3.10) 式の係数行列 A を (3.14) 式に従って分割すると、

$$(3.17) \quad D = \begin{pmatrix} -2 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & -2 \end{pmatrix}$$

であり、また

$$(3.18) \quad E_1 = \begin{pmatrix} 0 & & & \\ -1 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad F_1 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & -1 \\ & & & 0 \end{pmatrix}$$

である。従って、Jacobi 反復行列は、

$$(3.19) \quad D^{-1}(E + F) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & & \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

となる。以下では、この (3.19) 式の $N-1$ 次正方行列を J で表す。また、 $N-1$ 次の単位行列を I で表す。すなわち、

$$(3.20) \quad I = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}, \quad J = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & & \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

と定義する。

3.2 係数行列のテンソル積による表現

ここでは、 n 次ポアソン方程式に対する一般的な形の 2 次精度差分公式である (2.69) 式から得られる係数行列を考える。(2.69) 式の左辺は、

$$(3.21) \quad \begin{aligned} & \frac{1}{h^2} \left\{ a_1 \sum_1 u + \cdots + a_n \sum_n u - \left(\sum_{m=1}^n 2^m {}_n C_m a_m \right) u \right\} \\ &= \frac{1}{h^2} \left\{ \sum_{m=1}^n a_m \left(\sum_m u - 2^m {}_n C_m u \right) \right\} \end{aligned}$$

と変形できる。以下では、この (3.21) 式から得られる係数行列を A とおく。ただし、係数行列は対角成分が 1 になるように正規化 (行単位に対角成分の値で割る) したものをを用いる。また、未知数の順序は natural ordering とする。

さて、(3.21) 式の右辺は n 次元ポアソン方程式に対する 2 次精度差分公式 (2.67) の左辺の一次結合の形である。言い換えれば、係数行列 A は (2.67) 式の係数行列の 1 次結合の形で表すことができる。以下では、(2.67) 式から得られる係数行列を A_m とおく。ここで、次が成り立つ。

$$(3.22) \quad \left(\sum_{m=1}^n a_m \right) A = \sum_{m=1}^n a_m A_m.$$

以下では、係数行列 A を簡潔に表現することを目標にする。関係式 (3.22) より、そのためには係数行列 A_m が簡潔に表現できればよいことがわかる。

まず 2 次元の場合に係数行列 A_1, A_2 を考える。この場合、 A_1, A_2 はそれぞれ (2.113) 式、(2.114) 式から得られる係数行列である。実際に行列の成分を書き下すことにより次が得られる。

$$(3.23) \quad A_1 = \begin{pmatrix} I & & \\ & \ddots & \\ & & \ddots \\ & & & I \end{pmatrix} - \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2J & I & & \\ I & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & I \\ & & & I & 2J \end{pmatrix},$$

$$(3.24) \quad A_2 = \begin{pmatrix} I & & \\ & \ddots & \\ & & \ddots \\ & & & I \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} O & J & & \\ J & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & J \\ & & & J & O \end{pmatrix}.$$

ここで、 O は $N-1$ 次の零行列を表す。この (3.23), (3.24) 式は \otimes をテンソル積 (kronecker 積) とするとき、次のように表すことができる。

$$(3.25) \quad A_1 = I \otimes I - \frac{1}{2}(I \otimes J + J \otimes I),$$

$$(3.26) \quad A_2 = I \otimes I - J \otimes J.$$

この (3.25), (3.26) 式により、2 次元の場合の係数行列 A_1, A_2 は 3.1 節で定義した行列 I, J のみを用いて表すことができるということがわかる。従って、係数行列 A も行列 I, J のみを用いて表すことができる。なお、2 次元の場合の係数行列 A_1, A_2 のテンソル積を用いた表現は、文献 [28] に記述がある。

次に 3 次元の場合を考える。この場合は、差分公式 (2.153), (2.154), (2.155) 式から得られる係数行列が A_1, A_2, A_3 である。2 次元の場合と同様に、係数行列の成分を書き下すことにより次が得られる。

$$(3.27) \quad A_1 = \begin{pmatrix} I & & \\ & \ddots & \\ & & \ddots \\ & & & I \end{pmatrix} - \frac{1}{6} \begin{pmatrix} B_1 & I_2 & & \\ I_2 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & I_2 \\ & & & I_2 & B_1 \end{pmatrix},$$

$$(3.28) \quad A_2 = \begin{pmatrix} I & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & I \end{pmatrix} - \frac{1}{12} \begin{pmatrix} B_2 & B_1 & & \\ B_1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & B_1 \\ & & B_1 & B_2 \end{pmatrix},$$

$$(3.29) \quad A_3 = \begin{pmatrix} I & & & \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & I \end{pmatrix} - \frac{1}{8} \begin{pmatrix} O_2 & B_2 & & \\ B_2 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & B_2 \\ & & B_2 & O_2 \end{pmatrix}.$$

ここで、 B_1, B_2 は

$$(3.30) \quad B_1 = \begin{pmatrix} 2J & I & & \\ I & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & I \\ & & I & 2J \end{pmatrix}, \quad B_2 = \begin{pmatrix} O & 2J & & \\ 2J & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 2J \\ & & 2J & O \end{pmatrix}$$

なる $(N-1)^2$ 次の行列である。また、 O_2 は $(N-1)^2$ 次の零行列を表す。
ここで、

$$(3.31) \quad B_1 = 2(I \otimes J + J \otimes I),$$

$$(3.32) \quad B_2 = 4J \otimes J$$

より、

$$(3.33) \quad A_1 = I \otimes I \otimes I - \frac{1}{3}(I \otimes I \otimes J + I \otimes J \otimes I + J \otimes I \otimes I),$$

$$(3.34) \quad A_2 = I \otimes I \otimes I - \frac{1}{3}(J \otimes J \otimes I + J \otimes I \otimes J + I \otimes J \otimes J),$$

$$(3.35) \quad A_3 = I \otimes I \otimes I - J \otimes J \otimes J$$

が得られる。従って、3次元の場合も、係数行列 A_1, A_2, A_3 および A を行列 I, J のみを用いて表すことができる。

これを一般の n 次元に拡張すれば、次の補題が成り立つ。

補題 3.1 n 次元ポアソン方程式に対する2次精度差分公式の係数行列 A_m は行列 I, J を使って次のように表される。

$$\begin{aligned}
 (3.36) \quad A_m = & \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I}^{n \text{ 個}} - \frac{1}{n C_m} \left(\right. \\
 & \overbrace{J \otimes \cdots \otimes J}^{m \text{ 個}} \otimes \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I}^{n-m \text{ 個}} \\
 & + \overbrace{J \otimes \cdots \otimes J}^{m-1 \text{ 個}} \otimes I \otimes J \otimes \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I}^{n-m-1 \text{ 個}} \\
 & \dots \dots \dots \\
 & \left. + \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I}^{n-m \text{ 個}} \otimes \overbrace{J \otimes \cdots \otimes J}^{m \text{ 個}} \right).
 \end{aligned}$$

n 次元の場合、係数行列 A_m は n 次元の単位行列および m 個の J と $n-m$ 個の I 個の積の一次結合であり、 I と J に関するあらゆる順序の積を含む。

3.3 係数行列の固有値

ここでは、係数行列 A に対する固有値を求める。そのためにまず、次の $N-1$ 次正方行列を定義する。

$$(3.37) \quad C = (c_{ij}), \quad c_{ij} = \sqrt{\frac{2}{N}} \sin \frac{ij\pi}{N} \quad (1 \leq i, j \leq N-1).$$

さらに、行列 C の n 個のテンソル積である行列 C_n を定義する。

$$(3.38) \quad C_n = \overbrace{C \otimes \cdots \otimes C}^{n \text{ 個}}.$$

また、 $N-1$ 次正方行列 R を次のように定義する。

$$(3.39) \quad R = \begin{pmatrix} \cos \frac{\pi}{N} & & & \\ & \cos \frac{2\pi}{N} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \cos \frac{(N-1)\pi}{N} \end{pmatrix}.$$

これらの行列に対して、次の関係式が成り立つ。

補題 3.2

$$(3.40) \quad C^{-1}JC = R,$$

$$(3.41) \quad C_n^{-1} \overbrace{(J \otimes \cdots \otimes J)}^{n \text{ 個}} C_n = \overbrace{R \otimes \cdots \otimes R}^{n \text{ 個}}.$$

証明 まず、行列 J と行列 C の j 列目の列ベクトルの積を計算する。

$$(3.42) \quad J \begin{pmatrix} \sin \frac{j\pi}{N} \\ \vdots \\ \sin \frac{ij\pi}{N} \\ \vdots \\ \sin \frac{(N-1)j\pi}{N} \end{pmatrix} \\ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ 1 & \ddots & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin \frac{j\pi}{N} \\ \vdots \\ \sin \frac{ij\pi}{N} \\ \vdots \\ \sin \frac{(N-1)j\pi}{N} \end{pmatrix} \\ = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sin \frac{2j\pi}{N} \\ \vdots \\ \sin \frac{(i-1)j\pi}{N} + \sin \frac{(i+1)j\pi}{N} \\ \vdots \\ \sin \frac{(N-2)j\pi}{N} \end{pmatrix}$$

$$(3.43) \quad = \cos \frac{j\pi}{N} \begin{pmatrix} \sin \frac{j\pi}{N} \\ \vdots \\ \sin \frac{2j\pi}{N} \\ \vdots \\ \sin \frac{(N-1)j\pi}{N} \end{pmatrix}.$$

これは、 J が固有値 $\cos \frac{j\pi}{N}$ を持ち、行列 C の j 列目のベクトルがその固有値に属する固有ベクトルであることを示している。これより、次が得られる。

$$(3.44) \quad JC = RC.$$

従って、 $C^{-1}JC = R$ が得られる。また、これより

$$(3.45) \quad \begin{aligned} C_n^{-1}(J \otimes \cdots \otimes J)C_n &= (C \otimes \cdots \otimes C)^{-1}(J \otimes \cdots \otimes J)(C \otimes \cdots \otimes C) \\ &= C^{-1}JC \otimes \cdots \otimes C^{-1}JC \\ &= R \otimes \cdots \otimes R. \end{aligned}$$

が得られる。 ■

なお、(3.40) 式はすでに知られた結果であり、例えば文献 [39] に書かれている。

次に、行列 C が直交行列であることを示す。そのためにまず、次の補題を示す。

補題 3.3 $l \in \{1, 2, \dots, 2N-1\}$ ($N \geq 2$), $s = \sum_{k=1}^{N-1} \cos \frac{kl\pi}{N}$ とおくとき、次の関係が成り立つ。

$$\begin{aligned} l \equiv 0 \pmod{2} &\Rightarrow s = -1, \\ l \equiv 1 \pmod{2} &\Rightarrow s = 0. \end{aligned}$$

証明 記号 i は、本証明部分でのみ虚数単位を表すものとする。 s の定義より、

$$\begin{aligned} s &= \sum_{k=1}^{N-1} \cos \frac{kl\pi}{N} = \operatorname{Re} \left(\sum_{k=1}^{N-1} e^{i \frac{kl\pi}{N}} \right) \\ &= \operatorname{Re} \left(\frac{e^{il\pi} - 1}{e^{i \frac{l\pi}{N}} - 1} - 1 \right) = \operatorname{Re} \left(\frac{e^{il\pi} - e^{i \frac{l\pi}{N}}}{e^{i \frac{l\pi}{N}} - 1} \right). \end{aligned}$$

まず、 $l \equiv 0 \pmod{2}$ ならば、

$$e^{il\pi} = 1$$

より $s = -1$ が得られる。次に、 $l \equiv 1 \pmod{2}$ ならば、

$$e^{il\pi} = -1$$

より、次式が得られる。

$$\begin{aligned} s &= \operatorname{Re} \left(\frac{1 + e^{i \frac{l\pi}{N}}}{1 - e^{i \frac{l\pi}{N}}} \right) = \operatorname{Re} \left(\frac{e^{-i \frac{l\pi}{2N}} + e^{i \frac{l\pi}{2N}}}{e^{-i \frac{l\pi}{2N}} - e^{i \frac{l\pi}{2N}}} \right) \\ &= \operatorname{Re} \left(\frac{2 \cos \frac{l\pi}{2N}}{-2i \sin \frac{l\pi}{2N}} \right) = \operatorname{Re} \left(i \cot \frac{l\pi}{2N} \right) = 0. \end{aligned}$$

■

また、この補題 3.3 により、次の補題が得られる。

補題 3.4 行列 C_n は直交行列である。

証明 まず、行列 C が直交行列であることを示す。 $C^2 = (d_{ij})$ とおくと、行列要素 d_{ij} は、

$$\begin{aligned}
d_{ij} &= \sum_{k=1}^{N-1} c_{ik}c_{kj} \\
&= \frac{2}{N} \sum_{k=1}^{N-1} \sin \frac{ik\pi}{N} \sin \frac{kj\pi}{N} \\
&= \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N-1} \left\{ \cos \frac{|i-j|k\pi}{N} - \cos \frac{(i+j)k\pi}{N} \right\}
\end{aligned}$$

と表せる。ここで、 $i = j$ ならば $i + j \equiv 0 \pmod{2}$ および補題 3.3 から、

$$d_{ij} = \frac{1}{N} \left\{ \sum_{k=1}^{N-1} \cos 0 - \sum_{k=1}^{N-1} \frac{(i+j)k\pi}{N} \right\} = \frac{1}{N}(N-1+1) = 1$$

が得られる。また、 $i \neq j$ ならば、

$$|i-j|, i+j \in \{1, 2, \dots, 2N-1\}$$

かつ、

$$|i-j| \equiv i+j \pmod{2}$$

より、

$$\sum_{k=1}^{N-1} \cos \frac{|i-j|\pi}{N} k = \sum_{k=1}^{N-1} \cos \frac{(i+j)\pi}{N} k$$

が得られる。ゆえに、 $d_{ij} = 0$ である。従って、

$$C^2 = I$$

が成り立つ。 $C = C^t$ であるから

$$CC^t = I$$

となり C が直交行列であることがわかる。これより、

$$\begin{aligned} C_n C_n^t &= (C \otimes \cdots \otimes C) (C \otimes \cdots \otimes C)^t \\ &= (C C^t \otimes \cdots \otimes C C^t) \\ &= (I \otimes \cdots \otimes I) \end{aligned}$$

が得られ、この式の右辺は単位行列であるから、 C_n も直交行列である。■

さて、以上の補題を使えば、次の定理が得られる。

定理 3.1 A の固有値 λ_A は、

$$(3.46) \quad \lambda_A = 1 - \frac{\sum_{m=1}^n \frac{a_m \sigma_m}{n C_m}}{\sum_{m=1}^n a_m}$$

の形で表される。ただし、 σ_m は

$$(3.47) \quad \sigma_m = \sum_{1 \leq j_1 < \cdots < j_m \leq n} \cos \frac{k_{j_1} \pi}{N} \cdots \cos \frac{k_{j_m} \pi}{N}$$

$$(1 \leq k_{j_1}, \dots, k_{j_m} \leq N - 1)$$

である。

証明 まず、 A_m の固有値を求める。 $C^{-1} A_m C$ を計算すると、補題 3.1、補題 3.2 より

$$(3.48) \quad C^{-1} A_m C = \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I}^{n \text{ 個}} - \frac{1}{n C_m} \left($$

$$\begin{aligned}
& \overbrace{R \otimes \cdots \otimes R}^{m \text{ 個}} \otimes \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I}^{n-m \text{ 個}} \\
& + \overbrace{R \otimes \cdots \otimes R}^{m-1 \text{ 個}} \otimes I \otimes R \otimes \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I}^{n-m-1 \text{ 個}} \\
& \dots\dots\dots \\
& + \overbrace{I \otimes \cdots \otimes I}^{n-m \text{ 個}} \otimes \overbrace{R \otimes \cdots \otimes R}^{m \text{ 個}}
\end{aligned}$$

が得られる。 R は対角行列であるから、この(3.48)式より $C^{-1}A_m C$ も対角行列であり、その $\varphi(k_1, k_2, \dots, k_n)$ 行目の対角成分は次のように書けることがわかる。

$$\begin{aligned}
& 1 - \frac{1}{n C_m} \sum_{1 \leq j_1 < \cdots < j_m \leq n} \cos \frac{k_{j_1} \pi}{N} \cdots \cos \frac{k_{j_m} \pi}{N} \\
& = 1 - \frac{\sigma_m}{n C_m}
\end{aligned}$$

以上により、 $1 - \frac{\sigma_m}{n C_m}$ は A_m の固有値であり、 C_n の第 $\varphi(k_1, k_2, \dots, k_n)$ 列がその固有ベクトルであることがわかる。また、補題3.4より C_n は直交ベクトルであるから、 C_n の $(N-1)^n$ 個の列ベクトルは1次独立であり、 k_{j_1}, \dots, k_{j_m} を動かしたときに $1 - \frac{\sigma_m}{n C_m}$ が C_n のすべての固有値であることがわかる。

さらに、 A と A_m の関係式(3.22)より、

$$A = \frac{\left(\sum_{m=1}^n a_m \right)}{n} \sum_{m=1}^n a_m A_m$$

であるから、 A のすべての固有値は

$$1 - \frac{\sum_{m=1}^n \frac{a_m \sigma_m}{n C_m}}{\sum_{m=1}^n a_m}$$

の形で表されることがわかる。 ■

この定理 3.1 と Jacobi 反復行列の定義より次の系が得られる。

系 3.1 A に対する Jacobi 法の反復行列 B の固有値 λ_B は、

$$(3.49) \quad \lambda_B = \frac{\sum_{m=1}^n \frac{a_m \sigma_m}{n C_m}}{\sum_{m=1}^n a_m}$$

の形で表される。

証明 λ_A, λ_B をそれぞれ行列 A, B の固有値とする。また、 I_n を $(N-1)^n$ 次の単位行列とおく。このとき、

$$(3.50) \quad |A - \lambda_A I_n| = 0,$$

$$(3.51) \quad |B - \lambda_B I_n| = 0$$

である。また、Jacobi 反復行列の定義と A の対角成分がすべて 1 であることにより、

$$(3.52) \quad B = I_n - A$$

が得られる。(3.52) 式を (3.51) に代入して変形すれば、

$$|A - (1 + \lambda_B) I_n| = 0$$

が得られる。従って、(3.50) 式より

$$\lambda_A = 1 + \lambda_B$$

が得られ、この関係式と定理より B すべての固有値が

$$(3.53) \quad \lambda_B = \frac{\sum_{m=1}^n \frac{a_m \sigma_m}{n C_m}}{\sum_{m=1}^n a_m}$$

で表されることがわかる。 ■

3.4 係数行列の条件数と Jacobi 法の収束率

ここでは、3.3節で得られた結果を、第2章で得られたいくつかの差分公式に適用する。

まず、2次元のポアソン方程式に対する差分公式である (2.113), (2.114), (2.115) 式に適用する。(2.113) 式が通常の2次精度5点差分公式、(2.114) 式がシングルセルの正方形の頂点を使った2次精度5点差分公式、(2.115) 式が4次精度9点差分公式である。(2.113), (2.114), (2.115) 式から得られる係数行列をそれぞれ、 A_{21} , A_{22} , A_{23} とおく。係数行列は対角成分を1に正規化したものを用いる。(2.113), (2.114), (2.115) 式を、 n 次元のポアソン方程式に対する一般的な形の2次精度差分公式の左辺である (3.21) 式で表したときに各係数行列に対する係数 a_1 , a_2 の値は次のようになる。

差分公式	a_1	a_2
(2.113) 式	$-\frac{1}{4}$	0
(2.114) 式	0	$-\frac{1}{4}$
(2.115) 式	$-\frac{1}{5}$	$-\frac{1}{20}$

また、係数行列 A_{21} , A_{22} , A_{23} は次のように表される。

$$(3.54) \quad A_{21} = I \otimes I - \frac{1}{2}(I \otimes J + J \otimes I),$$

$$(3.55) \quad A_{22} = I \otimes I - J \otimes J,$$

$$(3.56) \quad A_{23} = I \otimes I - \frac{2}{5}(I \otimes J + J \otimes I) - \frac{1}{5}(J \otimes J).$$

さらに、定理 3.1 より係数行列 A_{21} , A_{22} , A_{23} の固有値が次のように求められる。

係数行列	固有値
A_{21}	$1 - \frac{1}{2}(\cos \frac{k_1\pi}{N} + \cos \frac{k_2\pi}{N})$
A_{22}	$1 - \cos \frac{k_1\pi}{N} \cos \frac{k_2\pi}{N}$
A_{23}	$1 - \frac{2}{5}(\cos \frac{k_1\pi}{N} + \cos \frac{k_2\pi}{N}) - \frac{1}{5} \cos \frac{k_1\pi}{N} \cos \frac{k_2\pi}{N}$

ここで、

$$(1 \leq k_1, k_2 \leq N - 1)$$

である。

これより係数行列 A_{21} , A_{22} , A_{23} の固有値の絶対値の最大値および最小値が次のように求められる。

係数行列	最大値	最小値
A_{21}	$1 + \cos \frac{\pi}{N}$	$1 - \cos \frac{\pi}{N}$
A_{22}	$1 + \cos^2 \frac{\pi}{N}$	$1 - \cos^2 \frac{\pi}{N}$
A_{23}	$1 + \frac{4}{5} \cos \frac{\pi}{N} - \frac{1}{5} \cos^2 \frac{\pi}{N}$	$1 - \frac{4}{5} \cos \frac{\pi}{N} - \frac{1}{5} \cos^2 \frac{\pi}{N}$

固有値の絶対値の最大値と最小値の比が条件数であるから、ここで係数行列 A_{21} , A_{22} , A_{23} の条件数が求まる。Table 3.1 に条件数、 $N \rightarrow \infty$ のときの条件数の近似式および $N = 100$ のときの条件数を示す。

Table 3.1: Condition numbers of coefficient matrix A_{21} , A_{22} , A_{23} .

係数行列	条件数	$N \rightarrow \infty$	$N = 100$
A_{21}	$\frac{1 + \cos \frac{\pi}{N}}{1 - \cos \frac{\pi}{N}}$	$\sim \frac{4N^2}{\pi^2}$	4052
A_{22}	$\frac{1 + \cos^2 \frac{\pi}{N}}{1 - \cos^2 \frac{\pi}{N}}$	$\sim \frac{2N^2}{\pi^2}$	2026
A_{23}	$\frac{5 + 4 \cos \frac{\pi}{N} - \cos^2 \frac{\pi}{N}}{5 - 4 \cos \frac{\pi}{N} - \cos^2 \frac{\pi}{N}}$	$\sim \frac{8N^2}{3\pi^2}$	2702

係数行列 A_{22} の条件数は係数行列 A_{21} の条件数の約半分の値である。これは、同じ 2 次精度差分公式で比較した場合、(2.114) 式を使用した方が (2.113) を使用するより、係数行列の性質が良いということを示している。すなわち、2 次精度差分公式においては、通常の 5 点差分公式よりもシングルセルの正方形の頂点を使った差分公式を使った方が係数行列の性質が良い。また、係数行列 A_{23} の条件数は係数行列 A_{22} の条件数と A_{21} の条件数の中間にあり、4 次精度差分公式から得られる係数行列の性質は、シングルセルの正方形の頂点を使った差分公式から得られる係数行列の性質より悪いが、5 点差分公式から得られる係数行列の性質よりは良いといえる。

次に、Jacobi 法における収束率を求める。係数行列 A_{21} , A_{22} , A_{23} に対する Jacobi 反復行列を B_{21} , B_{22} , B_{23} とおく。系 3.1 より B_{21} , B_{22} , B_{23} のスペクトル半径、すなわち係数行列 A_{21} , A_{22} , A_{23} に対する Jacobi 法の収束率が求まる。Table 3.2 に収束率、 $N \rightarrow \infty$ のときのスペクトル半径の近似式および $N = 100$ のときのスペクトル半径の値を示す。

Table 3.2: Spectral radius of matrix B_{21}, B_{22}, B_{23} .

反復行列	収束率	$N \rightarrow \infty$	$N = 100$
B_{21}	$\cos \frac{\pi}{N}$	$\sim 1 - \frac{\pi^2}{2N^2}$	0.9995
B_{22}	$\cos^2 \frac{\pi}{N}$	$\sim 1 - \frac{\pi^2}{N^2}$	0.9990
B_{23}	$\frac{4}{5} \cos \frac{\pi}{N} + \frac{1}{5} \cos^2 \frac{\pi}{N}$	$\sim 1 - \frac{3\pi^2}{5N^2}$	0.9994

Jacobi 法の収束の善し悪しは、係数行列の性質の善し悪しと全く同じ傾向にあることがわかる。すなわち、シングルセルの正方形の頂点を使った 2 次精度差分公式を使った場合が Jacobi 法の収束は最も速く、次いで 4 次精度差分公式、通常の 2 次精度 5 点差分公式という順になることがわかる。

次に、3 次元のポアソン方程式に対する 2 次精度および 4 次精度差分公式の係数行列に対する条件数および Jacobi 法の収束率を求める。2 次精度差分公式では、(2.153), (2.154), (2.155) 式、4 次精度差分公式では (2.157), (2.158), (2.159) 式を取り上げる。

まず、2 次精度差分公式に対して条件数、Jacobi 法の収束率の比較を行う。(2.153), (2.154), (2.155) 式から得られる係数行列を A_{31}, A_{32}, A_{33} とおく。ここで、(2.153) 式が通常の 7 点差分公式、(2.154) 式がシングルセルの立方体の辺の中点を使った 13 点差分公式、(2.155) 式がシングルセルの立方体の頂点を使った 9 点差分公式である。なお、係数行列は対角成分を 1 に正規化したものを用いた。(2.153), (2.154), (2.155) 式を、 n 次元のポアソン方程式に対する一般的な形の 2 次精度差分公式の左辺である (3.21) 式で表したときに各係数行列に対する係数 a_1, a_2, a_3 の値は次のようになる。

差分公式	a_1	a_2	a_3
(2.153) 式	$-\frac{1}{6}$	0	0
(2.154) 式	0	$-\frac{1}{12}$	0
(2.155) 式	0	0	$-\frac{1}{8}$

また、係数行列 A_{31} , A_{32} , A_{33} は次のように表される。

$$(3.57) \quad A_{31} = I \otimes I \otimes I - \frac{1}{3}(I \otimes I \otimes J + I \otimes J \otimes I + J \otimes I \otimes I),$$

$$(3.58) \quad A_{32} = I \otimes I \otimes I - \frac{1}{3}(J \otimes J \otimes I + J \otimes I \otimes J + I \otimes J \otimes J),$$

$$(3.59) \quad A_{33} = I \otimes I \otimes I - J \otimes J \otimes J.$$

さらに、定理 3.1 より係数行列 A_{31} , A_{32} , A_{33} の固有値が次のように求められる。

係数行列	固有値
A_{31}	$1 - \frac{1}{3}(\cos \frac{k_1\pi}{N} + \cos \frac{k_2\pi}{N} + \cos \frac{k_3\pi}{N})$
A_{32}	$1 - \frac{1}{3}(\cos \frac{k_1\pi}{N} \cos \frac{k_2\pi}{N} + \cos \frac{k_2\pi}{N} \cos \frac{k_3\pi}{N} + \cos \frac{k_3\pi}{N} \cos \frac{k_1\pi}{N})$
A_{33}	$1 - \cos \frac{k_1\pi}{N} \cos \frac{k_2\pi}{N} \cos \frac{k_3\pi}{N}$

ここで、

$$(1 \leq k_1, k_2, k_3 \leq N - 1)$$

である。

これより係数行列 A_{31} , A_{32} , A_{33} の固有値の絶対値の最大値および最小値が次のように求められる。

係数行列	最大値	最小値
A_{31}	$1 + \cos \frac{\pi}{N}$	$1 - \cos \frac{\pi}{N}$
A_{32}	$1 + \cos^2 \frac{\pi}{N}$	$1 - \cos^2 \frac{\pi}{N}$
A_{33}	$1 + \cos^3 \frac{\pi}{N}$	$1 - \cos^3 \frac{\pi}{N}$

固有値の絶対値の最大値と最小値から、係数行列 A_{31} , A_{32} , A_{33} の条件数を求めることができる。Table 3.3 に条件数、 $N \rightarrow \infty$ のときの条件数の近似式および $N = 100$ のときの条件数を示す。

Table 3.3: Condition numbers of coefficient matrix A_{31} , A_{32} , A_{33} .

係数行列	条件数	$N \rightarrow \infty$	$N = 100$
A_{31}	$\frac{1 + \cos \frac{\pi}{N}}{1 - \cos \frac{\pi}{N}}$	$\sim \frac{4N^2}{\pi^2}$	4052
A_{32}	$\frac{1 + \cos^2 \frac{\pi}{N}}{1 - \cos^2 \frac{\pi}{N}}$	$\sim \frac{2N^2}{\pi^2}$	2026
A_{33}	$\frac{1 + \cos^3 \frac{\pi}{N}}{1 - \cos^3 \frac{\pi}{N}}$	$\sim \frac{4N^2}{3\pi^2}$	1351

係数行列 A_{31} , A_{32} , A_{33} の条件数の比は、ほぼ $6 : 3 : 2$ である。すなわち、2 次精度差分公式においては、シングルセルの立方体の頂点を使った 9 点差分公式から得られる係数行列の性質がもっともよく、次いでシングルセルの立方体の辺の中点を使った 13 点差分公式、通常の 7 点差分公式の順に得られる係数行列の性質が悪くなっていくということがわかる。

次に、Jacobi 法における収束率を求める。係数行列 A_{31} , A_{32} , A_{33} に対する Jacobi 反復行列を B_{31} , B_{32} , B_{33} とおく。系 3.1 より B_{31} , B_{32} , B_{33} のスペクトル半径、すなわち係数行列 A_{31} , A_{32} , A_{33} に対する Jacobi 法の収束率が求まる。Table 3.4 に収束率、 $N \rightarrow \infty$ のときのスペクトル半径の近似式および $N = 100$ のときのスペクトル半径の値を示す。

Table 3.4: Spectral radius of matrix B_{31}, B_{32}, B_{33} .

反復行列	収束率	$N \rightarrow \infty$	$N = 100$
B_{31}	$\cos \frac{\pi}{N}$	$\sim 1 - \frac{\pi^2}{2N^2}$	0.9995
B_{32}	$\cos^2 \frac{\pi}{N}$	$\sim 1 - \frac{\pi^2}{N^2}$	0.9990
B_{33}	$\cos^3 \frac{\pi}{N}$	$\sim 1 - \frac{3\pi^2}{2N^2}$	0.9985

2次元ポアソン方程式に対する場合と同じく、Jacobi法の収束の善し悪しは、係数行列の性質の善し悪しと全く同じ傾向にあることがわかる。すなわち、シングルセルの立方体の頂点を使った9点差分公式を使った場合がJacobi法の収束は最も速く、次いでシングルセルの立方体の辺の中点を使った13点差分公式、通常の7点差分公式という順になることがわかる。これは、シングルセルの中心点からの距離が遠い格子点を使った差分公式の方が数値計算に適用する上で有利になるということを示している。

次に、3次元のポアソン方程式に対する4次精度差分公式の係数行列に対する条件数およびJacobi法の収束率を求める。差分公式として、(2.157), (2.158), (2.159)式を使う。それぞれの差分公式から得られる係数行列を A_{34}, A_{35}, A_{36} とおく(2.157)式がLynchによる19点差分公式、(2.158)式が本研究で得られた15点差分公式、(2.159)式が同じく本研究で得られた21点差分公式である。なお、(2.159)式は Σ_2 と Σ_3 の係数の符号が異なっており、係数行列が M 行列とはならない。従って、(2.159)式から得られる係数行列の性質は悪いということが予想される。ここでも係数行列は対角成分を1に正規化したものを用いた。(2.157), (2.158), (2.159)式を、 n 次元のポアソン方程式に対する一般的な形の2次精度差分公式の左辺である(3.21)式で表したときに各係数行列に対する係数 a_1, a_2, a_3 は次のようになる。

差分公式	a_1	a_2	a_3
(2.157) 式	$-\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{24}$	0
(2.158) 式	$-\frac{1}{7}$	0	$-\frac{1}{56}$
(2.159) 式	0	$-\frac{1}{10}$	$\frac{1}{40}$

また、係数行列 A_{34} , A_{35} , A_{36} は次のように表される。

$$(3.60) \quad A_{34} = I \otimes I \otimes I - \frac{1}{6}(I \otimes I \otimes J + I \otimes J \otimes I + J \otimes I \otimes I) \\ - \frac{1}{6}(J \otimes J \otimes I + J \otimes I \otimes J + I \otimes J \otimes J),$$

$$(3.61) \quad A_{35} = I \otimes I \otimes I - \frac{2}{7}(I \otimes I \otimes J + I \otimes J \otimes I + J \otimes I \otimes I) \\ - \frac{1}{7}(J \otimes J \otimes J),$$

$$(3.62) \quad A_{36} = I \otimes I \otimes I - \frac{2}{5}(J \otimes J \otimes I + J \otimes I \otimes J + I \otimes J \otimes J) \\ + \frac{1}{5}(J \otimes J \otimes J).$$

さらに、定理 3.1 より係数行列 A_{34} , A_{35} , A_{36} の固有値が次のように求められる。

係数行列	固有値
A_{34}	$1 - \frac{1}{6}(\sigma_1 + \sigma_2)$
A_{35}	$1 - \frac{1}{7}(2\sigma_1 + \sigma_3)$
A_{36}	$1 - \frac{1}{5}(2\sigma_2 - \sigma_3)$

ここで、

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= \cos \frac{k_1\pi}{N} + \cos \frac{k_2\pi}{N} + \cos \frac{k_3\pi}{N}, \\ \sigma_2 &= \cos \frac{k_1\pi}{N} \cos \frac{k_2\pi}{N} + \cos \frac{k_2\pi}{N} \cos \frac{k_3\pi}{N} + \cos \frac{k_3\pi}{N} \cos \frac{k_1\pi}{N}, \\ \sigma_3 &= \cos \frac{k_1\pi}{N} \cos \frac{k_2\pi}{N} \cos \frac{k_3\pi}{N},\end{aligned}$$

$$(1 \leq k_1, k_2, k_3 \leq N - 1)$$

である。

これより係数行列 A_{34} , A_{35} の固有値の絶対値の最大値と最小値および係数行列 A_{36} の固有値の最小値が次のように求められる。

係数行列	最大値	最小値
A_{34}	$1 + \frac{1}{6} \cos \frac{\pi}{N} + \frac{1}{6} \cos^2 \frac{\pi}{N}$	$1 - \frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{N} - \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\pi}{N}$
A_{35}	$1 + \frac{6}{7} \cos \frac{\pi}{N} + \frac{1}{7} \cos^3 \frac{\pi}{N}$	$1 - \frac{6}{7} \cos \frac{\pi}{N} - \frac{1}{7} \cos^3 \frac{\pi}{N}$
A_{36}	$1 + \frac{2}{5} \cos^2 \frac{\pi}{N} + \frac{1}{5} \cos^3 \frac{\pi}{N}$	—

係数行列 A_{36} については、最小値を与える k_1, k_2, k_3 が N によって一定せず、固有値の最小値を簡潔な式で表すことができない。例えば、 $N = 100$ での固有値が最小になるのは $k_1 = 72, k_2 = 93, k_3 = 93$ のときで、そのときの固有値は約 0.00004186 という小さな値になる。係数行列 A_{34}, A_{35} の条件数は次のようになる。Table3.5に条件数、 $N \rightarrow \infty$ のときの条件数の近似式および $N = 100$ のときの条件数を示す。

Table 3.5: Condition numbers of coefficient matrix A_{31}, A_{32}, A_{33} .

係数行列	条件数	$N \rightarrow \infty$	$N = 100$
A_{34}	$\frac{6 + \cos \frac{\pi}{N} + \cos^2 \frac{\pi}{N}}{6 - 3 \cos \frac{\pi}{N} - 3 \cos^2 \frac{\pi}{N}}$	$\sim \frac{16N^2}{9\pi^2}$	1801
A_{35}	$\frac{7 + 6 \cos \frac{\pi}{N} + \cos^3 \frac{\pi}{N}}{7 - 6 \cos \frac{\pi}{N} - \cos^3 \frac{\pi}{N}}$	$\sim \frac{28N^2}{9\pi^2}$	3152

条件数を比較した場合、Lynch の差分公式から得られる係数行列の条件数が本研究で提案した差分公式から得られる係数行列の条件数の約半分であり、それだけ係数行列の性質が良いということがわかる。なお、係数行列 A_{36} の条件数は例えば、 $N = 100$ のとき、約 38205 となり、係数行列 A_{34}, A_{35} の条件数に対してかなり大きく、係数行列の性質は他の係数行列の性質に比べてかなり悪いといえる。

次に、Jacobi 法における収束率を求める。係数行列 A_{34}, A_{35} に対する Jacobi 反復行列を B_{34}, B_{35} とおく。系 3.1 より B_{34}, B_{35} のスペクトル半径、すなわち係数行列 A_{34}, A_{35} に対する Jacobi 法の収束率が求まる。Table 3.6 に収束率、 $N \rightarrow \infty$ のときのスペクトル半径の近似式および $N = 100$ のときのスペクトル半径の値を示す。

Table 3.6: Spectral radius of matrix B_{34}, B_{35} .

反復行列	収束率	$N \rightarrow \infty$	$N = 100$
B_{34}	$\frac{1}{2} \cos \frac{\pi}{N} + \frac{1}{2} \cos^2 \frac{\pi}{N}$	$\sim 1 - \frac{3\pi^2}{4N^2}$	0.9993
B_{35}	$\frac{6}{7} \cos \frac{\pi}{N} + \frac{1}{7} \cos^3 \frac{\pi}{N}$	$\sim 1 - \frac{9\pi^2}{14N^2}$	0.9994

これまでと異なり、Jacobi 法の収束率と条件数の大きさは異なる傾向になる。係数行列 A_{34} の条件数に比べて A_{35} の条件数は、約 2 倍の値であったが、Jacobi 法の収束率では、わずかに係数行列 A_{34} に対するものの方が良いとはいえ差がほとんどなくなっていることがわかる。これは、他の反復法についてもいえることである。2 次精度差分公式においては、係数行

列の条件数の善し悪しといろいろな反復法との収束率の善し悪しが一致するが、4次精度差分公式においては一致しない。例えば第2章で行ったICCG法による数値計算では、係数行列 A_{34} の元となる差分公式 (2.157) と係数行列 A_{35} の元となる差分公式 (2.158) を使ったときの収束までの反復回数はほとんど同じであることがすでに示されている (Table 2.4)。またSORの収束率では、逆に本研究で得られた差分公式 (2.158) に対するSOR法がLynchの差分公式 (2.157) に対するSOR法よりも速く収束することを第4章で示す。なお、係数行列 A_{36} に対するJacobi法は $N \geq 6$ で発散する。このように差分公式 (2.159) は、係数行列の性質も悪く、数値計算に適しているとは言い難い。従って、今後の検討対象からはずすこととする。

3.5 CG法による数値計算

本章の最後に、3次元ポアソン方程式に対する2次精度差分公式である (2.153), (2.154) 式を使った場合の数値計算結果を述べる。この二つの式はそれぞれ通常の7点差分公式、シングルセルの立方体の頂点を使った9点差分公式である。前節の結果では、係数行列の条件数、Jacobi法の収束率ともに (2.154) 式を使った方が良いという結論であった。本節では、実際の数値計算で頻繁に使用されているCG法、ICCG法において、同様の傾向になるかどうかを数値実験により検討した。

以下に示す数値計算においては、第2章の2.1節で定義したモデル問題で3次元の場合を解いた。反復計算の収束判定は相対残差 L_2 ノルムが 10^{12} 以下とし、格子点数は 40^3 個とした。また、計算は倍精度で行った。ポアソン方程式の右辺項 f は、下記に示した厳密解が u_1 または u_2 になるように定めた。

$$\begin{aligned} \text{厳密解 } u_1 : u_1(x, y, z) &= e^x \sin(\pi y) \sin(\pi z) + e^y \sin(\pi z) \sin(\pi x) \\ &\quad + e^z \sin(\pi x) \sin(\pi y), \end{aligned}$$

$$\text{厳密解 } u_2 : u_2(x, y, z) = \sin(\pi x) + \sin(\pi y) + \sin(\pi z).$$

なお、計算機は富士通のVP-2600を用いた。Table 3.7に各反復法における反復回数とCPU時間(秒)を示す。カッコ内の数字は、通常の7点差分公式の結果を1.0としたときの比率を表す。

Table 3.7: Iteration counts and CPU time (in seconds).

問題		7 点		9 点	
		CG	ICCG	CG	ICCG
A	Iterations	234	64	152 (.65)	44 (.69)
	CPU	1.73	.398	1.14 (.66)	.273 (.69)
B	Iterations	75	66	53 (0.71)	35 (0.53)
	CPU	.457	.435	.311 (.68)	.226 (.52)

シングルセルの立方体の頂点を使った 9 点差分公式の方が、通常の 7 点差分公式に比べて反復回数が少なく、CPU 時間も短い。従って、CG 法、ICCG 法を使う場合は、Table3.3, Table3.4が示す傾向通り、9 点差分公式の方が数値計算に適した差分公式であるといえる。

第 4 章

SOR 法の収束率

本章では、3次元ポアソン方程式に対する差分公式にSOR法を適用した場合の収束率、最適加速係数について述べる。また、ベクトル化のための手法であるマルチカラー法の一般化についても述べる。

4.1 SOR 法に対する既知の理論

本章においても、第2章2.1節で定義したモデル問題を考える。このモデル問題を第2章で得られた差分公式によって離散化し、得られた連立一次方程式をSOR法を用いて解くことを考える。問題が2次元の場合には、すでに文献 [1],[35],[39] 等で、SOR法の最適加速係数、収束率、マルチカラー法等に関する研究結果が報告されている。そこで本論文では、3次元のモデル問題に対する2次精度、4次精度差分公式にSOR法を適用した場合の研究結果を述べる。

まず、SOR法およびマルチカラー法を説明するために、1次元のモデル問題、

$$(4.1) \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f \quad (0 < x < 1),$$

$$(4.2) \quad u(0) = g_1, \quad u(1) = g_2$$

を考える。ポアソン方程式に対する差分公式として、通常の2次精度の

中心差分公式である

$$\frac{1}{h^2}(u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1}) = f_i \quad (1 \leq i \leq N-1)$$

を使用する。また、第3章と同じく

$$u(ih) = u_i, \quad f(ih) = f_i$$

と定義する。SOR法は、次の形の反復を行う方法である。

$$(4.3) \quad \begin{aligned} u_i^{(k+1)} &= u_i^{(k)} + \frac{\omega}{2}(u_{i-1}^{(k+1)} - 2u_i^{(k)} + u_{i+1}^{(k)} - f_i h^2) \\ &= (1 - \omega)u_i^{(k)} + \frac{\omega}{2}(u_{i-1}^{(k+1)} + u_{i+1}^{(k)} - f_i h^2). \end{aligned}$$

ここで、未知数の右肩にかかれた数字は反復のステップ数を表す。また、 ω はSOR法の加速係数と呼ばれ、 $1 < \omega < 2$ の範囲で収束を加速するために使われる。

SOR法もJacobi法と同じく、行列の形で表現することができる。まず、任意の行列 A に対して (3.14) 式と同じく、次のように分割を行う。

$$(4.4) \quad A = D - E - F.$$

ここで、 D は A の対角部分、 E は狭義下三角、 F は狭義上三角部分のみを取り出し残りの要素を零とした行列を表す。SOR法は次のように表される。

$$(4.5) \quad \mathbf{u}^{(k+1)} = (D - \omega E)^{-1} \{(1 - \omega)D + \omega F\} \mathbf{u}^{(k)} + \omega(D - \omega E)^{-1} \mathbf{f}.$$

行列 $S_\omega = (D - \omega E)^{-1} \{(1 - \omega)D + \omega F\}$ はSOR反復行列と呼ばれる。

SOR法の収束率についてもJacobi法の場合と同じく、SOR反復行列のスペクトル半径 $\rho(S_\omega)$ で定義する。 $\rho(S_\omega)$ を最小にする ω は最適加速係

数と呼ばれる。本論文では最適加速係数を ω_{opt} で表す。SOR 法の最適加速係数、収束率に関しては Young[44], Varga[39] の理論がよく知られており、ここでもそれを利用して SOR 法の収束率の評価を行う。以下、本節ではこれらの既知の理論を述べる。なお、本節の命題はすべて文献 [44], [39] からの抜粋であり、証明は省略する。

まず、係数行列 A に対して 2 巡回および整合順序の定義を述べる。係数行列 A が 2 巡回行列であるとは、適当な置換行列 Q が存在して、

$$(4.6) \quad QAQ^{-1} = \begin{pmatrix} I_{11} & A_{12} \\ A_{21} & I_{22} \end{pmatrix}$$

とできるときをいう。ここで I_{11} , I_{22} は単位行列を表す。本論文では、(4.6) 式の右辺の行列の形を 2 巡回標準行列と呼ぶ。

また、2 巡回行列 A が整合順序であるとは、行列

$$(4.7) \quad B(\alpha) = \alpha D^{-1}E + \alpha^{-1}D^{-1}F \quad (\alpha \neq 0)$$

の固有値が α に無関係であるときをいう。

整合順序行列であるための十分条件として次が知られている。

命題 4.1 2 巡回標準行列は整合順序である。

また、2 巡回整合順序行列に関して次の事実が知られている。ここで、 B は係数行列 A に対する Jacobi 反復行列を表す。

命題 4.2 行列 A が 2 巡回整合順序ならば次が成り立つ。

$$(4.8) \quad \omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho(B)^2}},$$

$$(4.9) \quad \rho(S_{\omega_{opt}}) = \frac{1 - \sqrt{1 - \rho(B)^2}}{1 + \sqrt{1 - \rho(B)^2}} = \omega_{opt} - 1.$$

命題 4.3 行列 A が対称かつ $B \geq O$, $0 < \rho(B) < 1$ ならば次が成り立つ。
ここで、 O は零行列を表す。

$$(4.10) \quad \frac{1 - \sqrt{1 - \rho(B)^2}}{1 + \sqrt{1 - \rho(B)^2}} \leq \rho(S_\omega) < \frac{\rho(B)}{1 + \sqrt{1 - \rho(B)^2}}.$$

等号は A が 2 巡回整合順序かつ $\omega = \omega_{opt}$ のときに限り成り立つ。

行列 A が 2 巡回または整合順序ということに関してはグラフ理論による判定法がある。

命題 4.4 行列 A のすべての要素 $a_{ij} \neq 0$ について、

$$\begin{aligned} i > j \text{ ならば } P_i &\longrightarrow P_j, \\ i < j \text{ ならば } P_j &\implies P_i \end{aligned}$$

と書き平面グラフを作る。このとき、‘すべての閉じた道の矢印の個数が偶数である’ということと‘ A が 2 巡回である’ということは同値である。さらに、‘ A が 2 巡回でありかつすべての閉じた道が \longrightarrow と \implies を同数含む’ということと‘ A が整合順序である’ということは同値である。

なお本章で取り扱う差分公式は、3 次元ポアソン方程式に対する 2 次精度差分公式である

$$(4.11) \quad \frac{1}{h^2} (\sum_1 u - 6u) = f + O(h^2),$$

$$(4.12) \quad \frac{1}{h^2} (\sum_2 u - 12u) = 4f + O(h^2),$$

$$(4.13) \quad \frac{1}{h^2} (\sum_3 u - 8u) = 4f + O(h^2)$$

および 3 次元ポアソン方程式に対する 4 次精度差分公式である

$$(4.14) \quad \frac{1}{3h^2} (2\sum_1 u + \sum_2 u - 24u) = f + \frac{1}{6}\sum_1 f + O(h^4),$$

$$(4.15) \quad \frac{1}{6h^2} (8\sum_1 u + \sum_3 u - 56u) = f + \frac{1}{6}\sum_1 f + O(h^4)$$

の五式とする。(4.11), (4.12), (4.13), (4.14), (4.15) 式はそれぞれ、第2章で(2.153), (2.154), (2.155), (2.157), (2.158) 式として導出した差分公式である。(4.11) 式が通常の2次精度7点差分公式、(4.12) 式がシングルセルの立方体の辺の中点を使った2次精度13点差分公式、(4.13) 式がシングルセルの立方体の頂点を使った2次精度9点差分公式、(4.14) 式がLynchの4次精度19点差分公式、そして(4.15) 式が本研究で得られた4次精度15点差分公式である。すでに第3章において、これらの差分公式から得られる係数行列の性質とJacobi法の収束率を調べた。ここでは、その結果を利用して、SOR法における最適加速係数、収束率を調べる。なお第3章と同じく、差分公式(4.11)~(4.15)式から得られる係数行列をそれぞれ A_{31} , A_{32} , A_{33} , A_{34} , A_{35} とおく。

4.2 マルチカラー法

ここでは、SOR法のベクトル計算機での実効速度を上げるための手法であるマルチカラー法を説明する。これは、未知数を並べる順序を変えることによって、再帰参照関係を取り除く、という方法である。具体的には、差分で用いる格子点を何色かの色で色分けし、各色毎に計算を行う方法である。ベクトル計算機でベクトル化するためには、ある色のついた格子点での未知数の値を更新する際に、自分自身の色は参照しないように色分けをしなければならない。本節では、任意の差分公式に対してベクトル化のためのマルチカラー法における色数と色分け方法を与える一般的な定理を証明する。

まず、もっとも簡単なマルチカラー法であるred-black orderingによるマルチカラー法(red black法)について説明する。4.1節で取り上げた1次元のモデル問題に対するSOR法は、

$$(4.16) \quad u_i^{(k+1)} = (1 - \omega)u_i^{(k)} + \frac{\omega}{2}(u_{i-1}^{(k+1)} + u_{i+1}^{(k)} - f_i h^2)$$

と書かれる。これは、通常の順序であるnatural orderingによるSOR法では、

$$\begin{aligned}
u_1^{(k+1)} &= (1 - \omega)u_1^{(k)} + \frac{\omega}{2}(u_0 + u_2^{(k)} - f_1 h^2) \\
u_2^{(k+1)} &= (1 - \omega)u_2^{(k)} + \frac{\omega}{2}(u_1^{(k+1)} + u_3^{(k)} - f_2 h^2) \\
u_3^{(k+1)} &= (1 - \omega)u_3^{(k)} + \frac{\omega}{2}(u_2^{(k+1)} + u_4^{(k)} - f_3 h^2) \\
&\vdots
\end{aligned}$$

という順で計算される。この一連の計算におけるベクトル化は不可能である。例えば、 u_2^{k+1} を計算する際に u_1^{k+1} の値を参照するが、この値はこの一連の計算中に更新されるため、再帰参照関係が生じている。これを解消するために次のような ordering を考える。

まず、格子点を Figure4.1のように交互に赤色 (R) と黒色 (B) の2色に色分けする。

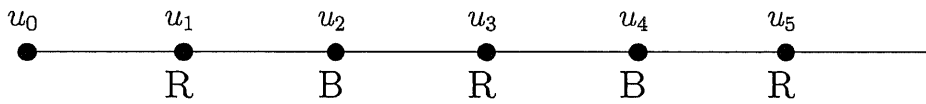


Figure 4.1: Coloring on the red-black ordering in 1-dimension.

そして、まず赤色 (R) のついた格子点上の未知数の値を左から更新し、次いで黒色 (B) のついた格子点上の未知数の値を更新する。すなわち、まず

$$\begin{aligned}
u_1^{(k+1)} &= (1 - \omega)u_1^{(k)} + \frac{\omega}{2}(u_0 + u_2^{(k)} - f_1 h^2), \\
u_3^{(k+1)} &= (1 - \omega)u_3^{(k)} + \frac{\omega}{2}(u_2^{(k)} + u_4^{(k)} - f_3 h^2), \\
u_5^{(k+1)} &= (1 - \omega)u_5^{(k)} + \frac{\omega}{2}(u_4^{(k)} + u_6^{(k)} - f_5 h^2), \\
&\vdots
\end{aligned}$$

を計算し、次いで

$$u_2^{(k+1)} = (1 - \omega)u_2^{(k)} + \frac{\omega}{2}(u_1^{(k+1)} + u_3^{(k+1)} - f_2 h^2),$$

$$\begin{aligned}
u_4^{(k+1)} &= (1 - \omega)u_4^{(k)} + \frac{\omega}{2}(u_3^{(k+1)} + u_5^{(k+1)} - f_4h^2), \\
u_6^{(k+1)} &= (1 - \omega)u_6^{(k)} + \frac{\omega}{2}(u_5^{(k+1)} + u_7^{(k+1)} - f_6h^2), \\
&\vdots
\end{aligned}$$

を計算する。こうすれば、それぞれの色のつけられた格子点上の未知数の値を計算するとき、同じ色のついた格子点上の未知数の値を参照せず、赤、黒各色のついた格子点上の未知数の値の計算においてベクトル化が可能となる。このときの計算における未知数の順序は、red-black ordering と呼ばれる。

natural ordering とは異なる ordering を考えるとき、その係数行列も変化する。これは、行列の形で表現することが可能である。まず、ここで取り上げた 1 次元のモデル問題に対する例で説明する。natural ordering によって未知数を並べたベクトル \mathbf{u} は、

$$(4.17) \quad \mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_{N-1})^t$$

と表すことができる。これに対して、

$$(4.18) \quad \mathbf{u}_R = (u_1, u_3, u_5, \dots)^t,$$

$$(4.19) \quad \mathbf{u}_B = (u_2, u_4, u_6, \dots)^t$$

によりベクトル \mathbf{u}_R , \mathbf{u}_B を定義し、さらに

$$(4.20) \quad \mathbf{u}_{RB} = \mathbf{u}_R \oplus \mathbf{u}_B$$

によりベクトル \mathbf{u}_{RB} を定義する。このベクトル \mathbf{u}_{RB} における未知数の順序が red-black ordering である。

さらに、

$$(4.21) \quad Q_{RB}\mathbf{u} = \mathbf{u}_{RB}$$

によって置換行列 Q_{RB} を定義する。このとき、

$$(4.22) \quad Q_{RB} A Q_{RB}^{-1}$$

が red-black ordering によって未知数を並べたベクトルに対する係数行列となる。同様のことが任意の係数行列、任意の ordering に対して成り立つ。次に、これを示す。まず、係数行列 A に対する連立一次方程式、

$$(4.23) \quad A\mathbf{u} = \mathbf{f}$$

に対して、ある ordering による未知数のベクトルを \mathbf{u}' とおく。また、

$$(4.24) \quad Q' \mathbf{u} = \mathbf{u}'$$

によってこの ordering に対する置換行列 Q' を定義する。連立一次方程式の右辺項のベクトルに対しても、

$$(4.25) \quad Q' \mathbf{f} = \mathbf{f}'$$

と、この ordering による右辺項のベクトル \mathbf{f}' を定義する。(4.24), (4.25) 式より、

$$(4.26) \quad \mathbf{u} = Q'^{-1} \mathbf{u}'$$

$$(4.27) \quad \mathbf{f} = Q'^{-1} \mathbf{f}'$$

が得られる。これを (4.23) 式に代入すれば、

$$(4.28) \quad A Q'^{-1} \mathbf{u}' = Q'^{-1} \mathbf{f}'$$

より、

$$(4.29) \quad Q A Q'^{-1} \mathbf{u}' = \mathbf{f}'$$

が得られる。これは $Q'AQ^{-1}$ が、ここで考えた新たな ordering に対する係数行列であることを示している。

さて、次に 1 次元のモデル問題の場合に 2 種類の ordering に対する係数行列を具体的に表す。natural ordering に対する係数行列は、

$$(4.30) \quad \begin{pmatrix} -2 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_{N-2} \\ u_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 h^2 - g_1 \\ f_2 h^2 \\ \vdots \\ f_{N-2} h^2 \\ f_{N-1} h^2 - g_2 \end{pmatrix}$$

と表され、red-black ordering に対する係数行列は、

$$(4.31) \quad \begin{pmatrix} -2 & & & 1 & & & \\ & -2 & & & 1 & & \\ & & \ddots & & & \ddots & \\ 1 & & & -2 & & & \\ & 1 & & & -2 & & \\ & & \ddots & & & \ddots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_2 \\ u_4 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 h^2 - g_1 \\ f_3 h^2 \\ \vdots \\ f_2 h^2 \\ f_4 h^2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

と表される。ここで、(4.30) 式の係数行列は、4.1 節の (4.6) 式の右辺で定義した 2 巡回標準行列となる。

次に、3 次元のモデル問題に対する red-black ordering を説明する。まず、未知数 $u_{i,j,k}$ ($1 \leq i, j, k \leq N-1$) に対し、Figure 4.2 に示すような Red, Black 2 色によるグループ分けを考える。ここで、左側の図は $k = 1, 3, 5, \dots$ に対するグループ分けを、右側の図は $k = 2, 4, 6, \dots$ に対するグループ分けを表す。

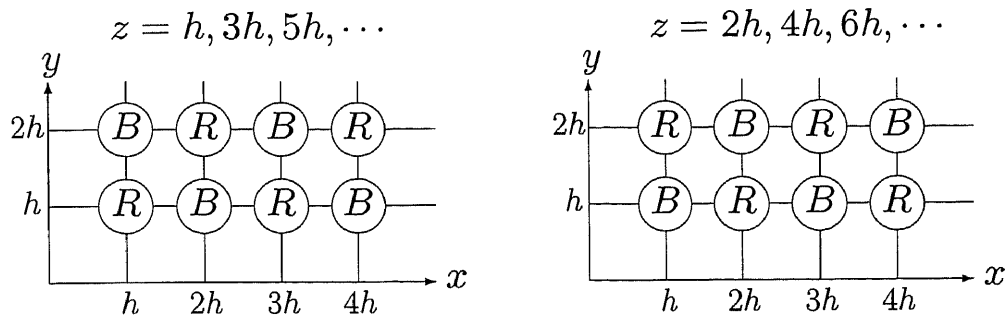


Figure 4.2: Coloring on the red-black ordering in 3-dimensions.

さて、第3章3.1節の(3.2)式で定義された natural ordering による未知数のベクトル \mathbf{u} は、3次元では、

$$\begin{aligned}
 (4.32) \quad \mathbf{u} = & (u_{1,1,1}, u_{2,1,1}, \dots, u_{N-1,1,1}, \\
 & u_{1,2,1}, u_{2,2,1}, \dots, u_{N-1,2,1}, \\
 & \dots \dots \dots \\
 & u_{1,N-1,1}, u_{2,N-1,1}, \dots, u_{N-1,N-1,1}, \\
 & u_{1,1,2}, u_{2,1,2}, \dots, u_{N-1,1,2}, \\
 & u_{1,2,2}, u_{2,2,2}, \dots, u_{N-1,2,2}, \\
 & \dots \dots \dots \\
 & u_{1,N-1,2}, u_{2,N-1,2}, \dots, u_{N-1,N-1,2}, \\
 & \dots \dots \dots \\
 & u_{1,N-1,N-1}, u_{2,N-1,N-1}, \dots, u_{N-1,N-1,N-1})^t
 \end{aligned}$$

と書ける。ここで、Red, Black それぞれの色の付けられた未知数を辞書的順序に並べた二つのベクトルを次のように定義する。

$$\begin{aligned}
 (4.33) \quad \mathbf{u}_R = & (u_{1,1,1}, u_{3,1,1}, u_{5,1,1}, \dots, \\
 & u_{2,2,1}, u_{4,2,1}, u_{6,2,1}, \dots, \\
 & u_{1,3,1}, u_{3,3,1}, u_{5,3,1}, \dots, \\
 & \dots \dots \dots
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& u_{2,1,2}, u_{4,1,2}, u_{6,1,2}, \dots, \\
& u_{1,2,2}, u_{3,2,2}, u_{5,2,2}, \dots, \\
& \dots\dots\dots \\
& u_{1,1,3}, u_{3,1,3}, u_{5,1,3}, \dots)^t, \\
(4.34) \quad \mathbf{u}_B = & (u_{2,1,1}, u_{4,1,1}, u_{6,1,1}, \dots, \\
& u_{1,2,1}, u_{3,2,1}, u_{5,2,1}, \dots, \\
& u_{2,3,1}, u_{4,3,1}, u_{6,3,1}, \dots, \\
& \dots\dots\dots \\
& u_{1,1,2}, u_{3,1,2}, u_{5,1,2}, \dots, \\
& u_{2,2,2}, u_{4,2,2}, u_{6,2,2}, \dots, \\
& \dots\dots\dots \\
& u_{2,1,3}, u_{4,1,3}, u_{6,1,3}, \dots)^t.
\end{aligned}$$

これは、(4.32) 式で定義された natural ordering による未知数のベクトル \mathbf{u} を二つのグループに分けたものでもある。ここで、1次元の場合と同様に

$$(4.35) \quad \mathbf{u}_{RB} = \mathbf{u}_R \oplus \mathbf{u}_B$$

とおき、

$$(4.36) \quad Q_{RB}\mathbf{u} = \mathbf{u}_{RB}$$

によって置換行列 Q_{RB} を定義する。 \mathbf{u}_{RB} における未知数のオーダリングが、3次元のモデル問題に対する red-black ordering である。ここで、Figure 4.2 で定義されたグループ分けに関して次の命題が成り立つ。

命題 4.5 係数行列 A が、その対角成分以外の任意の非零要素 a_{ij} について (4.32) で定義されるベクトル \mathbf{u} の i 番目の要素と j 番目の要素が異なるグループに属する、という性質を持つとき次が成り立つ。

- (1) A は 2 巡回行列である。

- (2) A に対する red-black ordering による SOR 法においてベクトル化が可能である。
- (3) $Q_{RB}AQ_{RB}^{-1}$ は 2 巡回標準行列である。

証明

- (1) 命題 4.4 における平面グラフを考える。命題 4.5 の仮定より、矢印で結ばれる P_i と P_j について \mathbf{u} の i 番目の要素と j 番目の要素が属するグループは異なるから、閉じた道は必ず偶数個の矢印を含む。
- (2) 仮定より係数行列 A に対する SOR 法の反復ステップにおいて、 R, B それぞれのグループに属する未知数の値を更新する際、自分自身の値以外は他のグループに属する未知数のみを参照する。すなわち、各グループの未知数の値は同時に更新可能である。red-black ordering による SOR 法では R, B 各グループ毎に計算するので各グループの計算におけるベクトル化が可能となる。
- (3) 未知数 $u_{i,j,k}$ が満たす連立一次方程式を

$$A\mathbf{u} = \mathbf{f}$$

と表す。red-black ordering による係数行列を A' 、 $Q_{RB}\mathbf{f} = \mathbf{f}_{RB}$ とおくと

$$A'\mathbf{u}_{RB} = \mathbf{f}_{RB}$$

が成り立つ。ここで、

$$A' = Q_{RB}AQ_{RB}^{-1}$$

が成り立つ。また、 n_R, n_B を R, B それぞれのグループに属する未知数の個数、 I_R, I_B をそれぞれ n_R 次、 n_B 次の単位行列とすると、(2) の証明より

$$A' = \begin{pmatrix} I_R & A_{12} \\ A_{21} & I_B \end{pmatrix}$$

と表されることがわかる。よって、 $Q_{RB}AQ_{RB}^{-1}$ は2巡回標準行列である。 ■

さて、次に red-black ordering を一般化した multicolor ordering を考える。ここでは、3次元の任意の差分公式に対して適用可能なマルチカラー法を提案する。まず、 n_c 色、 C_1, C_2, \dots, C_{n_c} を使った ordering を考える。ここで、 C の添え字は n_c を法として考えることとする。すなわち、任意の n に対して

$$C_n, C_{n+n_c}, C_{n+2n_c}, \dots$$

は、同じ色を表すものとする。またここでは、Figure 4.3で示す ordering のみを考えるものとする。

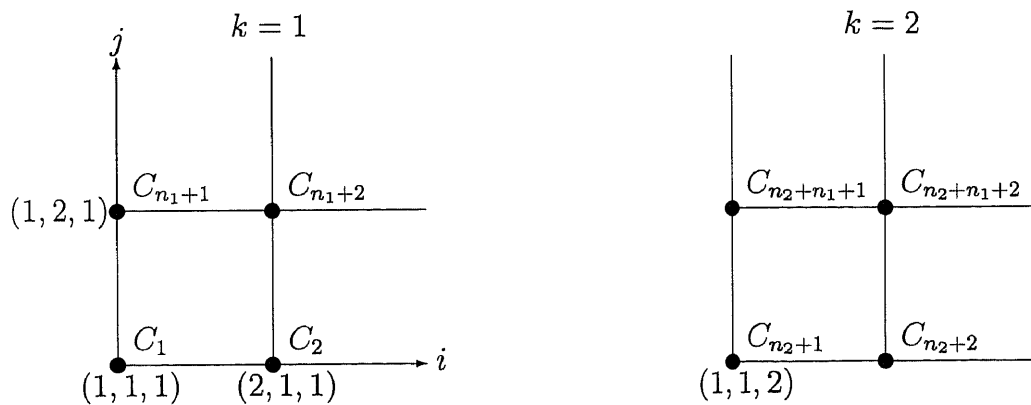


Figure 4.3: Coloring on the general multicolor ordering.

Figure 4.3では、 C の添え字は j 方向には n_1 、 k 方向には n_2 増えるものとする。この ordering に対して次の定理が成り立つ。

定理 4.1 3次元 $(m+1)$ 点差分式、

$$c_0 u_{i,j,k} + \sum_{l=1}^m c_l u_{i+i_l, j+j_l, k+k_l}$$

をSOR法を使って解く場合に次が成り立つ。

n_c, n_1, n_2 によりベクトル化が可能である。

$\Leftrightarrow 1 \leq l \leq m$ なる任意の l について

$$i_l + n_1 j_l + n_2 k_l \not\equiv 0 \pmod{n_c}$$

が成り立つ。

証明 Figure4.3の ordering の定義により、格子点 (i, j, k) の色を C_n とおくと、格子点 $(i + i_l, j + j_l, k + k_l)$ の色は $C_{i_l + n_1 j_l + n_2 k_l}$ と表されることがわかる。これは、 i, j, k には無関係で成り立つので、格子点 (i, j, k) の色と格子点 $(i + i_l, j + j_l, k + k_l)$ の色が一致するかどうかは i, j, k にはよらない。

次に、ベクトル化が可能であるための必要十分条件を求める。これは各色のグループの計算を行うときに再帰参照関係にないこと、すなわち、すべての l ($1 \leq l \leq m$) について、格子点 (i, j, k) の色と格子点 $(i + i_l, j + j_l, k + k_l)$ の色が一致しないことである。これは上の考察によって、すべての l ($1 \leq l \leq m$) について $i_l + n_1 j_l + n_2 k_l$ が n_c で割り切れないこと、すなわち

$$i_l + n_1 j_l + n_2 k_l \not\equiv 0 \pmod{n_c}$$

が成り立つことである。 ■

この節の最後に、定理4.1を差分公式(4.11)~(4.15)に対して適用した結果を述べる。Table4.1に定理4.1における n_c, n_1, n_2 の値をFigure4.4に実際の色分けの仕方を示す。なお、Table4.1には最も小さな n_c の値のみを示す。これは、 n_c の値が小さい方がベクトル長が長くなり、ベクトル計算機において効率的な計算を行うことができるからである。なお、Table4.1中の格子点数は、差分公式で使用する格子点数を表す。また、Figure4.4には $(1 \leq i, j, k \leq 2)$ における格子点の色を示す。

Table 4.1: Minimum color numbers to approximations.

差分公式	格子点数	n_c	n_1	n_2
(4.11)	7	2	1	1
(4.12)	13	4	0	2
(4.13)	9	2	1	1
(4.14)	19	6	2	3
(4.15)	15	2	1	1

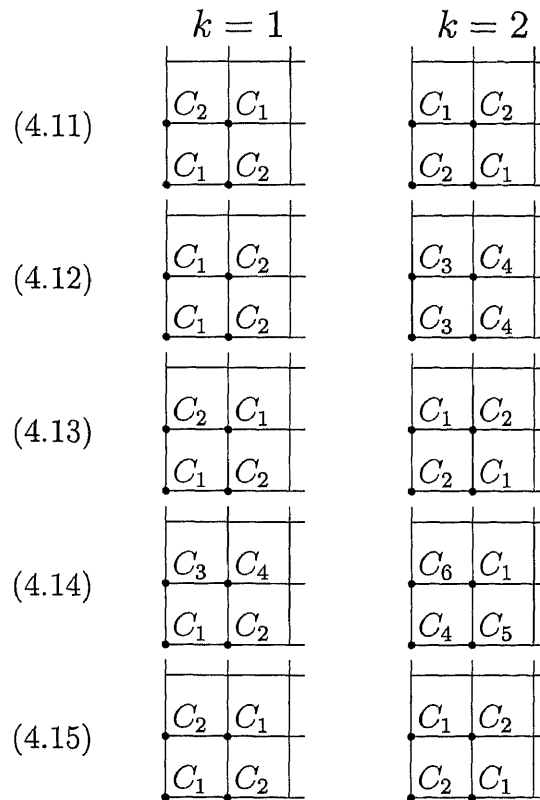


Figure 4.4: Coloring to difference approximations.

通常の2次精度7点差分公式、シングルセルの立方体の頂点をつた2次精度9点差分公式および本研究で得られた4次精度15点差分公式ではred-black orderingによるSOR法によりベクトル化されるのに対し、シ

シングルセルの立方体の辺の中点を使った2次精度13点差分公式、Lynchの4次精度19点差分公式では、ベクトル化のために多くの色を使ったマルチカラー法が必要であるという結果が得られた。

4.3 各差分公式に対するSOR法の収束率

ここでは、前節までの結果を使って、差分公式(4.11), (4.12), (4.13), (4.14), (4.15)に対するSOR法の収束率および最適加速係数について述べる。係数行列 $A_{31}, A_{32}, \dots, A_{35}$ に対するJacobi反復行列を $B_{31}, B_{32}, \dots, B_{35}$ で、SOR反復行列を $S_{1,\omega}, S_{2,\omega}, \dots, S_{5,\omega}$ で表す。ここで、 ω はSOR法における加速係数である。

まず、係数行列 $A_{31}, A_{32}, \dots, A_{35}$ の2巡回性、整合順序性を調べる。これには、命題4.5を用いる。係数行列 A が実際に[命題5]の仮定を満たすかどうかについては、係数行列を定める差分公式とFig4.2から容易に調べることが出来る。差分公式(4.11), (4.13)および(4.15)の係数行列 A_{31}, A_{33} および A_{35} は、いずれも[命題5]の仮定を満足している。すなわち命題4.5により、それぞれの係数行列は2巡回であり、かつred-black orderingによるSOR法を適用した場合、ベクトル化が可能である。

次に A_{31}, A_{33} が整合順序であることを示す。まず、 J, A_{31}, A_{33} を(4.4)式と同様に、

$$(4.37) \quad 2J = -E_J - F_J,$$

$$(4.38) \quad A_{31} = I \otimes I \otimes I - E_{31} - F_{31},$$

$$(4.39) \quad A_{33} = I \otimes I \otimes I - E_{33} - F_{33}$$

と分解する。ここで、 E_J, E_{31}, E_{33} は狭義下三角行列、 F_J, F_{31}, F_{33} は狭義上三角行列である。また、 I, J は(3.20)式で定義された行列である。係数行列 A_{31}, A_{33} を表す(3.57), (3.59)式より、

$$(4.40) \quad E_{31} = -\frac{1}{6}(I \otimes I \otimes E_J + I \otimes E_J \otimes I + E_J \otimes I \otimes I),$$

$$(4.41) \quad F_{31} = -\frac{1}{6}(I \otimes I \otimes F_J + I \otimes F_J \otimes I + F_J \otimes I \otimes I),$$

$$(4.42) \quad E_{33} = -\frac{1}{2}(E_J \otimes J \otimes J),$$

$$(4.43) \quad F_{33} = -\frac{1}{2}(F_J \otimes J \otimes J)$$

が得られる。係数行列 A_{31}, A_{33} に対して、(4.7) 式の $B(\alpha)$ に相当する行列をそれぞれ $B_{31}(\alpha), B_{33}(\alpha)$ とおくと、

$$(4.44) \quad B_{31}(\alpha) = -\frac{1}{6}\{I \otimes I \otimes (\alpha E_J + \alpha^{-1} F_J) \\ + I \otimes (\alpha E_J + \alpha^{-1} F_J) \otimes I + (\alpha E_J + \alpha^{-1} F_J) \otimes I \otimes I\},$$

$$(4.45) \quad B_{33}(\alpha) = -\frac{1}{2}\{(\alpha E_J + \alpha^{-1} F_J) \otimes J \otimes J\}$$

となる。ここで、次の $(N-1)$ 次行列 T を定義する。

$$T = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & \alpha & & \\ & & \ddots & \\ & & & \alpha^{N-2} \end{pmatrix}.$$

このとき、

$$(T \otimes T \otimes T)^{-1} B_{31}(\alpha) (T \otimes T \otimes T) = B_{31}, \\ (T \otimes I \otimes I)^{-1} B_{33}(\alpha) (T \otimes I \otimes I) = B_{33}$$

が成り立つ。すなわち、 $B_{31}(\alpha), B_{33}(\alpha)$ の固有値は α に無関係であり、 A_{31}, A_{33} は整合順序であることがわかる。従って命題 4.2 より

$$(4.46) \quad \rho(S_{1, \omega_{opt}}) = \frac{1 - \sin \frac{\pi}{N}}{1 + \sin \frac{\pi}{N}} \quad \left(= 1 - 2 \left(\frac{\pi}{N} \right) + O(h^2) \right),$$

$$(4.47) \quad \omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sin \frac{\pi}{N}}$$

が得られる。同様に次式も得られる。

$$(4.48) \quad \rho(S_{3,\omega_{opt}}) = \frac{1 - \sqrt{1 - \cos^6 \frac{\pi}{N}}}{1 + \sqrt{1 - \cos^6 \frac{\pi}{N}}} \left(= 1 - 2\sqrt{3} \left(\frac{\pi}{N} \right) + O(h^2) \right),$$

$$(4.49) \quad \omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \cos^6 \frac{\pi}{N}}}.$$

これより次の不等式が得られる。

$$(4.50) \quad \rho(S_{3,\omega_{opt}}) < \rho(S_{1,\omega_{opt}}).$$

すなわち、モデル問題に対するSOR法においては、通常の7点差分公式(4.11)より9点差分公式(4.13)を使った方が収束が速い。

次にグラフ理論を利用して係数行列が整合順序かどうかを調べる。第3章3.1節の(3.3)式で定義した、natural orderingを定める関数 φ を利用する。3次元の場合の写像 φ の定義は、次の通りである。

$$(4.51) \quad \varphi : (i, j, k) \mapsto i + (j - 1)(N - 1) + (k - 1)(N - 1)^2 \\ (1 \leq i, j, k, \leq N - 1).$$

これは、(4.32)で定義された未知数のベクトル \mathbf{u} において $u_{i,j,k}$ が何番目に並ぶかを表す写像である。 $(i_1, j_1, k_1), (i_2, j_2, k_2)$ ($1 \leq i_1, i_2, j_1, j_2, k_1, k_2 \leq N - 1$) に対し、 u_{i_1, j_1, k_1} での差分式において u_{i_2, j_2, k_2} の係数が0でないことと、係数行列の $\varphi(i_1, j_1, k_1)$ 行 $\varphi(i_2, j_2, k_2)$ 列の要素が0でないことは同値である。

さて、係数行列 A_{32} について考える。まず、次のように記号を定める。

$$m_1 = (1, 1, 1), \quad m_2 = (2, 2, 1), \quad m_3 = (1, 2, 2).$$

$A_{32} = (a_{ij})$ において $a_{\varphi(m_1)\varphi(m_2)}, a_{\varphi(m_2)\varphi(m_3)}, a_{\varphi(m_3)\varphi(m_1)}$ は0ではない。命題4.4に従って閉じた道を作ると、

$$P_{\varphi(m_1)} \implies P_{\varphi(m_2)} \implies P_{\varphi(m_3)} \longrightarrow P_{\varphi(m_1)}$$

となり、矢印を奇数個含む。従って、 A_{32} は2巡回ではない。 $A_{34} = (a_{ij})$ においても同じ閉じた道が作れるから A_{34} も2巡回ではないことがわかる。

次に、 A_{35} が整合順序行列かどうかを調べる。まず、

$$n_1 = (1, 1, 1), \quad n_2 = (2, 2, 2), \quad n_3 = (2, 2, 1), \quad n_4 = (2, 1, 1)$$

とおく。 $A_{35} = (a_{ij})$ において $a_{\varphi(n_1)\varphi(n_2)}$, $a_{\varphi(n_2)\varphi(n_3)}$, $a_{\varphi(n_3)\varphi(n_4)}$, $a_{\varphi(n_4)\varphi(n_1)}$ は0ではない。このときの閉じた道は、

$$P_{\varphi(n_1)} \implies P_{\varphi(n_2)} \longrightarrow P_{\varphi(n_3)} \longrightarrow P_{\varphi(n_1)} \longrightarrow P_{\varphi(n_1)}$$

となり、 \longrightarrow と \implies の個数は一致しない。従って A_{35} は2巡回ではあるが整合順序ではない。以上により命題4.3を使って次の評価が得られる。

$$(4.52) \quad \rho(S_{2,\omega}) > \frac{1 - \sqrt{1 - \cos^4 \frac{\pi}{N}}}{1 + \sqrt{1 - \cos^4 \frac{\pi}{N}}},$$

$$(4.53) \quad \rho(S_{4,\omega}) > \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{1}{4} \left(\cos \frac{\pi}{N} + \cos^2 \frac{\pi}{N} \right)^2}}{1 + \sqrt{1 - \frac{1}{4} \left(\cos \frac{\pi}{N} + \cos^2 \frac{\pi}{N} \right)^2}},$$

$$(4.54) \quad \rho(S_{5,\omega}) > \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{1}{49} \left(6 \cos \frac{\pi}{N} + \cos^3 \frac{\pi}{N} \right)^2}}{1 + \sqrt{1 - \frac{1}{49} \left(6 \cos \frac{\pi}{N} + \cos^3 \frac{\pi}{N} \right)^2}}.$$

(4.52) 式により、三つの2次精度差分公式(4.11), (4.12), (4.13)にSOR法を適用したときの収束率について、次の不等式が得られる。

$$(4.55) \quad \rho(S_{3,\omega_{opt}}) < \rho(S_{2,\omega}).$$

不等式(4.50)と合わせて、モデル問題に対するSOR法においては三つの

2次精度差分公式(4.11)~(4.13)のうち差分公式(4.13)を使った場合が、最も収束が速いという結果が得られる。

さて、係数行列 A_{35} は整合順序ではないが、 $A'_{35} = Q_{RB} A_{35} Q_{RB}^{-1}$ は2巡回標準行列である。従って、 A'_{35} は命題4.1により2巡回整合順序行列であり、 A'_{35} に対するSOR反復行列 $S'_{5,\omega}$ に関する、すなわち差分公式(4.15)にred-black orderingによるSOR法を適用したときの最適加速係数 ω_{opt} およびそのときの収束率 $\rho(S'_{5,\omega_{opt}})$ が次のように求まる。

$$(4.56) \quad \rho(S'_{5,\omega_{opt}}) = \frac{1 - \sqrt{1 - \frac{1}{49} \left(6 \cos \frac{\pi}{N} + \cos^3 \frac{\pi}{N}\right)^2}}{1 + \sqrt{1 - \frac{1}{49} \left(6 \cos \frac{\pi}{N} + \cos^3 \frac{\pi}{N}\right)^2}}$$

$$= 1 - \frac{6}{\sqrt{7}} \left(\frac{\pi}{N}\right) + O(h^2),$$

$$(4.57) \quad \omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \frac{1}{49} \left(6 \cos \frac{\pi}{N} + \cos^3 \frac{\pi}{N}\right)^2}}.$$

(4.54) 式と (4.56) 式より任意の $\omega (\neq \omega_{opt})$ に関して次の不等式が得られる。

$$(4.58) \quad \rho(S'_{5,\omega_{opt}}) < \rho(S_{5,\omega}).$$

すなわち、差分公式(4.15)にSOR法を適用する場合、natural orderingによるSOR法よりred-black orderingによるSOR法の方が収束が速い。なお、差分公式(4.11), (4.13)から得られる係数行列は2巡回整合順序であり、命題4.1, 命題4.2, 命題4.5によりred-black orderingによってベクトル化が可能であり、かつそのときの最適加速係数、収束率はnatural orderingによるものと同じであることがわかる。

4.4 数値計算

ここでは、実際にいくつかの N について固有値を数値計算によって求めることにより、SOR法の最適加速係数およびそのときの収束率を求めた。まず、2次精度の7点差分公式(4.11)、13点差分公式(4.12)および9点差分公式(4.13)に対するSOR反復行列 $S_{1,\omega_{opt}}, S_{2,\omega_{opt}}, S_{3,\omega_{opt}}$ についての結果をTable4.2に示す。ここで、 ω_{opt} は数値計算により求めた最適加速

係数を、 ρ はそのときのスペクトル半径を表す。なお、 $S_{1,\omega_{opt}}, S_{3,\omega_{opt}}$ については解析値(4.46)~(4.49)式を使った。

Table 4.2: Convergence rates for 2nd-order approximations.

N	$S_{1,\omega_{opt}}$		$S_{2,\omega_{opt}}$		$S_{3,\omega_{opt}}$	
	ω_{opt}	ρ	ω_{opt}	ρ	ω_{opt}	ρ
6	1.333	0.333	1.216	0.294	1.136	0.136
7	1.395	0.395	1.276	0.357	1.189	0.189
8	1.446	0.446	1.328	0.410	1.238	0.238
9	1.490	0.490	1.374	0.455	1.284	0.284
10	1.528	0.528	1.415	0.494	1.325	0.325

三つの2次精度差分公式の中では(4.13)式に対するSOR法が収束が最も速く、次いでわずかの差で(4.12)式、(4.11)式の順になることがわかる。

次に、4次精度の19点差分公式(4.14)、15点差分公式(4.15)に対するSOR反復行列 $S_{4,\omega_{opt}}, S_{5,\omega_{opt}}$ および差分公式(4.15)に対するred-black orderingによるSOR反復行列 $S'_{5,\omega_{opt}}$ についての結果をTable4.3に示す。 $S'_{5,\omega_{opt}}$ については(4.56), (4.57)式による解析値を使った。

Table 4.3: Convergence rates for 4th-order approximations.

N	$S_{4,\omega_{opt}}$		$S_{5,\omega_{opt}}$		$S'_{5,\omega_{opt}}$	
	ω_{opt}	ρ	ω_{opt}	ρ	ω_{opt}	ρ
6	1.283	0.344	1.315	0.349	1.290	0.290
7	1.344	0.406	1.375	0.411	1.350	0.350
8	1.396	0.458	1.427	0.461	1.402	0.402
9	1.440	0.502	1.471	0.504	1.447	0.447
10	1.479	0.539	1.510	0.541	1.485	0.485

4次精度差分公式では(4.14)式と(4.15)式に対するSOR法の収束率がほとんど同じであり、それよりも差分公式(4.15)式に対するred-black orderingによるSOR法の収束が速いことがわかる。

最後に、実際に SOR 法をベクトル計算機上で実行させたときの収束までの反復回数および CPU 時間 (秒) を示す。数値計算では、2 次精度の差分公式である (4.11) 式と (4.13) 式、4 次精度の差分公式である (4.14) 式と (4.15) 式を用いた。なお、差分公式 (4.12) 式は、Table 4.2 において (4.13) 式よりも収束性が悪く、かつ計算に使用する格子点数も多いので、以下の数値計算では使用しなかった。

数値計算は、各差分公式について natural ordering による SOR 法と Figure 4.4 で示した multicolor ordering による SOR 法の 2 種類の SOR 法で行った。なお、multicolor ordering による SOR 法では、ベクトル長を長く取るために 3 次元の配列を 1 次元化し、かつメモリアクセスがなるだけ連続になるように計算を行った。SOR 法の反復における収束判定は相対残差 L_2 ノルムが 10^{-10} 以下とした。格子点数は 80^3 個とし、計算はすべて倍精度で行った。ベクトル計算機として、日立の S-3800 を用いた。また、以下に示した厳密解に対してポアソン方程式の右辺項の f を定めた。

$$u(x, y, z) = \sin(\pi x) + \sin(\pi y) + \sin(\pi z).$$

なお、(4.11) 式が 2 次精度 7 点差分公式、(4.13) 式が 2 次精度 9 点差分公式、(4.14) 式が Lynch の 4 次精度 19 点差分公式、(4.15) 式が本研究で得られた 4 次精度 15 点差分公式である。

Table 4.4 に各公式における SOR 法の反復回数と CPU 時間 (秒) を示す。この表の中の natural は natural ordering による SOR 法を、multicolor は multicolor ordering による SOR 法を表す。

Table 4.4: Iteration counts and CPU time(in seconds).

差分公式	natural	multicolor
(4.11)	436 回 (57.2)	388 回 (.776)
(4.13)	263 回 (2.73)	229 回 (.537)
(4.14)	429 回 (56.7)	417 回 (3.51)
(4.15)	452 回 (59.0)	344 回 (1.18)

2 次精度差分公式では、9 点差分公式の方が通常の 7 点差分公式より、反復回数、CPU 時間ともに少ないことがわかる。なお、9 点差分公式 (4.13) に natural ordering による SOR 法を適用した場合の CPU 時間

が短いのは、シングルセルの立法体の頂点のみを使うため、 x 軸、 y 軸方向の反復計算において再帰参照関係が発生せず、自動的にベクトル化されるためである。ただし、 z 軸方向の計算において再帰参照関係が発生するため、ベクトル長は 2 次元の格子点数 $(N - 1)^2$ にとどまる。

次に、4 次精度差分公式では、natural ordering による SOR 法を比較した場合は、Lynch の差分公式 (4.14) を用いた方がわずかに CPU 時間が短い。multicolor ordering による SOR 法を比較した場合は、Lynch の差分公式 (4.14) を用いると本研究で得られた差分公式 (4.15) を用いた場合の約 3 倍の CPU 時間がかかることがわかる。これは、反復回数の大小関係が逆転すること、使用する格子点数が Lynch の差分公式の方が多いことに加え、本研究で得られた差分公式は red-black ordering による SOR 法が適用できるということが大きく関係している。red-black ordering による SOR 法では、格子点の添え字の関係が格子点の位置に関係なく一般的に記述できるのに対し、Lynch の差分公式に対する multicolor ordering では多くの色が必要となり、このような一般的な関係では記述できない。すなわち、参照する格子点の添え字に対して配列変数を用いなければならず、リストベクトルを使用することになり、そのために実行性能が低下してしまう。また、本研究で得られた差分公式 (4.15) を用いた場合、natural ordering による SOR 法に比べて multicolor ordering による SOR 法の反復回数は約 76 % に減少し、前節の理論通り収束が速くなっているということがわかる。

また、いずれの差分公式を用いた場合も、ベクトル化により CPU 時間がかなり短縮されており、マルチカラー法による SOR 法が有効な手法であるということがわかる。特に、本研究で得られた 2 次精度 9 点差分公式および 4 次精度 15 点差分公式はいずれもベクトル計算機上で高い実行性能を持ち、ベクトル計算機に適した差分公式であるといえる。

第 5 章

まとめ

ポアソン方程式に対する高次精度の差分公式を導出し、そこから得られる係数行列の理論的な性質および係数行列をSORを用いて解く場合の収束率の研究を行った。また、差分公式から得られる連立一次方程式を効率よく解くことができるかどうかという観点に立ち差分公式の善し悪しの評価を行った。

まず第2章では、ポアソン方程式の右辺項を利用し左辺の離散化の剰余項を消す、という方法でシングルセル内の格子点だけを使ったいくつかの高次精度差分公式を導出した。まず、 n 次元のポアソン方程式に対する一般的な形での2次精度、4次精度の差分公式を導出した。次に、2,3次元のポアソン方程式の場合にその結果を適用した。特に、3次元ポアソン方程式に対する差分公式では、すでに知られているLynchの4次精度19点差分公式より使用する格子点数が少ない4次精度15点差分公式を導出した。また、6次精度差分公式では、Lynchが提唱した格子点と格子点の中間点での関数の値を利用した6次精度差分公式のバリエーションを増やすとともに、中間点を使用せずに格子点上の関数の値のみを使った6次精度差分公式を提案した。さらに、この方法では8次以上の精度の差分公式を導出することが不可能であることを示した。第2章の最後に、3次元ポアソン方程式に対する2次精度、4次精度および6次精度の差分公式に対してICCG法による数値計算によりその実行効率の検証を行った。その結果、特に4次精度差分公式においてLynchの公式より本研究で得られた15点差分公式の方が、前処理のベクトル化に適しており、効率的に数値計算を行うことができることがわかった。また、その場合に

得られる数値解の精度が同程度であることを示した。

第3章では、第2章で得られた差分公式をモデル問題に適用した場合に、得られた連立一次方程式に対する係数行列の条件数および Jacobi 法の収束率を理論的に求めた。そのためにまず、第2章で得られた差分公式をすべて含む一般的な形の差分公式を構成し、そこから得られる係数行列が基本的な二つの行列のテンソル積で表現できることを示した。次に、それを使って一般的な形の差分公式から得られる係数行列のすべての固有値を理論的に求めた。またその結果を用いて、2,3次元の場合の2次精度、4次精度差分公式について条件数および Jacobi 法の収束率を求めた。その結果、特に2次精度差分公式においては、シングルセルの中心点からの距離が遠い格子点を使った差分公式の方が係数行列の性質が良くなることを示した。さらに、CG法、ICCG法による数値計算で実際にそれを検証した。

第4章では、3次元のポアソン方程式に対する2次精度、4次精度差分公式の係数行列にSOR法を適用した場合の最適加速係数、収束率を求めた。また、ベクトル化のための手法であるマルチカラー法を一般化し、任意の差分公式に対して適用できるマルチカラー法を提案した。また同時に、最も長いベクトル長となる色数および色分けの方法を示した。さらに、それを3次元のポアソン方程式に対する2次精度、4次精度差分公式の係数行列に適用し、各差分公式における色数および色分けの方法を示した。その結果、通常の2次精度7点差分公式、シングルセルの頂点を使った2次精度9点差分公式および本研究で得られた4次精度15点差分公式に対しては、red-black orderingによるベクトル化が可能であり、ベクトル計算機上で高い実行性能が得られることがわかった。また、これらの公式に対しては、red-black orderingによるSOR法における理論的な最適加速係数および収束率を示した。2次精度差分公式では、第3章でJacobi法に対して得られた結果と同じく、シングルセルの立方体の頂点を使った9点差分公式の方が通常の7点差分公式よりもSOR法の収束が速いという結果が得られた。さらに、本研究で得られた4次精度15点差分公式は、通常のnatural orderingによるSORよりもred-black orderingによるSOR法の方が収束が速くなるということを理論的に示した。これにより、本来ベクトル化のための手法であるマルチカラー法が、ベクトル計算機のためだけでなく通常の計算機においても有効な手法となりうることを示した。また、Lynchの4次精度19点差分公式は、マルチカラー法においては6色を必要とし、本研究で得られた4次精度15点差分公式の方がベクトル計算機に適していることがわかった。最後にベクトル計算機による数値計算により、シングルセルの立方体の頂点を使った9点

差分公式および本研究で得られた 4 次精度 15 点差分公式を使用すれば、他の差分公式に比べて高速な数値計算が可能であることを示した。

本研究で得られた 3 次元ポアソン方程式に対する 4 次精度 15 点差分公式は、Lynch による同じ 4 次精度の 19 点差分公式に比べて、ICCG 法、SOR 法等の反復法に適した差分公式であり、特にベクトル計算機に適した差分公式であると結論できる。

謝辞

本論文をまとめるにあたって、その機会を与えて下さった筑波大学 電子・情報工学系 名取亮教授に心より感謝致します。また、本研究を遂行する場を与えて下さり、始終御指導、励ましを頂いた徳島大学 工学部 篠原教授ならびに熱心に御討議頂き、多くの有益な御助言、励ましを頂いた同 今井教授に心から感謝致します。

本論文は、筆者が花王株式会社 数理科学研究所に在籍していた折の研究を発展させたものであり、その間研究の場を提供して下さり、御指導を頂いた花王株式会社 取締役 美濃順亮氏、直属の上司であり、御指導、御討議頂いた同 ロジスティクス部門 供給グループ部長 大路延憲氏ならびに情報科学研究所所長 沼田敏晴氏に深く感謝致します。

また、筆者の元同僚であり、花王株式会社在職の折から熱心に御討議頂き、現在に至るまで暖かい励ましを頂いた比治山女子短期大学 生活学科 増川助教授に深く感謝致します。

本研究は上記の方々の御支援のもとで成し遂げたものであり、ここに深く謝意を表します。

参考文献

- [1] Adams L.M., Leveque R.J. and Young D.M., Analysis of the SOR Iteration for the 9-Point Laplacian, SIAM J. Numer. Anal., 25(1988), 1156-1180.
- [2] Allen M.A., Relaxation Methods, McGRAW-HILL, 1955, 145-151.
- [3] Ananthakrishnaiah U., Manohar R. and Stephenson J.W., High-Order Methods for Elliptic Equations With Variable Coefficients, Numerical Methods for P.D.E., 3(1987), 219-227.
- [4] Babuška I., Práger M. and Vitásek E., Numerical Processes in Differential Equations, Interscience Publishers, 1966, 265-280.
- [5] Birkhoff G. and Lynch R.E., Numerical Solution of Elliptic Problems, SIAM Publications, 1984.
- [6] Boisvert R.F., Families of High Order Accurate Discretizations of Some Elliptic Problems, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 2(1981), 268-284.
- [7] Christara C.C., Parallel Computation of Partial Differential Equations on Distributed Memory Machines, Advances in Computer Methods for Partial Differential Equations VII, edited by Vichnevetsky R., 1992, 142-149.
- [8] Collatz L., The ^{Numerical}Numerical Treatment of Differential Equations, Springer-Verlag, 1966.
- [9] Collatz L., The Numerical Treatment of Differential Equations, Springer-Verlag, 1966, 389-395.
- [10] Forsythe G.E. and Wasow W.R., Finite-Difference Methods for Partial Differential Equation, John Wiley & Sons, INC., 1960, 193-195.
- [11] 藤野清次, 竹内敏己, 差分スキームの再考によるベクトル計算機向き不完全LU分解について, 日本応用数学会論文誌, 4(1994), 117-126.

- [12] 藤野清次, 竹内敏己, 直方体の角の 8 点を使う変形差分近似の理論と応用, 1994 年 並列処理シンポジウム論文集, 1994.5, 177-183.
- [13] 藤野清次, 竹内敏己, 3 次元変型 9 点差分近似の理論と応用, 情報処理学会論文誌, 36(1995), 1504-1510.
- [14] 藤野清次, 竹内敏己, 3 次元ポアソン方程式の右辺項の修正による高次精度の差分公式について, 日本応用数理学会論文誌, 5(1995), 169-184.
- [15] Fujino S and Takeuchi T., ILU factorization well suited to the vector processor using a variant of 5-point difference scheme, Computer Physics Communications, 85(1995), 371-381.
- [16] Gerschgorin von S., Fehleraschätzung für das Differenzenverfahren zur Lösung Partieller Differentialgleichungen, Ztschr. f. angew. Math. und Mech., 1930, 373-382.
- [17] Gupta M.M., Manohar R.P. and Stephenson J.W., High-Order Difference Schemes for Two-Dimensional Elliptic Equations, Numerical Methods for P. D. E., 1(1985), 71-80.
- [18] Hageman L.A. and Young D.M., Applied Iterative Methods, Academic Press, New York, 1981.
- [19] Houstis E. N., Vavalis E. A. and Rice J. R., Convergence of $O(h^4)$ Cubic Spline Collocation Methods for Elliptic Partial Differential Equations, SIAM J. Numer. Anal., 25(1988), 54-74.
- [20] 菊地文雄, 岡部政之, 有限要素法システム入門, 日科技連, 1986.
- [21] Lele S.K., Compact Finite Difference Schemes with Spectral-like Resolution, J. of Comp. Physics, 103(1992), 16-42.
- [22] LeVeque R.J. and Trefethen L.N., Fourier Analysis of the SOR Iteration, IMA J. Numer. Anal.
- [23] Lynch R.E. and Rice J.R., The Hodge method and its performance for solving elliptic partial differential equations, in Recent Advances in Numerical Analysis, edited by C. de Boor and G.H. Golub, Academic Press, 1978, 143-175.
- [24] Lynch R.E. and Rice J.R., A high-order difference method for differential equations, Math. Comp., 34(1980), 333-372.
- [25] Lynch R.E., $O(h^4)$ and $O(h^6)$ finite difference approximations to the Helmholtz equation in n -dimensions, Proceedings of the 5th IMACS International Symposium on Computer Methods for Partial Differential Equations edited by V.R. Vichnevetsky, 1984, 199-202.

- [26] Lynch R.E., *Hodie Approximation of Boundary Conditions*, Iterative Methods for Large Linear Systems edited by D.R. Kincaid etc., Academic Press Inc., (1990), 135-147.
- [27] Manohar R. and Stephenson J.W., *High Order Difference Schemes for Linear Partial Differential Equations*, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 5(1984), 69-77.
- [28] 森正武, 杉原正顕, 室田一雄, *線形計算*, 岩波講座応用数学 8, 岩波書店, 1994.
- [29] Ramage A., *Eigenvalue clustering and conjugate gradient convergence for elliptic partial differential equations*, Iterative Methods in Linear Algebra edited by R. Beaumens, (1992), 593-601.
- [30] Rosser J.B., *Nine-point difference solutions for Poisson's equation*, Comp. and Math. with Appls., 1(1975), 351-360.
- [31] Shaw F.S., *An Introduction to Relaxation Methods*, Dover Publications, Inc., 1953, 40-41.
- [32] 篠原能材, *数値解析の基礎*, 日新出版, 1978.
- [33] Smith G.D., *Numerical Solution of Partial Differential Equations: Finite Difference Methods (3rd edition)*, Oxford University Press, 1985.
- [34] 杉原正顕, 室田一雄, *数値計算法の数理*, 岩波書店, 1994.
- [35] Sugihara M., Oyanagi Y., Mori M. and Fujino S., *On the Efficiency of a SOR-like Method Suited to Vector Processors*, J. of Computational and Applied Mathematics, 35(1991), 33-51.
- [36] Takeuchi T., Nakama Y. and Numata T., *Exact computational Procedure for Fluid Flow with Free Boundary Conditions*, The Third World Congress on Computational Mechanics, Ciba, Japan, Extended Abstracts, Volume II, 1994, 1910-1911.
- [37] 竹内敏己, 藤野清次, *差分法による n 次元ラプラス方程式の離散化とその理論固有値解析*, 日本応用数理学会論文誌, 5(1995), 9-26.
- [38] 竹内敏己, *3次元ポアソン方程式におけるSOR法の収束率*, 日本応用数理学会論文誌, 6(1995), 9-26.
- [39] Varga R.S., *Matrix Iterative Analysis*, Prentice-Hall, 1962, 渋谷政昭 ほか訳: *計算機による大型行列の反復解法*, サイエンス社, 1972.
- [40] Van de Vooren A.I. and Vliagenthart A.C., *On the 9-Point Difference Formula for Laplace's Equation*, J. Engr. Math., 1(1967), 187-202.

- [41] Wong Y.S., Preconditioned Conjugate Gradient Methods Applied to Certain Symmetric Linear Systems, Intern. J. Computer Math., 19(1986), 177-200.
- [42] Woźnicki Z.I., HEXAGA-2D-120, -60, -30, Two-Dimensional Multi-group Neutron Diffusion Programmes for a Uniform Triangular Mesh with Arbitrary Group Scattering, Rep. KfK 2789, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1979.
- [43] Woźnicki Z.I., HEXAGA-3D-120, -30, Three-Dimensional Multi-group Neutron Diffusion Programmes for a Uniform Triangular Mesh with Arbitrary Group Scattering, Rep. KfK 3572, Kernforschungszentrum Karlsruhe, 1983.
- [44] Young D.M., Iterative Methods for Solving Partial Difference Equations of Elliptic Type, Trans. Amer.Math. Soc., 76(1954), 92-111.
- [45] Young D.M. and Dauwalder J.H., Discrete Representations of Partial Differential Operators, in *Error in Digital Computation*, Rall L., ed., Academic Press, New York, 1965, 181-207.
- [46] Young D.M., Iterative Solution of Large Linear Systems, Academic Press, New York, 1971.

付録 A

1 変数関数に対する差分公式

A.1 概要

付録として、本論文第2章2.3節の定理2.1による一般の差分公式の一覧表を載せる。ここでは、1変数関数 $u(x)$ の1,2階導関数に対する6次精度までの差分公式と3,4階導関数に対する4次精度までの差分公式の係数を表に示す。

A.2 1~4階導関数に対する差分公式

以下で使用する記号は、本論文第2章2.3節で定義したものと同一ものとする。すなわち、格子間隔を h とし、 $u(x+ih)$ を u_i と表す。

まず、Table A.1に1階導関数 $\frac{\partial u}{\partial x}$ に対する1~6次精度差分公式を示す。表中の $a_{i-3}, a_{i-2}, \dots, a_{i+6}$ は、差分公式を

$$(A.1) \quad \frac{\partial u_i}{\partial x} = \frac{1}{h} (a_{-3}u_{i-3} + a_{-2}u_{i-2} + a_{-1}u_{i-1} + a_0u_i + a_1u_{i+1} + a_2u_{i+2} \\ + a_3u_{i+3} + a_4u_{i+4} + a_5u_{i+5} + a_6u_{i+6}) + O(h^n)$$

と表したときの係数の値を表す。ただし、空白は係数が0であることを示す。また、表の左端の数字は公式の番号を表し、右端の n は差分公式の精度である(A.1)式の n の値を表す。

Table A.1には、中心差分公式および差分点に対し右側の格子点を多く使用する片側差分公式のみを示した。ここで、このTable A.1を利用し

て、左側の格子点を多く使用する片側差分公式の導出方法を述べる。まず、Table A.1中の差分公式において使用される格子点に対する係数の添字の最小値、最大値をそれぞれ n_1, n_2 ($n_1 \leq 0 < n_2$) とおく。このときの差分公式は、

$$(A.2) \quad \frac{\partial u_i}{\partial x} = \sum_{k=n_1}^{n_2} a_k u_{i+k} + O(h^n)$$

と表される。これに対し、

$$(A.3) \quad \frac{\partial u_i}{\partial x} = \sum_{k=-n_2}^{-n_1} -a_{n_1+n_2+k} u_{i+k} + O(h^n)$$

が成り立つ。すなわち、Table A.1において、 a_0 を中心に左右の係数の値を入れ替え、符号を変化させた差分公式が元の差分公式と同じ精度となる。また、 $|n_1| \leq |n_2|$ であるから、この (A.3) 式は左側の格子点を多く使用する差分公式である。

次に、Table A.2に2階導関数 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ に対する1~6次精度差分公式を示す。表中の $a_{i-3}, a_{i-2}, \dots, a_{i+7}$ は、差分公式を

$$(A.4) \quad \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2} (a_{-3} u_{i-3} + a_{-2} u_{i-2} + a_{-1} u_{i-1} + a_0 u_i + a_1 u_{i+1} + a_2 u_{i+2} \\ + a_3 u_{i+3} + a_4 u_{i+4} + a_5 u_{i+5} + a_6 u_{i+6} + a_7 u_{i+7}) + O(h^n)$$

と表したときの係数の値を表す。空白は係数が0であることを示し、表の左端の数字は1階導関数に対する差分公式からの通し番号を、右端の n は差分公式の精度である (A.4) 式の n の値を表す。

Table A.2においても、中心差分公式および差分点に対し右側の格子点を多く使用する片側差分公式のみを示した。この場合は、次のようにして左側の格子点を多く使用する片側差分公式を導出できる。

n_1, n_2 ($n_1 \leq 0 < n_2$) を Table A.1中の差分公式において使用される格子点に対する係数の添字の最小値、最大値とおくとき、差分公式は、

$$(A.5) \quad \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} = \sum_{k=n_1}^{n_2} a_k u_{i+k} + O(h^n)$$

と表される。これに対し、今度は

$$(A.6) \quad \frac{\partial^2 u_i}{\partial x^2} = \sum_{k=-n_2}^{-n_1} a_{n_1+n_2+k} u_{i+k} + O(h^n)$$

が成り立つ。すなわち、Table A.2において、 a_0 を中心に左右の係数の値を入れ替えた差分公式が元の差分公式と同じ精度になる。

Table A.3, A.4には、それぞれ3階、4階導関数 $\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}$, $\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$ に対する1~4次精度差分公式を示す。表中の a_{i-3} , a_{i-2} , \dots , a_{i+7} は、差分公式を

$$(A.7) \quad \frac{\partial^3 u_i}{\partial x^3} = \frac{1}{h^3} (a_{-3}u_{i-3} + a_{-2}u_{i_2} + a_{-1}u_{i-1} + a_0u_i + a_1u_{i+1} + a_2u_{i+2} \\ + a_3u_{i+3} + a_4u_{i+4} + a_5u_{i+5} + a_6u_{i+6}) + O(h^n),$$

$$(A.8) \quad \frac{\partial^4 u_i}{\partial x^4} = \frac{1}{h^4} (a_{-3}u_{i-3} + a_{-2}u_{i_2} + a_{-1}u_{i-1} + a_0u_i + a_1u_{i+1} + a_2u_{i+2} \\ + a_3u_{i+3} + a_4u_{i+4} + a_5u_{i+5} + a_6u_{i+6} + a_7u_{i+7}) + O(h^n)$$

と表したときの係数の値を表す。ここでも、空白は係数が0であることを示し、表の左端の数字は1階導関数に対する差分公式からの通し番号を、右端の n は差分公式の精度である (A.7), (A.8) 式の n の値を表す。

Table A.3, A.4においても、中心差分公式および差分点に対し右側の格子点を多く使用する片側差分公式のみを示した。左側の格子点を多く使用する片側差分公式の導出方法は、3階導関数に対しては1階導関数に対する方法と、また4階導関数に対しては2階導関数に対する方法と同じである。

Table A.1: Difference approximations to the first order derivative.

	a_{-3}	a_{-2}	a_{-1}	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	n
1				-1	1						1
2			$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$						2
3				$-\frac{3}{2}$	2	$-\frac{1}{2}$					2
4			$-\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{2}$	1	$-\frac{1}{6}$					3
5				$-\frac{6}{11}$	3	$-\frac{3}{2}$	$\frac{1}{3}$				3
6		$\frac{1}{12}$	$-\frac{2}{3}$	0	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{12}$					4
7			$-\frac{1}{4}$	$-\frac{6}{5}$	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{12}$				4
8				$-\frac{25}{12}$	4	-3	$\frac{4}{3}$	$-\frac{1}{4}$			4
9		$\frac{1}{20}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{3}$	1	$-\frac{1}{4}$	$\frac{1}{30}$				5
10			$-\frac{1}{5}$	$-\frac{13}{12}$	2	-1	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{20}$			5
11				$-\frac{137}{60}$	5	-5	$\frac{10}{3}$	$-\frac{5}{4}$	$\frac{1}{5}$		5
12	$-\frac{1}{60}$	$\frac{3}{20}$	$-\frac{3}{4}$	0	$\frac{3}{4}$	$-\frac{3}{20}$	$\frac{1}{60}$				6
13		$\frac{1}{30}$	$-\frac{2}{5}$	$-\frac{7}{12}$	$\frac{4}{3}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{2}{15}$	$-\frac{1}{60}$			6
14			$-\frac{1}{6}$	$-\frac{77}{60}$	$\frac{5}{2}$	$-\frac{5}{3}$	$\frac{5}{6}$	$-\frac{1}{4}$	$\frac{1}{30}$		6
15				$-\frac{49}{20}$	6	$-\frac{9}{2}$	$\frac{20}{3}$	$-\frac{15}{4}$	$\frac{6}{5}$	$-\frac{1}{6}$	6

Table A.2: Difference approximations to the second order derivative.

	a_{-3}	a_{-2}	a_{-1}	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	n
16				1	-2	1						1
17			1	-2	1							2
18				2	-5	4	-1					2
19			$\frac{11}{12}$	$-\frac{5}{3}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{12}$					3
20				$\frac{35}{12}$	$-\frac{26}{3}$	$\frac{19}{2}$	$-\frac{14}{3}$	$\frac{11}{12}$				3
21		$-\frac{1}{12}$	$\frac{4}{3}$	$-\frac{5}{2}$	$\frac{4}{3}$	$-\frac{1}{12}$						4
22			$\frac{5}{6}$	$-\frac{5}{4}$	$-\frac{1}{3}$	$\frac{7}{6}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{1}{12}$				4
23				$\frac{15}{4}$	$-\frac{77}{6}$	$\frac{107}{6}$	-13	$\frac{61}{12}$	$-\frac{5}{6}$			4
24		$-\frac{13}{180}$	$\frac{19}{15}$	$-\frac{7}{3}$	$\frac{10}{9}$	$\frac{1}{12}$	$-\frac{1}{15}$	$\frac{1}{90}$				5
25			$\frac{137}{180}$	$-\frac{49}{60}$	$-\frac{17}{12}$	$\frac{47}{18}$	$-\frac{19}{12}$	$\frac{31}{60}$	$-\frac{13}{180}$			5
26				$\frac{203}{45}$	$-\frac{87}{5}$	$\frac{117}{4}$	$-\frac{254}{9}$	$\frac{33}{2}$	$-\frac{27}{5}$	$\frac{137}{180}$		5
27	$\frac{1}{90}$	$-\frac{3}{20}$	$\frac{3}{2}$	$-\frac{49}{18}$	$\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{20}$	$\frac{1}{90}$					6
28		$-\frac{11}{180}$	$\frac{107}{90}$	$-\frac{21}{10}$	$\frac{13}{18}$	$\frac{17}{36}$	$-\frac{3}{10}$	$\frac{4}{45}$	$-\frac{1}{90}$			6
29			$\frac{7}{10}$	$-\frac{7}{18}$	$-\frac{27}{10}$	$\frac{19}{4}$	$-\frac{67}{18}$	$\frac{9}{5}$	$-\frac{1}{2}$	$\frac{11}{180}$		6
30				$\frac{469}{90}$	$-\frac{223}{10}$	$\frac{879}{20}$	$-\frac{949}{18}$	41	$-\frac{201}{10}$	$\frac{1019}{180}$	$-\frac{7}{10}$	6

Table A.3: Difference approximations to the third order derivative.

	a_{-3}	a_{-2}	a_{-1}	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	n
31			-1	3	-3	1					1
32				-1	3	-3	1				1
33		$-\frac{1}{2}$	1	0	-1	$\frac{1}{2}$					2
34			$-\frac{3}{2}$	5	-6	3	$-\frac{1}{2}$				2
35				$-\frac{5}{2}$	9	-12	7	$-\frac{3}{2}$			2
36		$-\frac{1}{4}$	$-\frac{1}{4}$	$\frac{5}{2}$	$-\frac{7}{2}$	$\frac{7}{4}$	$-\frac{1}{4}$				3
37			$-\frac{7}{4}$	$\frac{25}{4}$	$-\frac{17}{2}$	$\frac{11}{2}$	$-\frac{7}{4}$	$\frac{1}{4}$			3
38				$-\frac{17}{4}$	$\frac{71}{4}$	$-\frac{59}{2}$	$\frac{49}{2}$	$-\frac{41}{4}$	$\frac{7}{4}$		3
39	$\frac{1}{8}$	-1	$\frac{13}{8}$	0	$-\frac{13}{8}$	1	$-\frac{1}{8}$				4
40		$-\frac{1}{8}$	-1	$\frac{35}{8}$	-6	$\frac{29}{8}$	-1	$\frac{1}{8}$			4
41			$-\frac{15}{8}$	7	$-\frac{83}{8}$	8	$-\frac{29}{8}$	1	$-\frac{1}{8}$		4
42				$-\frac{49}{8}$	29	$-\frac{461}{8}$	62	$-\frac{307}{8}$	13	$-\frac{15}{8}$	4

Table A.4: Difference approximations to the fourth order derivative.

	a_{-3}	a_{-2}	a_{-1}	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7	n
43			1	-4	6	-4	1					1
44				1	-4	6	-4	1				1
45		1	-4	6	-4	1						2
46			2	-9	16	-14	6	-1				2
47				3	-14	26	-24	11	-2			2
48		$\frac{5}{6}$	-3	$\frac{7}{2}$	$-\frac{2}{3}$	$-\frac{3}{2}$	1	$-\frac{1}{6}$				3
49			$\frac{17}{6}$	-14	$\frac{57}{2}$	$-\frac{92}{3}$	$\frac{37}{2}$	-6	$\frac{5}{6}$			3
50				$\frac{35}{6}$	-31	$\frac{137}{2}$	$-\frac{242}{3}$	$\frac{107}{2}$	-19	$\frac{17}{6}$		3
51	$-\frac{1}{6}$	2	$-\frac{13}{2}$	$\frac{28}{3}$	$-\frac{13}{2}$	2	$-\frac{1}{6}$					4
52		$\frac{2}{3}$	$-\frac{11}{6}$	0	$\frac{31}{6}$	$-\frac{22}{3}$	$\frac{9}{2}$	$-\frac{4}{3}$	$\frac{1}{6}$			4
53			$\frac{7}{2}$	$-\frac{56}{3}$	$\frac{85}{2}$	-54	$\frac{251}{6}$	-20	$\frac{11}{2}$	$-\frac{2}{3}$		4
54				$\frac{28}{3}$	$-\frac{111}{2}$	142	$-\frac{1219}{6}$	176	$-\frac{185}{2}$	$\frac{82}{3}$	$-\frac{7}{2}$	4