数値解析特論 I

2009

日付

差分法を中心に

- 数値積分
- 非線形方程式
- 線形連立方程式
- 差分法
- 移流方程式
- 拡散方程式

連絡先

- 中村恭志（すずかけ台G5棟204)
- 内線：5548
- tnakamur@depe.titech.ac.jp

成績評価

- 講義＆演習を行う。
- 演習成果を提出してもらい、評価とする。
- 演習室を利用する際には、講義or掲示にて連絡を行う。

受講要件

- 講義では数値計算を学部等で経験したことを前提に話しをしたい。
- ただし、catch upも十分可能である。

数値解析？

- 物理現象をPDEで記述（モデル化）
- PDEの解を求めるには？
- 理論解析･･･変数分離、完全形、未定係数法

ちょっと複雑になっただけでGive Up!

振動

- 1 個のバネ $$\frac{dx}{dt} = -kx$$

$k = const.$ なら、 $x(t) = A\cos(-kt)$ (理論解析)

- じゃあ、$k \neq const.$ なら?

粒子の衝突

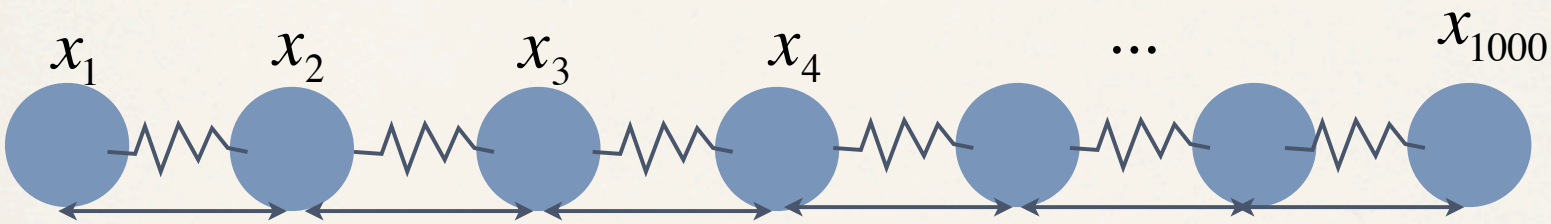
$k = 0$

$k = k(r)$

r

振動

- 複数のバネの場合は？(スプーン 1 杯;100万粒子)



$$\frac{dx_1}{dt} = -k_0(x_0 - x_1) - k_1(x_1 - x_2) + A_1$$

$$\frac{dx_2}{dt} = -k_1(x_1 - x_2) - k_2(x_2 - x_3) + A_2$$

$$\frac{dx_3}{dt} = -k_2(x_2 - x_3) - k_3(x_3 - x_4) + A_3$$

$$\frac{dx_4}{dt} = -k_3(x_3 - x_4) - k_4(x_4 - x_5) + A_4$$

$$\ldots$$

コンピュータ（計算機）

- 複雑なもの、大規模なもの・・・・人間では無理なので計算機

TSUBAME：１００TFLOPS

FLOPS: 1 秒間に何回（浮動）少数点の計算できるか？

（足し算、引き算、割り算、かけ算；四則演算）

Tela：1,000,000,000,000（10の12乗）

体験

- 0.12487284618+0.87512715382=?

こたえ

- 0.12487284618+0.87512715382=1.0000000000

2008年5月1日 66億6000万人

100TFLOPS= 1 秒間に15,100回(0.1msecで)

計算すればOK(楽勝？)

普通のパソコン〜10GFLOPS (0.01TFLOPS)

10GFLOPS= 1 秒間に1.5回計算

(ただし、全人類)

複雑or大規模な問題もコンピュータで楽々？

- 大問題

コンピュータは数値しか記憶 & 計算できない！！！

それも有限の数だけ！！！

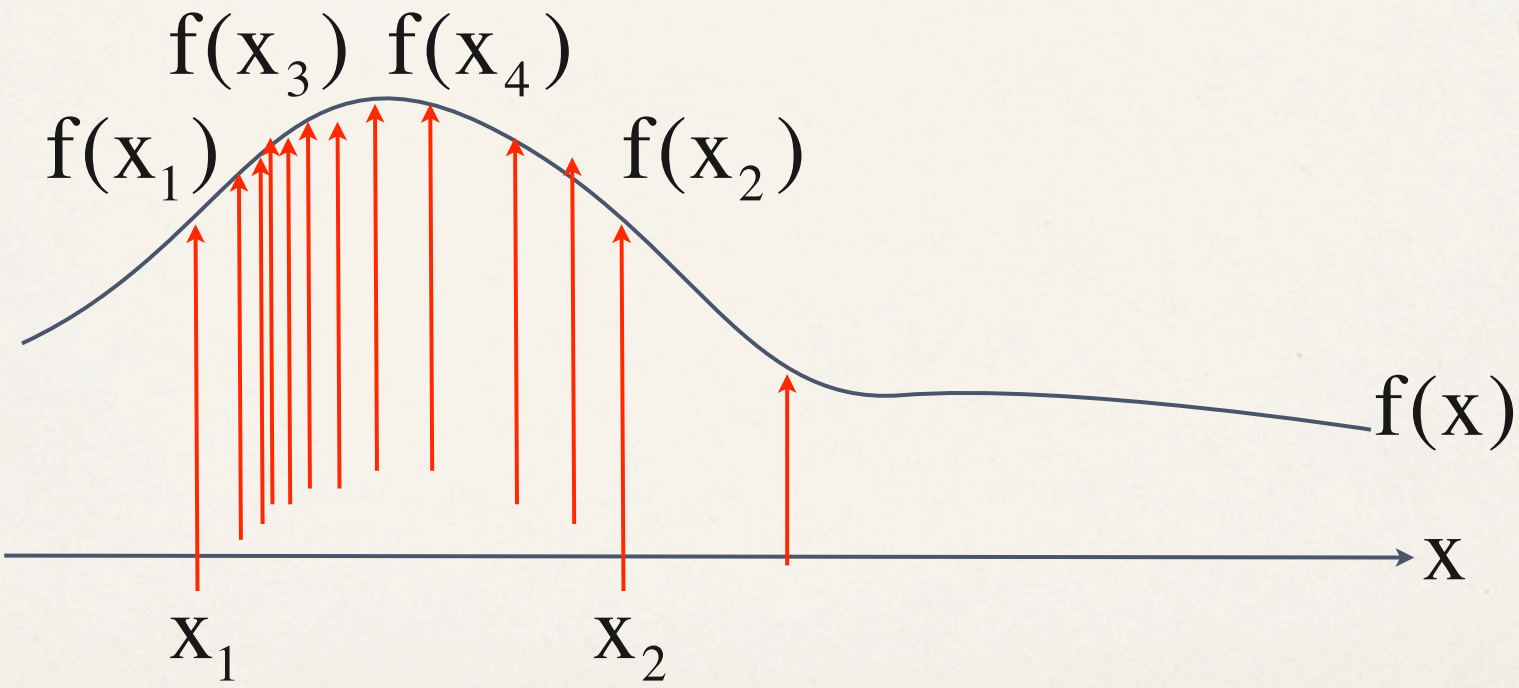
記憶量

- 浮動小数点（REAL/Fortran, float/C)・・・32bit(=4Byte)
- メモリー１GByte　＝　2億個の少数点の値を保存可能

３次元だと、x,y,z各方向に584個の場所だけ保存出来る。

自然界では

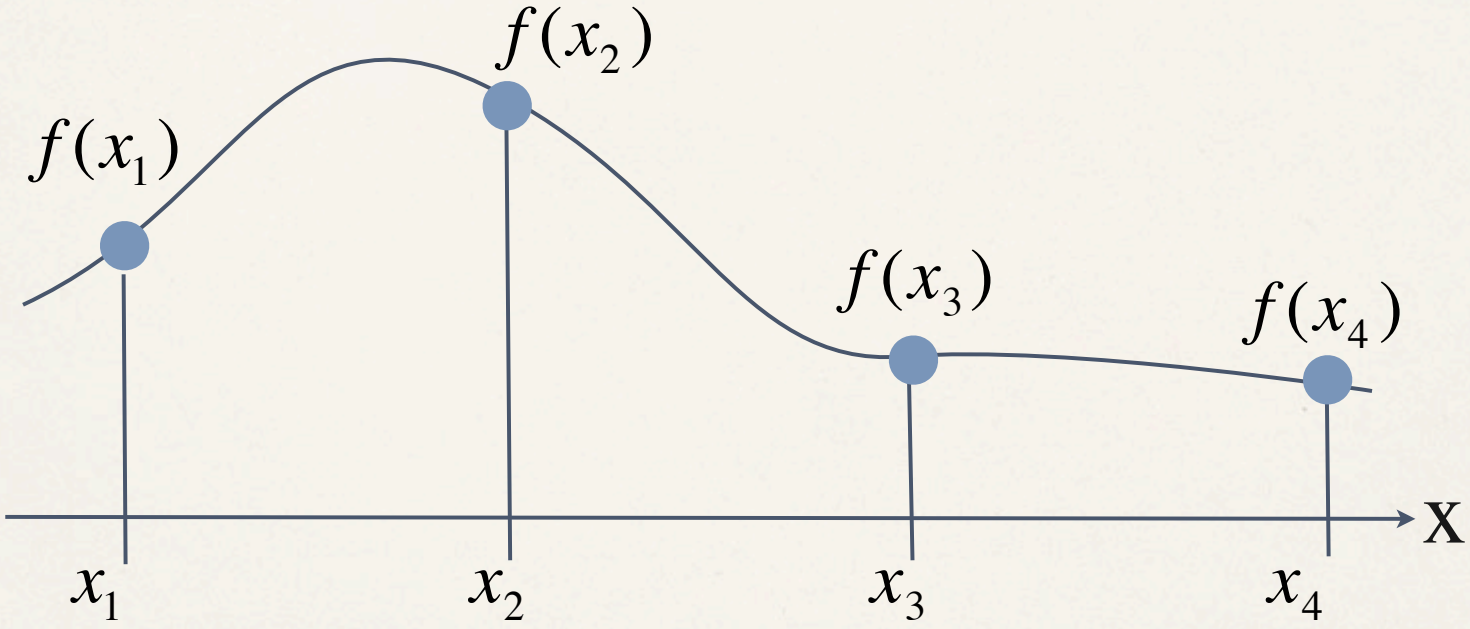
- 物理量（密度、流速、...）・・・連続的に分布している量



どの場所でもある値は存在する！

コンピュータでは

- 記憶出来る値（密度）の総数は決まっている！

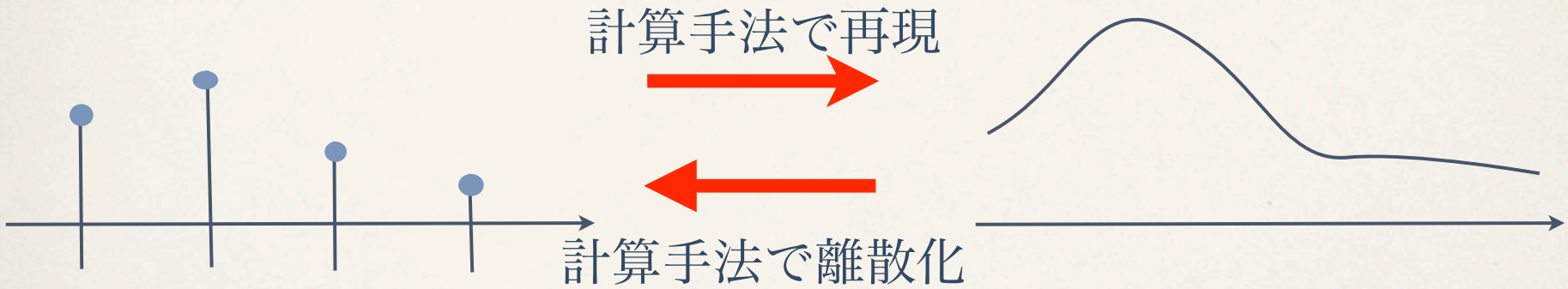


密度の空間分布は幾つかの場所を決めて、そこでの値を保存することしかできない。

計算手法＆離散化

- コンピュータの上にある限られた情報（値）から、如何に実際の正しい解を計算（再現）するのか？その工夫が必要になる

数値解析手法、計算手法（差分法、有限要素法、...）



実際の連続的な世界での問題（PDE)などを、

コンピュータ上での有限個の値に対する問題に書き換えること

「離散化」

離散空間と連続空間を結ぶツール

- 「離散化」に際して良く使用するやり方として二つ紹介

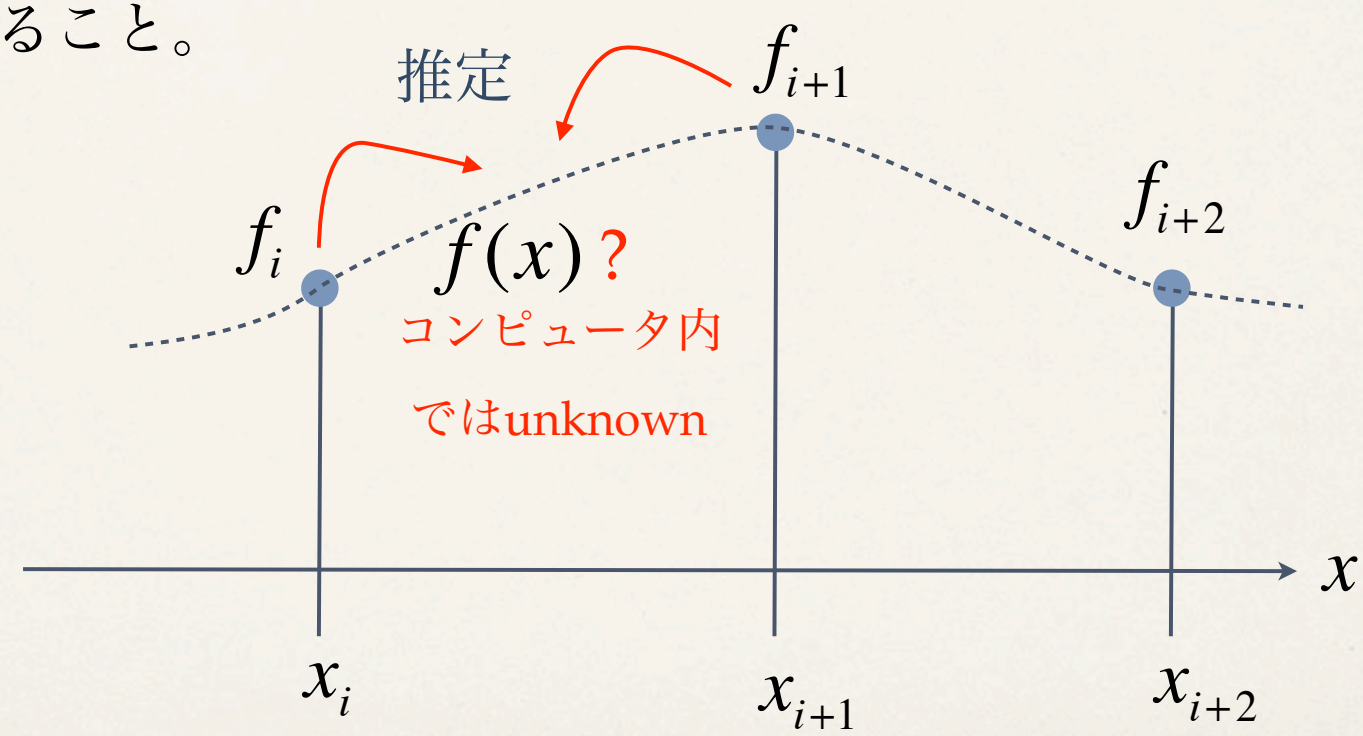
補間(Interpolation)

Taylor展開(Taylor Expansion)

目的：離散値で如何に連続量を推定するか？

補間

- 補間とは、飛び飛びの場所で定義された「離散値」から、その間の値を推定すること。



x_i ＝格子点：コンピュータの内部で記憶する場所（空間）

f_i ＝格子点上での値（コンピュータの内部で記憶）

Lagrange補間

- 補間のやり方も色々あります（そればっか）ですが、Lagrange補間なるものを紹介

有る区間での $f(x)$ の値（連続量）が多項式で書けると仮定する。

1次（直線）：$f(x) \cong Ax + B$

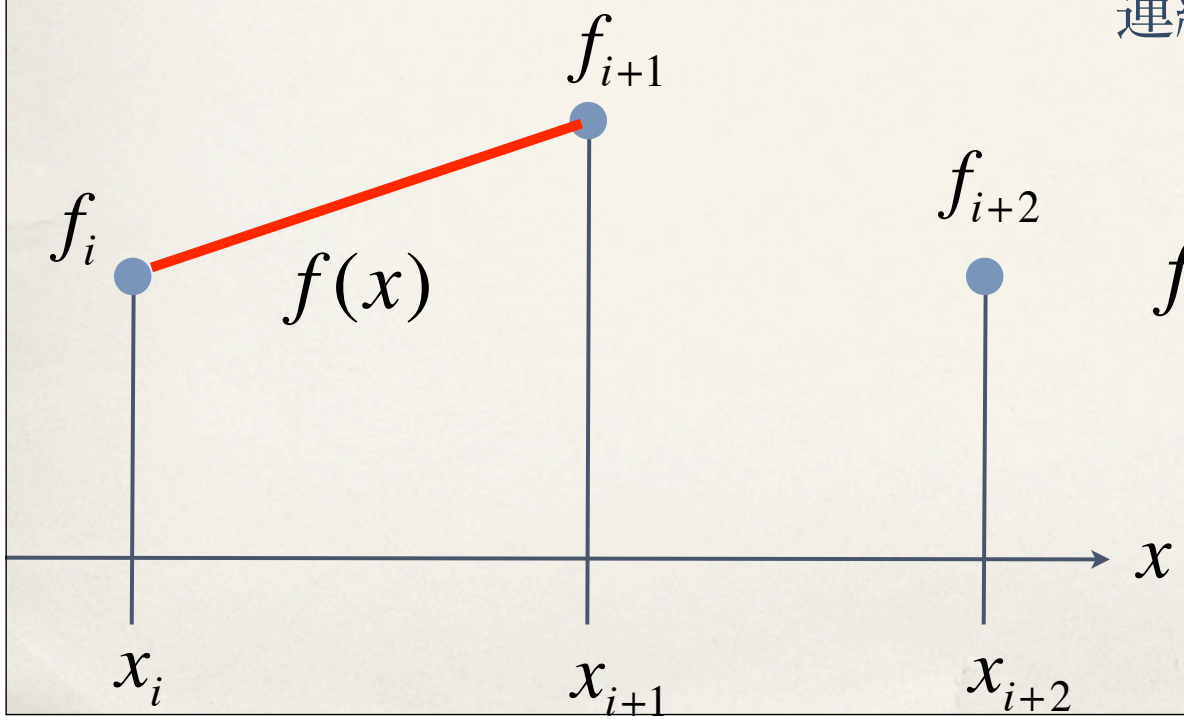
2次：$f(x) \cong Ax^2 + Bx + C$

3次：$f(x) \cong Ax^3 + Bx^2 + Cx + D$

1次（直線）補間

- 格子点での値 f_i はコンピュータ上にあるので、格子点の上ではその値に一致する条件(連続条件）を考える。

区間$[x_i, x_{i+1}]$ で $f(x) \cong Ax + B$



連続条件：

$$f(x_i) \cong Ax_i + B = f_i$$

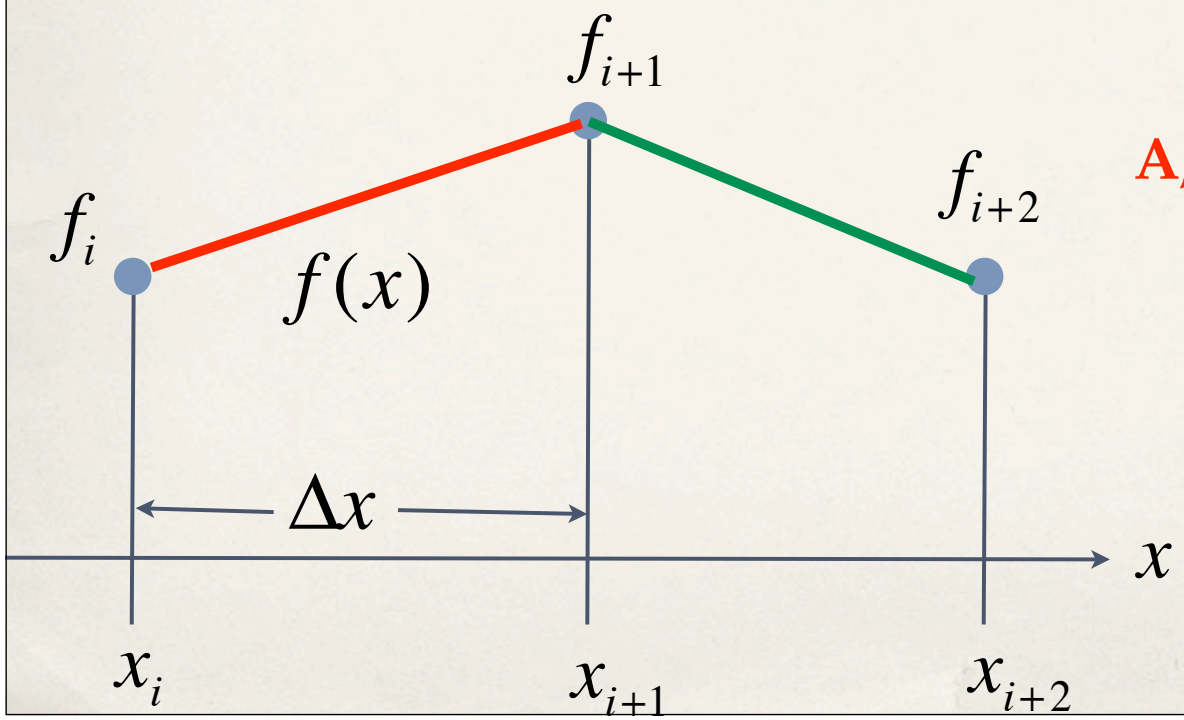
$$f(x_{i+1}) \cong Ax_{i+1} + B = f_{i+1}$$

連立方程式

1次（直線）補間

$$f(x) \cong A(x - x_i) + B$$

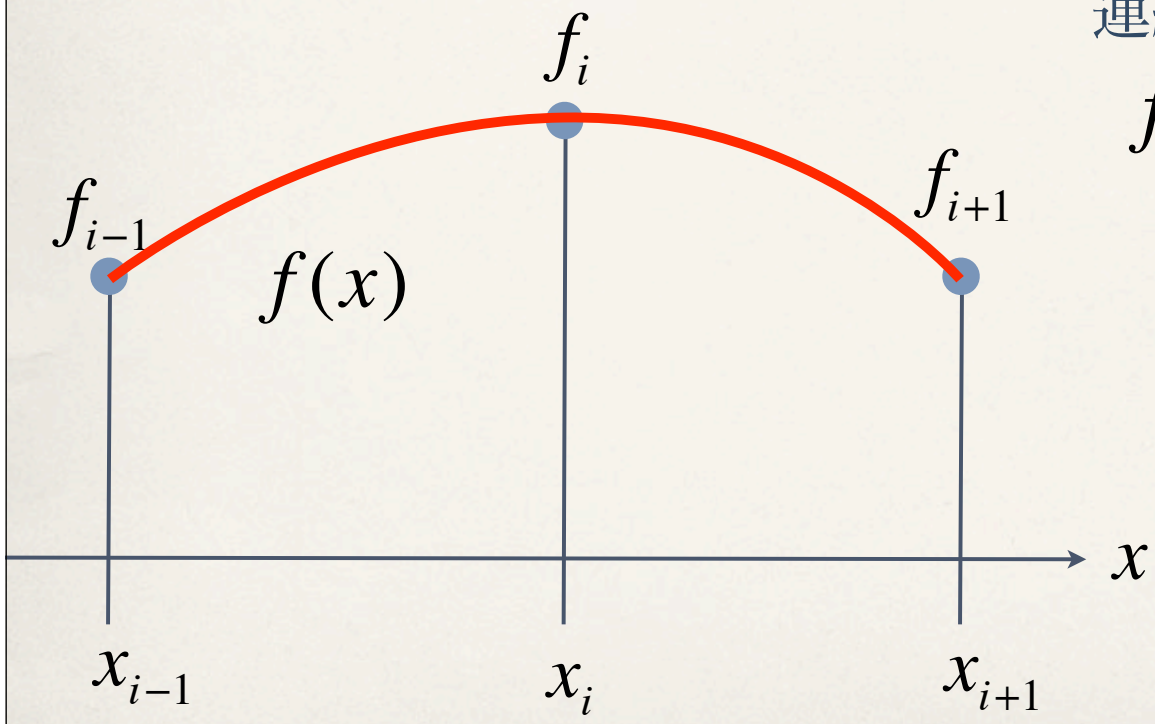
$$A = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} \quad B = f_i$$



A,Bの値は区間ごとに異なる

2次補間

区間$[x_{i-1}, x_{i+1}]$で $f(x) \cong Ax^2 + Bx + C$



連続条件：

$$f(x_{i-1}) \cong Ax_{i-1}^2 + Bx_{i-1} + C = f_{i-1}$$

$$f(x_i) \cong Ax_i^2 + Bx_i + C = f_i$$

$$f(x_{i+1}) \cong Ax_{i+1}^2 + Bx_{i+1} + C = f_{i+1}$$

2次補間

区間$[x_{i-1}, x_{i+1}]$ で　$f(x) \cong A(x - x_i)^2 + B(x - x_i) + C$

$$A = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{2\Delta x^2}$$

$$B = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x}$$

3次補間、４次補間…もLagrange補間では同じ手順で決定できる。

1次、2次,…どっちがGood?　　**またの機会に紹介します。**

Taylor展開

- 連続関数（無限階の微分が可能な関数）：$f(x)$

$$\frac{d}{dx}f(x) \neq \pm\infty, \frac{d^2}{dx^2}f(x) \neq \pm\infty, \frac{d^3}{dx^3}f(x) \neq \pm\infty, ...$$

Taylor展開

任意の点 x における値$f(x)$は以下の級数で必ず正確に与えられる！

$$f(x) = f(x_0) + \frac{df(x_0)}{dx}X + \frac{1}{2}\frac{d^2 f(x_0)}{dx^2}X^2 + \frac{1}{6}\frac{d^3 f(x_0)}{dx^3}X^3 + \frac{1}{24}\frac{d^4 f(x_0)}{dx^4}X^4 + ...$$

$$= f(x_0) + \sum_k^{\infty}\frac{X^k}{k!}\left(\frac{d^k f(x_0)}{dx^k}\right)$$

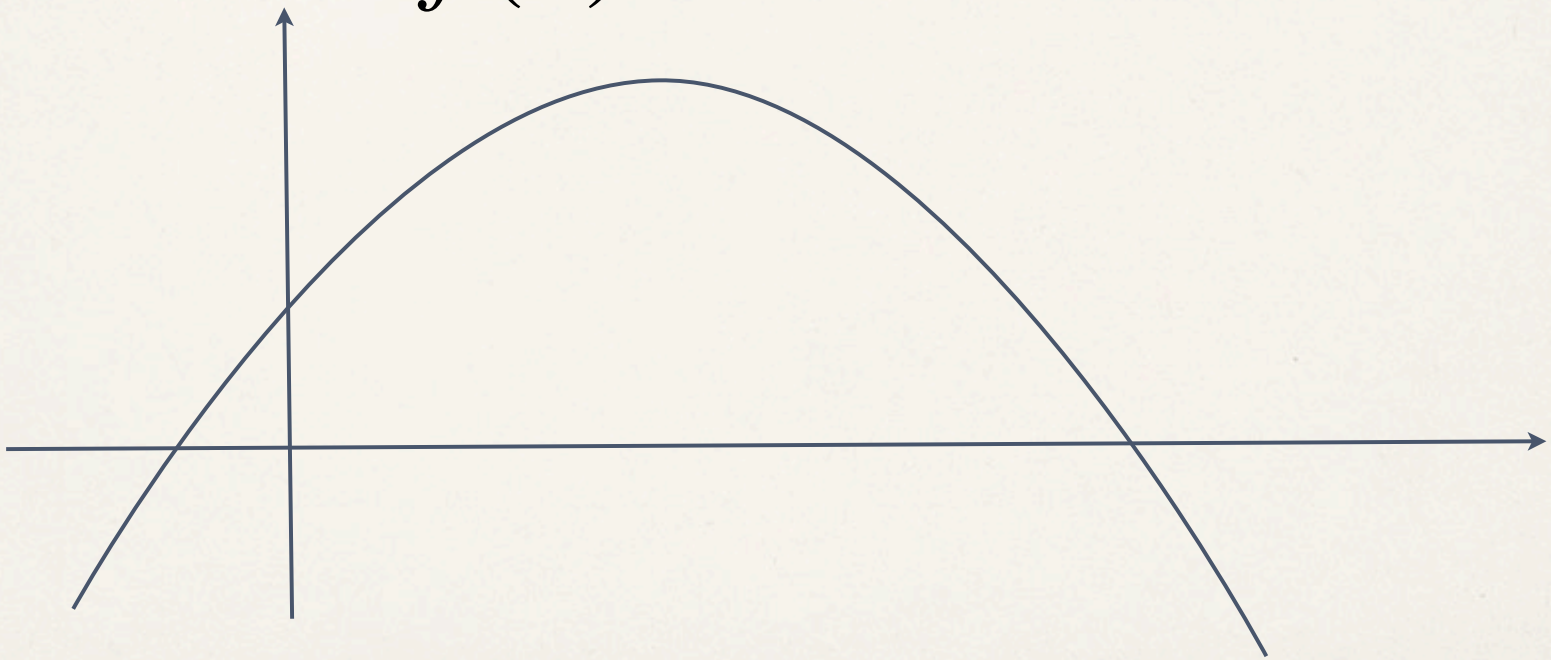
x_0 :任意の点

$X = x - x_0 : x_0$ からの距離

ほんまか？

- ためしてみる。

$$f(x) = -2x^2 + x + 1$$



Taylor展開！

- $x_0 = 0$ を中心として。

$$f(x_0) = f(0) = ?$$

$$\frac{df(x_0)}{dx} = \frac{d}{dx}\left[-2x^2 + x + 1\right]_{x=0} = ?$$

$$\frac{d^2 f(x_0)}{dx^2} = \frac{d^2}{dx^2}\left[-2x^2 + x + 1\right]_{x=0} = ?$$

$$\frac{d^3 f(x_0)}{dx^3} = \frac{d^3}{dx^3}\left[-2x^2 + x + 1\right]_{x=0} = ?$$

Taylor展開！

- $x_0 = 0$ を中心として。

$$f(x_0) = f(0) = -2 \times 0^2 + 0 + 1 = 1$$

Taylor展開！

- $x_0 = 0$ を中心として。

$$f(x_0) = f(0) = 1$$

$$\frac{df(x_0)}{dx} = \frac{d}{dx}\left[-2x^2 + x + 1\right]_{x=0} = \left[-4x^2 + 1\right]_{x=0} = 1$$

$$\frac{d^2 f(x_0)}{dx^2} = \frac{d^2}{dx^2}\left[-2x^2 + x + 1\right]_{x=0} = \left[-4\right]_{x=0} = -4$$

$$\frac{d^3 f(x_0)}{dx^3} = \frac{d^3}{dx^3}\left[-2x^2 + x + 1\right]_{x=0} = 0$$

Taylor展開

- Taylor展開の右辺に代入してみる。（３階微分以上は全て0）

$$Taylor = f(x_0) + \sum_k^{\infty} \frac{X^k}{k!}\left(\frac{d^k f(x_0)}{dx^k}\right)$$

$$= f(x_0) + \frac{df(x_0)}{dx}X + \frac{1}{2}\frac{d^2 f(x_0)}{dx^2}X^2 + \frac{1}{6}\frac{d^3 f(x_0)}{dx^3}X^3 + \frac{1}{24}\frac{d^4 f(x_0)}{dx^4}X^4 + ...$$

$$= 1 \quad + 1 \times X \quad + \frac{1}{2} \times (-4) \times X^2 + \frac{1}{6} \times 0 \times X^3 \quad + \frac{1}{24} \times 0 \times X^4 \quad + ...$$

$$= 1 + X - 2X^2 + 0$$

$X = x - x_0 = x - 0$ だから、

$$Taylor = 1 + x - 2x^2$$

あってるじゃん！

Taylor展開（脱線）

- 自然対数の底"e"の値はどうやって求められるか知ってます？

  e= ２．７１８２８１８２８４５９０４５２３５３６０２８７４７１３５
  ２６６２４９７７５７２４７０９３６９９９５．．．

超越数：どこまでいっても正確な値がわからない（円周率）

$f(x)=e^x$を $x_0=0$ でTaylor展開すると、$\dfrac{d^k e^x}{dx^k}=e^x$ だから、

$$f(x)=e^x=e^0+e^0x+\frac{1}{2}e^0x^2+\ldots=1+\sum_{k=1}^{\infty}\frac{x^k}{k!}$$

Taylor展開（脱線）

- 自然対数の底"e"の値はどうやって求められるか知ってます？

  e= ２．７１８２８１８２８４５９０４５２３５３６０２８７４７１３５
  ２６６２４９７７５７２４７０９３６９９９５．．．

$x = 1$ を代入し

$$f(1) = e = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1^k}{k!} = 1 + 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3!} + \frac{1}{4!} + \frac{1}{5!} + \ldots.$$

Taylor展開（脱線）

- 自然対数の底"e"の値はどうやって求められるか知ってます？

e= ２．７１８２８１８２８４５９０４５２３５３６０２８７４７１３５
２６６２４９７７５７２４７０９３６９９９５．．．

検算

$$1+1=2$$

$$1+1+\frac{1}{2}=2.5$$

$$1+1+\frac{1}{2}+\frac{1}{3!}=2.5+\frac{1}{6}=2.5+0.16666666=2.66666666$$

$$1+1+\frac{1}{2}+\frac{1}{3!}+\frac{1}{4!}=2.666666+\frac{1}{24}=2.66666+0.0416666=2.7083333$$

本題にもどりますと

* **Taylor展開が、離散と連続をつなぐのに重要な理由！**

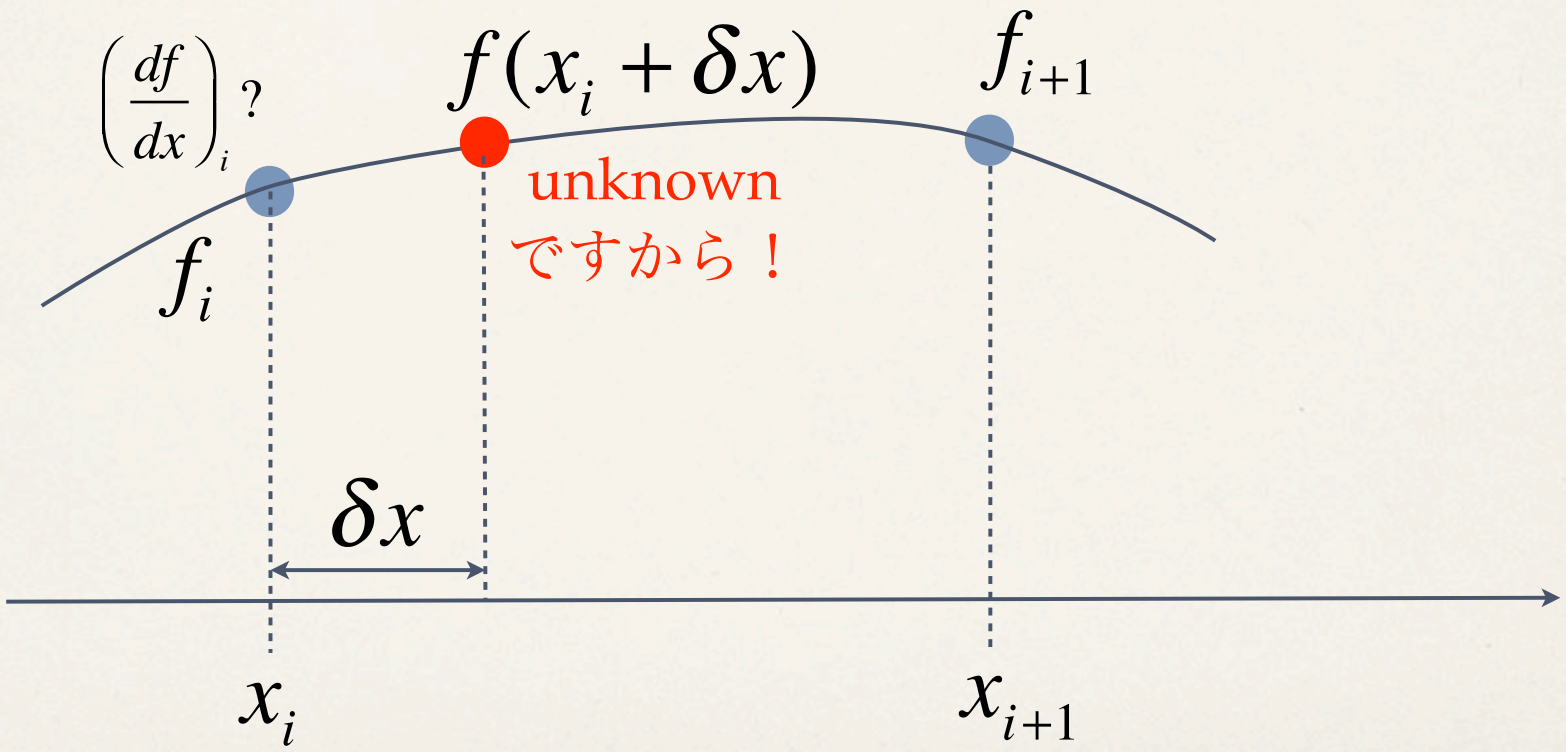
①微分を推定できる、②その他大勢（誤差の解析）

微分の定義：格子点における微分を考えてみると

$$\frac{df(x_i)}{dx} = \lim_{\delta x \to 0} \frac{f(x_i + \delta x) - f(x_i)}{\delta x}$$

コンピュータ上での微分は？

- 実は厳密にはできません



Taylor展開で近似方法を考える

- Taylor展開をxiを中心にしてみる。

$$f(x) = f(x_i) + \left(\frac{df(x_i)}{dx}\right)(x - x_i) + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2 f(x_i)}{dx^2}\right)(x - x_i)^2 + O((x - x_i)^3)$$

$$\therefore f(x) = f_i + \left(\frac{df}{dx}\right)_i (x - x_i) + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2 f}{dx^2}\right)_i (x - x_i)^2 + O((x - x_i)^3)$$

これが知りたい！

Taylor展開で近似方法を考える

- $x = x_{i+1} = x_i + \Delta x$ としてみよう

$$f(x_{i+1}) = f_i + \left(\frac{df}{dx}\right)_i \Delta x + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2 f}{dx^2}\right)_i \Delta x^2 + O(\Delta x^3)$$

$f(x_{i+1}) = f_{i+1}$ で、コンピュータの上に記憶している

$$f_{i+1} = f_i + \left(\frac{df}{dx}\right)_i \Delta x + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2 f}{dx^2}\right)_i \Delta x^2 + O(\Delta x^3)$$

$$\therefore \left(\frac{df}{dx}\right)_i \Delta x = \left(f_{i+1} - f_i\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{d^2 f}{dx^2}\right)_i \Delta x^2 + O(\Delta x^3)$$

微分の近似がTaylor展開から分かる

$$\left(\frac{df}{dx}\right)_i = \frac{\left(f_{i+1} - f_i\right)}{\Delta x} - \frac{1}{2}\left(\frac{d^2 f}{dx^2}\right)_i \Delta x + O(\Delta x^2)$$

- Δxを十分小さくすれば、

$$\therefore \left(\frac{df}{dx}\right)_i \cong \frac{\left(f_{i+1} - f_i\right)}{\Delta x}$$

差分近似（差分法のエッセンス）