

数值計算法

2010 / 6 / 2

林田 清

(大阪大学大学院理学研究科)

数値積分1：台形則

$$I = \int_a^b f(x)dx$$

N 個の台形の面積の和T

$$T = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{h}{2} \{f(a + jh) + f(a + (j+1)h)\}$$

$[a, b]$ を N 等分したときの各 x 座標の値

$$x_j = a + jh$$

($j = 0, 1, 2, \dots, N$)を分点という。

分点の数が多いほど精度があがる。

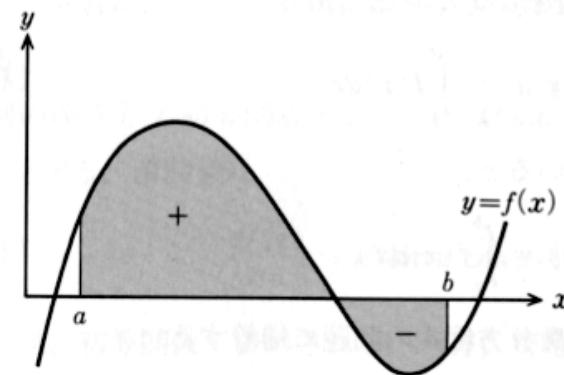


図 4-1 関数の定積分と
グラフの関係

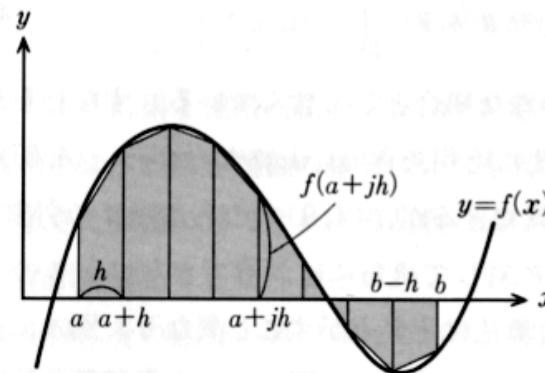


図 4-2 台形の集合による領域の近似

数値計算(高橋大輔著、岩波)より

台形則の精度

表 4-1 台形則による積分近似値

(a) $I = \int_0^1 \exp(x) dx = 1.71828182\cdots$ の場合			(b) $I = \int_0^2 \cos x dx = 0.90929742\cdots$ の場合		
N	積分近似値 T	誤差 $ T-I $	N	積分近似値 T	誤差 $ T-I $
1	1.85914091	1.408×10^{-1}	1	0.58385316	3.254×10^{-1}
2	1.75393109	3.564×10^{-2}	2	0.83222888	7.706×10^{-2}
4	1.72722190	8.940×10^{-3}	4	0.89027432	1.902×10^{-2}
8	1.72051859	2.236×10^{-3}	8	0.90455656	4.740×10^{-3}
16	1.71884112	5.593×10^{-4}	16	0.90811313	1.184×10^{-3}
32	1.71842166	1.398×10^{-4}	32	0.90900141	2.960×10^{-4}
64	1.71831678	3.495×10^{-5}	64	0.90922342	7.400×10^{-5}
128	1.71829056	8.739×10^{-6}	128	0.90927892	1.849×10^{-5}
256	1.71828401	2.184×10^{-6}	256	0.90929280	4.624×10^{-6}
512	1.71828237	5.462×10^{-7}	512	0.90929627	1.156×10^{-6}
1024	1.71828196	1.365×10^{-7}	1024	0.90929713	2.890×10^{-7}

数値計算(高橋大輔著、岩波)より

台形則のアルゴリズム(の一例)

N を2倍づつ増やしていく結果の収束を見る

(1) $\varepsilon := 10^{-p}, N := 1, h := b - a, T := h \{f(a) + f(b)\} / 2$

(2) 以下

$N := 2N, h := h / 2,$

$s := 0$

$i := 1, 3, \dots, N - 1$ の順に $s := s + f(a + ih)$ を繰り返す

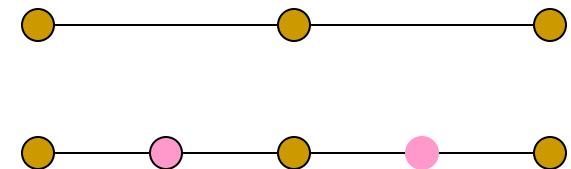
$new_T := T / 2 + h \cdot s$

もし $|new_T - T| < \varepsilon |new_T|$ ならば (3) に移る

そうでなければ $T := new_T$

を繰り返す

(3) new_T を答えとする



シンプソン則1

3個の分点 x_j, x_{j+1}, x_{j+2} を含む区間 $[x_j, x_{j+2}]$ で関数 $f(x)$ を
二次曲線で近似する (ラグランジエの補間多項式)

$$\begin{aligned} P(x) &= \frac{(x - x_{j+1})(x - x_{j+2})}{(x_j - x_{j+1})(x_j - x_{j+2})} f(x_j) + \frac{(x - x_j)(x - x_{j+2})}{(x_{j+1} - x_j)(x_{j+1} - x_{j+2})} f(x_{j+1}) \\ &\quad + \frac{(x - x_j)(x - x_{j+1})}{(x_{j+2} - x_j)(x_{j+2} - x_{j+1})} f(x_{j+2}) \end{aligned}$$

区間 $[x_j, x_{j+2}]$ の $f(x)$ の積分を $P(x)$ の積分で近似すると

$$\begin{aligned} \int_{x_j}^{x_{j+2}} P(x) dx &= h \int_0^2 \left\{ \frac{1}{2}(t-1)(t-2)f(x_j) - t(t-2)f(x_{j+1}) + \frac{1}{2}t(t-1)f(x_{j+2}) \right\} dt \\ &= \frac{h}{3} \{ f(x_j) + 4f(x_{j+1}) + f(x_{j+2}) \} \end{aligned}$$

シンプソン則2

$$S = \frac{h}{3} \{ f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2) \} + \frac{h}{3} \{ f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4) \} + \dots$$

$$+ \frac{h}{3} \{ f(x_{N-2}) + 4f(x_{N-1}) + f(x_N) \}$$

$$= \frac{h}{3} \{ f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \dots \}$$

$$+ 2f(x_{N-2}) + 4f(x_{N-1}) + f(x_N) \}$$

$N = 2^n$ ($n=1,2,\dots$)としたときの S (シンプソン則での積分値) を S_n 、

台形則での積分値を T_n とすると

$$\frac{4}{3}T_{n+1} - \frac{1}{3}T_n = S_{n+1}$$
 の関係がなりたつ (証明してみよ)

シンプソン則のアルゴリズム(の一例)

(1) $\varepsilon := 10^{-p}, N := 2, h := b - a, T := h \{ f(a) + 2f((a+b)/2) + f(b) \} / 2,$
 $S := h \{ f(a) + 4f((a+b)/2) + f(b) \} / 3$

(2) 以下

$$N := 2N, h := h / 2, s := 0$$

$i := 1, 3, \dots, N-1$ の順に $s := s + f(a + ih)$ を繰り返す

$$\text{new_}T := T / 2 + h \cdot s$$

$$\text{new_}S := (4\text{new_}T - T) / 3$$

もし $|\text{new_}S - S| < \varepsilon |\text{new_}S|$ ならば (3) に移る

そうでなければ $S := \text{new_}S$

を繰り返す

(3) $\text{new_}S$ を答えとする

シンプソン則の精度(台形則に比べてNが小さくてすむ)

表 4-2 シンプソン則による積分近似値

(a) $I = \int_0^1 \exp(x) dx = 1.718281828459045\dots$ の場合

N	積分近似値 S	誤差 $ S-I $
2	1.718861151876592	5.793×10^{-4}
4	1.718318841921747	3.701×10^{-5}
8	1.718284154699896	2.326×10^{-6}
16	1.718281974051891	1.455×10^{-7}
32	1.718281837561771	9.102×10^{-9}
64	1.718281829028015	5.689×10^{-10}
128	1.718281828494606	3.556×10^{-11}
256	1.718281828461267	2.222×10^{-12}
512	1.718281828459183	1.381×10^{-13}
1024	1.718281828459054	8.959×10^{-14}

(b) $I = \int_0^2 \cos x dx = 0.909297426825681\dots$ の場合

N	積分近似値 S	誤差 $ S-I $
2	0.915020795641805	5.723×10^{-3}
4	0.909622804905573	3.253×10^{-4}
8	0.909317307635521	1.988×10^{-5}
16	0.909298662437128	1.235×10^{-6}
32	0.909297503943639	7.711×10^{-8}
64	0.909297431643873	4.818×10^{-9}
128	0.909297427126792	3.011×10^{-10}
256	0.909297426844500	1.881×10^{-11}
512	0.909297426826858	1.176×10^{-12}
1024	0.909297426825754	7.317×10^{-14}

数値計算(高橋大輔著、岩波)より

常微分方程式

常微分方程式

1階常微分方程式の初期値問題

$$\begin{cases} y' = f(t, y) \\ y(0) = a \end{cases}$$

連立1階常微分方程式

$$\begin{cases} y_1' = f_1(t, y_1, y_2) \\ y_2' = f_2(t, y_1, y_2) \\ y_1(0) = a_1, y_2(0) = a_2 \end{cases}$$

2階常微分方程式

$$\begin{cases} y'' = f(t, y, y') \\ y(0) = a_1, y'(0) = a_2 \end{cases}$$

2階常微分方程式の境界値問題

$$\begin{cases} y'' = f(t, y, y') \\ y(0) = a_1, y(1) = a_2 \end{cases}$$

微分と差分

$$x=a\text{での微分係数} f'(a) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h} \{f(a+h) - f(a)\}$$

$$\text{差分商 } D = \frac{1}{h} \{f(a+h) - f(a)\}$$

$$\Delta x > 0 \text{として前進差分商 } \frac{1}{\Delta x} \{f(a + \Delta x) - f(a)\}$$

$$\text{後進差分商 } \frac{1}{\Delta x} \{f(a) - f(a - \Delta x)\}$$

$$\text{中心差分商 } \frac{1}{\Delta x} \left\{ f\left(a + \frac{\Delta x}{2}\right) - f\left(a - \frac{\Delta x}{2}\right) \right\}$$

前進差分商、後進差分商は $O(\Delta x)$ 、中心差分商は $O((\Delta x)^2)$

$$\text{2階差分商は例えば } \frac{1}{(\Delta x)^2} \{f(a + \Delta x) - 2f(a) + f(a - \Delta x)\}$$

差分方程式

1階常微分方程式の初期値問題 $\begin{cases} y' = f(t, y) \\ y(0) = a \end{cases}$

微分係数を差分商で近似する

$$\frac{1}{\Delta t} \{Y(t + \Delta t) - Y(t)\} = f(t, Y(t))$$

これが差分方程式で $Y(t)$ がその解。変形すると

$$Y(t + \Delta t) = Y(t) + \Delta t f(t, Y(t))$$

格子点 $t_j = j\Delta t$ における Y の値 $Y(j\Delta t) \equiv Y_j$ とすると

$$\begin{cases} \frac{1}{\Delta t} \{Y_{j+1} - Y_j\} = f(t_j, Y_j) \\ Y_0 = a \end{cases}$$

という漸化式を得る

$$Y_{j+1} = Y_j + \Delta t f(t_j, Y_j)$$

として解ける

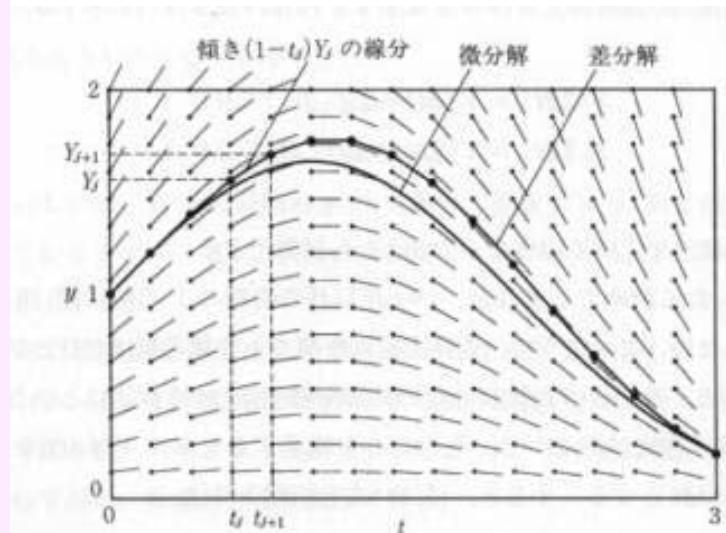


図 5-13 微分解と差分解 ($\Delta t = 0.2$)

いろいろな差分法

(1) オイラー法(Euler's method)

$$\frac{1}{\Delta t} \{Y_{j+1} - Y_j\} = f(t_j, Y_j)$$

(2) ホイン法(Heun's method)

$$k_1 = f(t_j, Y_j), k_2 = f(t_j + \Delta t, Y_j + \Delta t k_1)$$

$$\frac{1}{\Delta t} \{Y_{j+1} - Y_j\} = \frac{1}{2}(k_1 + k_2)$$

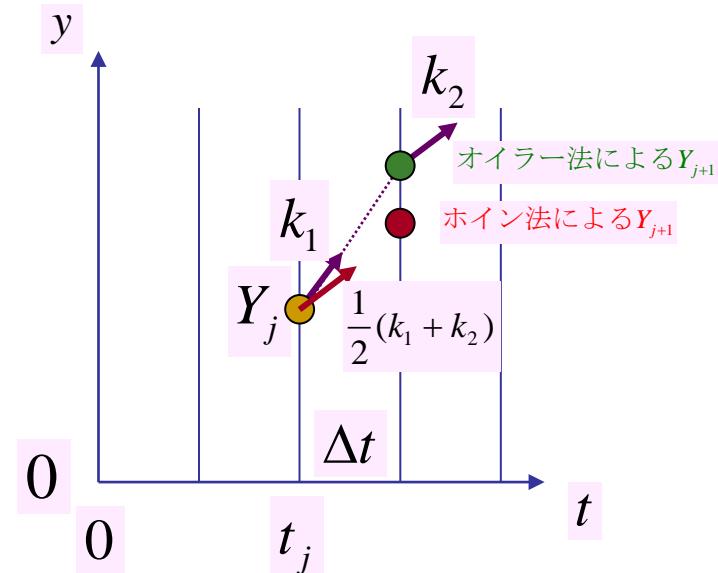
(3) ルンゲ-クッタ法(Runge-Kutta method)

$$k_1 = f(t_j, Y_j), k_2 = f(t_j + \frac{\Delta t}{2}, Y_j + \frac{\Delta t}{2} k_1),$$

$$k_3 = f(t_j + \frac{\Delta t}{2}, Y_j + \frac{\Delta t}{2} k_2), k_4 = f(t_j + \Delta t, Y_j + \Delta t k_3),$$

$$\frac{1}{\Delta t} \{Y_{j+1} - Y_j\} = \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

いずれの方法でも Y_{j+1} の算出に一つ前の時刻の Y_j しか使っていない。
「1段階法」



近似の誤差

- 微分方程式の解と、その近似である差分方程式の解の差が誤差の評価になる

$$\delta = \left| \frac{y(t_{j+1}) - y(t_j)}{\Delta t} - F(t_j, y(t_j)) \right|$$

局所打ち切り誤差

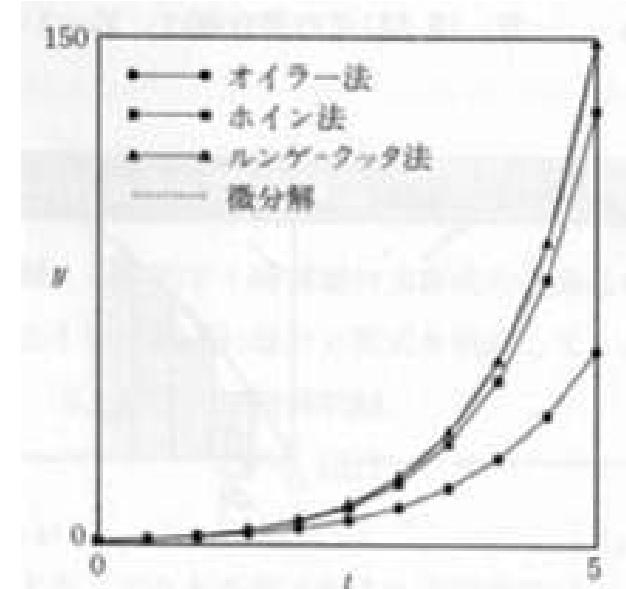


図 5-15 $\Delta t=1/2$ のときの各方法の比較

連立1階常微分方程式と2階常微分方程式

$$\begin{aligned} \text{2階常微分方程式} & \left\{ \begin{array}{l} y'' = f(t, y, y') \\ y(0) = a_1, y'(0) = a_2 \end{array} \right. \end{aligned}$$

で $y(t) \rightarrow y_1(t), y'(t) \rightarrow y_2(t)$ とおきかえると

$$\begin{aligned} \text{連立1階常微分方程式} & \left\{ \begin{array}{l} y_1' = f_1(t, y_1, y_2) \\ y_2' = f_2(t, y_1, y_2) \\ y_1(0) = a_1, y_2(0) = a_2 \end{array} \right. \end{aligned}$$

に帰着する。

$t_j = j\Delta t, Y_j^{(1)}, Y_j^{(2)}$ を微分解 $y_1(t_j), y_2(t_j)$ に対応する差分解とすると

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\Delta t}(Y_{j+1}^{(1)} - Y_j^{(1)}) = f_1(t_j, Y_j^{(1)}, Y_j^{(2)}) \\ \frac{1}{\Delta t}(Y_{j+1}^{(2)} - Y_j^{(2)}) = f_2(t_j, Y_j^{(1)}, Y_j^{(2)}) \\ Y_0^{(1)} = a_1, Y_0^{(2)} = a_2 \end{array} \right.$$

左はオイラー法の場合、ルン
ゲクッタ法ではどうなるか？

計算の不安定性

- 差分法では刻み幅 Δt の取り方と方程式の形によっては計算結果に不安定性が生じる
- Δt を小さくとれば解消する場合もあるが、 Δt を小さくとりすぎると丸め誤差の影響が無視できなくなる
 - 計算結果が得られたらグラフにして答えが妥当かチェックする
 - 極限での振る舞いなどを予想と比べる

常微分方程式の応用例1

- Rutherford散乱(原子核同士の散乱;金の薄膜に α 粒子をあてる)

$$\text{クーロン力 } f = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Ze^2}{r^2} \text{ から } f_x = f \cos\theta = f \frac{x}{r}, f_y = f \sin\theta = f \frac{y}{r}$$

α 粒子のx方向、y方向の速度と座標について

$$\begin{cases} \frac{dv_x}{dt} = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_\alpha} \frac{x}{r^3}, \frac{dv_y}{dt} = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 m_\alpha} \frac{y}{r^3} \\ \frac{dx}{dt} = v_x, \frac{dy}{dt} = v_y \end{cases}$$

を差分方程式に変換して $t=0$ から計算していく。

任意の位置(衝突パラメータ)に対する粒子の軌跡が描ける。

*) 引力に符号を変えればそのまま天体の衝突の式に使える

常微分方程式の応用例2

■ 恒星の内部構造

$$\text{静水圧平衡} : \frac{dp}{dr} = -\frac{GM_r}{r^2} \rho$$

$$\text{熱平衡} : \frac{dL_r}{dr} = 4\pi r^2 \rho \varepsilon$$

$$\text{熱輸送の条件} : \frac{dT}{dr} = -\frac{3\kappa\rho}{4ac} \frac{1}{T^3} \frac{L_r}{4\pi r^2}$$

$$\text{自己重力の条件} : \frac{dM_r}{dr} = 4\pi r^2 \rho$$

r を独立変数とした、4つの変数(圧力 p , 温度 T , 半径 r より内側の質量 M_r , 半径 r の球面を通過するエネルギー流量 L_r)についての常微分方程式

常微分方程式の境界値問題

(例) 時間に依存しないShrodinger方程式

$x = 0, x = 1$ に無限に高いポテンシャルの壁

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} = E\phi \\ \phi(0) = \phi(1) = 0 \end{cases}$$

$E' = E / (\frac{\hbar^2}{2m})$ として差分で近似すると

$$-\phi(x_{j+1}) + 2\phi(x_j) - \phi(x_{j-1}) = (\Delta x)^2 E' \phi(x_j)$$

$$\phi(x_0) = \phi(x_N) = 0$$

上の式は $(\phi(x_1), \dots, \phi(x_{N-1}))$ に対する連立方程式