コンピュータ･シミュレーションのアプローチ

現象

数学的（物理的）モデル化 ↓

数学モデル（微分方程式）

離散化（差分法、有限要素法、有限体積法、境界要素法、など） ↓

●精度（誤差）

数値モデル（代数方程式）

↓

●安定性

解析結果

●収束性

（メッシュを細かくしたときに理論解に収束するか？）

数値モデル化＝離散化とは

$$\frac{dQ(t)}{dt} = -\lambda Q(t)$$ ･･･例2

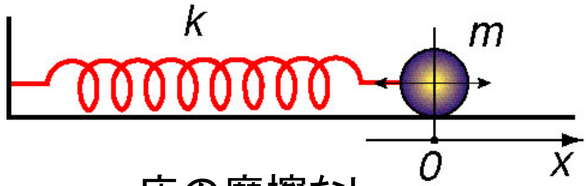
微分方程式は、連続な系であり、そのままコンピュータ上では取り扱えない（コンピュータは0,1の離散データ（ビット）の演算を高速で行う装置＝高級電卓）。

$$\boxed{\frac{q(t+t)-q(t)}{\Delta t} = -\lambda q(t)}$$

コンピュータ上で取り扱える式（代数方程式＝四則演算のみの式）に変換することを離散化という。

例1　バネにつながれたおもりの動き(I)

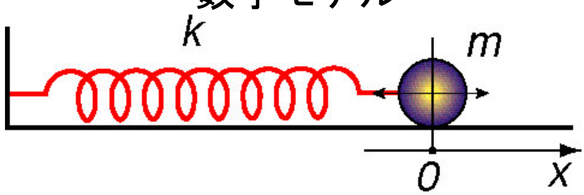
～現象～



床の摩擦なし

例1　バネにつながれたおもりの動き(II)

～数学モデル～



おもりに働く力はバネの伸びに比例

$$F = -kx$$

k: 比例係数

$$m\frac{d^2x(t)}{dt^2} = -kx(t)$$

m: おもりの質量

例1　バネにつながれたおもりの動き(III)

～厳密解(理論解)～

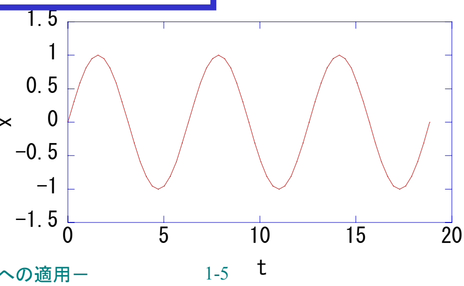
$$m\frac{d^2x(t)}{dt^2}=-kx(t)$$

簡単のため　$m=k=1$

初期条件　$x(t=0)=0,\ \left.\frac{dx}{dt}\right|_{t=0}=1$

Q:理論解を求めよ。

理論解



例1　バネにつながれたおもりの動き(IV)

～数値モデル～

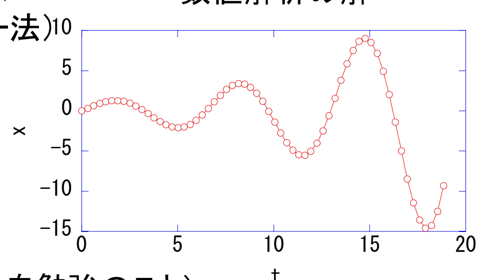
$$\begin{cases}\dfrac{dx}{dt}=y\\[2mm]\dfrac{dy}{dt}=-x\end{cases} \longleftarrow \frac{d^2x(t)}{dt^2}=-x(t)$$

数値モデル化

離散化
前進差分近似
(陽的オイラー法)

$$\begin{cases}\dfrac{x^{n+1}-x^n}{\Delta t}=y^n\\[2mm]\dfrac{y^{n+1}-y^n}{\Delta t}=-x^n\end{cases}$$

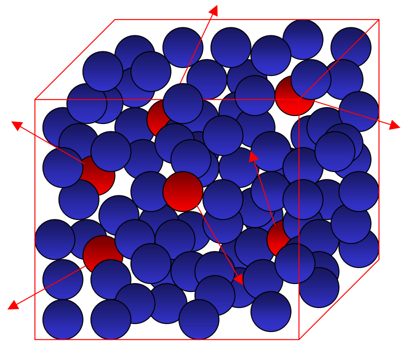
数値解析の解



(この問題の解決法は、各自勉強のこと)

例2　放射性物質の崩壊(I)

～現象～

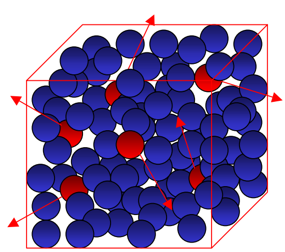


・放射性物質：放射線（α 線，β 線，γ 線）を放出しながら核分裂や核壊変する物質のこと。

・崩壊：原子核 が放射線（α 線，β 線，γ 線）を放射して他の核に変換する現象のこと。

例2　放射性物質の崩壊(II)

～数学モデル～



単位時間に起こる崩壊の数は放射性物質の原子核の数(Q)に比例

単位時間に起こる崩壊の数＝放射性物質の原子核の時間変化

$$\frac{dQ(t)}{dt} = -\lambda Q(t)$$

λ: 比例係数（崩壊定数）

例2　放射性物質の崩壊(III-Q)

～理論解～

$$\frac{dQ(t)}{dt} = -\lambda Q(t)$$

問題：初期(t=0)に存在する原子核数を$Q(0)=Q_0$とするとき、時刻t後の原子核数を求めよ。

例2　放射性物質の崩壊(III-A)

～理論解～

$$\frac{dQ(t)}{dt} = -\lambda Q(t) \Rightarrow \frac{dQ(t)}{Q(t)} = -\lambda dt$$

$$\Leftrightarrow \int_0^t \frac{dQ(t)}{Q(t)} = -\lambda \int_0^t dt$$

$$\Leftrightarrow \log Q(t) - \log Q_0 = -\lambda t$$

$$\Leftrightarrow \log \frac{Q(t)}{Q_0} = -\lambda t$$

$$\Leftrightarrow \frac{Q(t)}{Q_0} = e^{-\lambda t}$$

$$\Leftrightarrow Q(t) = Q_0 e^{-\lambda t}$$

例2　放射性物質の崩壊(III-G)

$$Q(t)=Q_0 e^{-\lambda t}$$

豆知識：QがQ_0の半分になる時間を半減期(T)という。

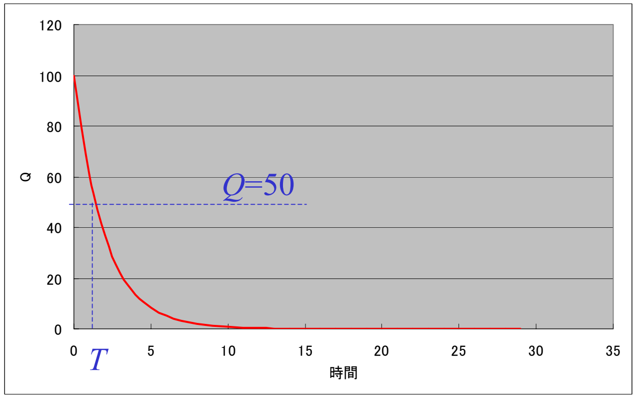
質問：Tとλの関係は？

$$Q_0/2 = Q_0 e^{-\lambda T}$$

$$\Leftrightarrow 1/2 = e^{-\lambda T}$$

$$\Leftrightarrow -\log 2 = -\lambda T$$

$$\Leftrightarrow T = \frac{\log 2}{\lambda} = \frac{0.693}{\lambda}$$



Q_0=100, λ=0.5の場合のグラフ

例2　放射性物質の崩壊(IV-1)

～数値モデル～

$$\frac{dQ(t)}{dt}=-\lambda Q(t) \xrightarrow{\text{離散化}} \boxed{\frac{q(t+\Delta t)-q(t)}{\Delta t}=-\lambda q(t)}$$

前進差分近似
（陽的オイラー法）

数値解析で計算される原子核数は誤差を含んでおり、厳密解Qとは違った値をとる。そのため、ここではqと表す（常識的に判断できる場合は同じ文字を使うこともある）。

例2　放射性物質の崩壊(IV-2)

～数値モデル～

$$\frac{dQ(t)}{dt} = -\lambda Q(t) \quad \Rightarrow \quad \boxed{\frac{q(t+\Delta t)-q(t)}{\Delta t} = -\lambda q(t)}$$

時刻 Δt

$$\frac{q(\Delta t)-Q_0}{\Delta t} = -\lambda Q_0$$
$$\Leftrightarrow q(\Delta t) = (1-\lambda\Delta t)Q_0$$
$$\Leftrightarrow q^1 = (1-\lambda\Delta t)Q_0$$

時刻 2Δt

$$\frac{q(2\Delta t)-q(\Delta t)}{\Delta t} = -\lambda q(\Delta t)$$
$$\Leftrightarrow q(2\Delta t) = (1-\lambda\Delta t)q(\Delta t)$$
$$\Leftrightarrow q(2\Delta t) = (1-\lambda\Delta t)^2 Q_0$$
$$\Leftrightarrow q^2 = (1-\lambda\Delta t)^2 Q_0$$

時刻 $n\Delta t$における $q(n\Delta t)=q^n$と表す。

例2　放射性物質の崩壊(IV-3)

～数値モデル～

一般的なq_nを求めてみよう。

$$\frac{q(t+\Delta t)-q(t)}{\Delta t} = -\lambda q(t)$$
$$\Leftrightarrow q(t+\Delta t) = (1-\lambda\Delta t)q(t)$$
$$\Leftrightarrow q(n\Delta t) = (1-\lambda\Delta t)q((n-1)\Delta t)$$
$$\Leftrightarrow q^n = (1-\lambda\Delta t)q^{n-1}$$

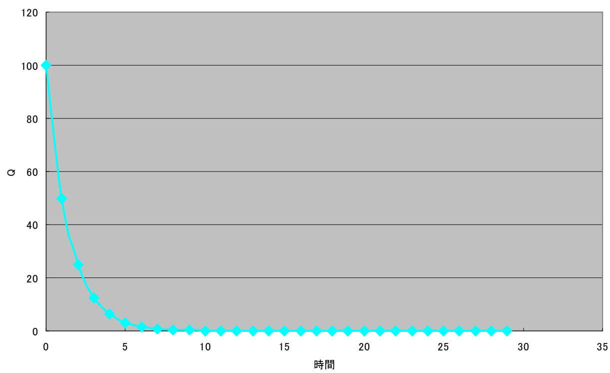
初項Q_0、公比$(1-\lambda\Delta t)$の等比数列

$$\boxed{q^n = (1-\lambda\Delta t)^n Q_0}$$

例2　放射性物質の崩壊(IV-4)

$$\boxed{q^n = \left(1 - \lambda \Delta t\right)^n Q_0}$$

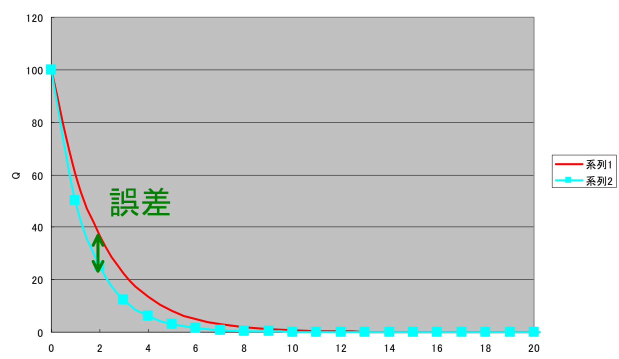
λ=0.5, Δt=1として図を描いてみる。



λ=0.5, Δt=1

例2　放射性物質の崩壊(IV-5)

数値解は厳密解をちゃんと近似しているか？

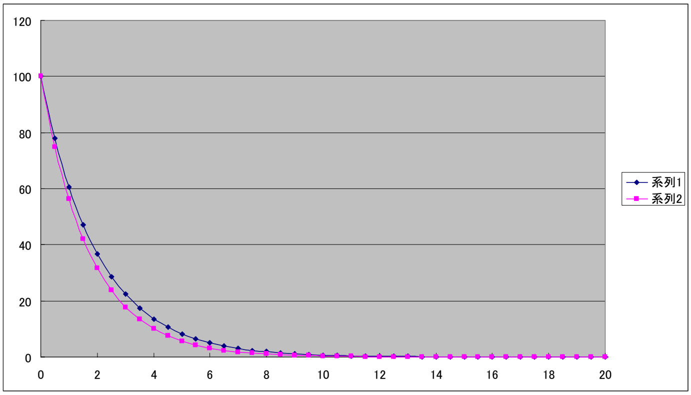


λ=0.5, Δt=1

例2　放射性物質の崩壊(IV-6)

収束性

λ=0.5, Δt=0.5の場合

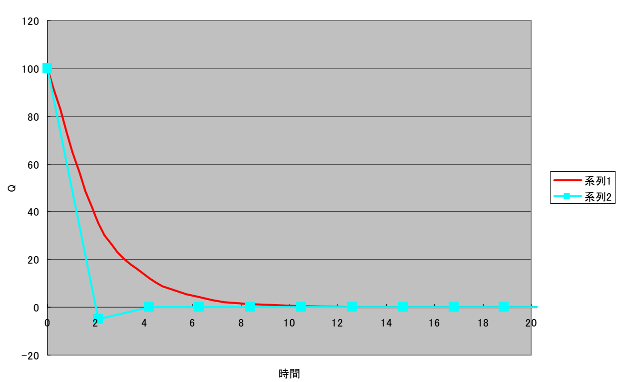


λ=0.5, Δt=2.1

例2　放射性物質の崩壊(IV-7)

安定性

λ=0.5, Δt=2.1の場合

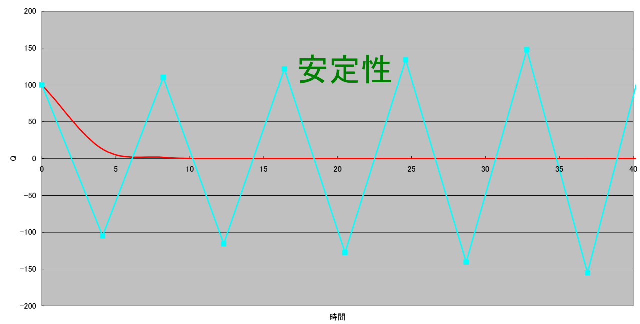


λ=0.5, Δt=2.1

例2　放射性物質の崩壊(IV-7)

安定性

λ=0.5, Δt=4.1の場合



λ=0.5, Δt=4.1

コンピュータ・シミュレーションのアプローチ

現象

数学的(物理的)モデル化

数学モデル(微分方程式)

離散化(差分法、有限要素法、有限体積法、境界要素法、など)

●精度(誤差)

数値モデル(代数方程式)

●安定性

解析結果

なぜ数値解析が必要か

理論解が求まる問題をわざわざ数値解析する必要はない？

(1) 現実はそれほど簡単ではない
・ばねの問題では、ばね係数kが一定でなく、位置(x)や時間(t)の関数だと理論解が求まらない。
・放射性物質の問題では、崩壊定数λが一定でなく、核数(Q) の関数だと理論解が求まらない。
(2) 理論解がない問題を、たとえ数値計算で求めたとしても、それが正しいのかどうか判断できない。
・理論解などのわかっている問題で、数値計算の方法がどの程度正しいのかを検証する必要がある。

コンピュータ・シミュレーションの誤差

(1) 厳密解と数値解の誤差（打ち切り誤差）
⇒後で詳細に議論

・放射性物質の崩壊の例における、
厳密解Qと数値解qの差

(2) コンピュータに起因する誤差（丸め誤差、
桁落ち誤差、情報落ち誤差）

・コンピュータ内では、整数1は1
・コンピュータ内で、実数0.1は0.1？

⇩

コンピュータにおける数値の取り扱いの基礎知識

コンピュータにおける数値の取り扱いの基礎知識

コンピュータの内部では、数値はすべて2進法(ビット、0 or 1)の形に変換して処理する。

情報の単位

ビット(bit):	２進数１桁を表す情報の最小単位
バイト(byte):	２進数８桁を表す情報の単位 1byte=8bit

１０進数の整数

・１０進数では１桁を0～9で表す。
・右からn番目の数字は$10^{(n-1)}$の係数を表す。

（例）
１０進数で$2037_{(10)}$は

$$2037_{(10)} = 2\times10^3 + 0\times10^2 + 3\times10^1 + 7\times10^0$$

2進数の整数

・2進数では1桁を0～9で表す。
・右からn番目の数字は$2^{(n\text{-}1)}$の係数を表す。

（例）
2進数で$11010_{(2)}$は

$$11010_{(2)} = 1\times 2^4 + 1\times 2^3 + 0\times 2^2 + 1\times 2^1 + 0\times 2^0$$

10進数の小数

（例）
10進数の$0.123_{(10)}$

$$0.123_{(10)} = 1\times 10^{-1} + 2\times 10^{-2} + 3\times 10^{-3}$$

2進数の小数

（例）
2進数の$0.101_{(2)}$

$$
\begin{aligned}
0.101_{(2)} &= 1\times 2^{-1} + 0\times 2^{-2} + 1\times 2^{-3} \\
&= 1\times 0.5 + 0\times 0.25 + 1\times 0.125 \\
&= 0.625_{(10)}
\end{aligned}
$$

浮動小数点

固定小数点 小数点の位置が決まっている．

浮動小数点 大きな数や小さな数が表せる．

$$M \times B^E$$

浮動小数点形式とは仮数(M)，基数(B)，指数(E)をもち，小数点の位置が変わる数値

IEEEの浮動小数点表現

IEEE（アメリカ電気電子工学会）が決めた表現形式

$$(-1)^S \times \left(1 + M \times 2^{-23}\right) \times 2^{(E-127)}$$

Sは符号（0:非負, 1:負）, Mは仮数部, Eは指数部

	符号	指数部	仮数部	
単精度	S(1bit)	E(8bit)	M(23bit)	4byte

	符号	指数部	仮数部	
倍精度	S(1bit)	E(11bit)	M(52bit)	8byte

単精度で仮数部の有効数字は約7桁弱

丸め誤差

計算機の内部では10進数の0.1は正確な0.1ではない！

0.1×2=0.2
0.2×2=0.4
0.4×2=0.8
0.8×2=1.6
0.6×2=1.2
0.2×2=0.4
・
・
・

→ 0.0 $\widehat{0011}$ $\widehat{0011}$ $\widehat{0011}$ ・・・循環小数
↓　仮数部が8けたならば
0.00011001
↓
残りの部分は切り捨て（丸め）られた
↓
$\neq 0.1_{(10)}$

桁落ち誤差

仮数部が8桁の場合の絶対値がほぼ等しい数値同士の引き算をする場合に発生

有効な（正しい）数字

$$
\begin{array}{rl}
 & 0.1234567912\times10^{12} \\
- & 0.1234567801\times10^{12} \\
\hline
 & 0.0000000112\times10^{12} \\
= & 1.12\cdots\times10^{4}
\end{array}
$$

・・・8桁の有効数字

・・・8桁の有効数字

・・・1桁！！の有効数字

情報落ち誤差

$$
\begin{array}{rl}
 & 0.12345678\times10^{5} \\
+ & 0.87654321\times10^{-5} \\
\hline
\end{array}
$$

$$\downarrow$$

$$
\begin{array}{rl}
 & 0.12345678\times10^{5} \\
+ & 0.000000000087654321\times10^{5} \\
\hline
 & 0.12345678\times10^{5}
\end{array}
$$

環境に関連するシミュレーション

↓
流れに関連する問題が多い
↓
時間的に非定常
↓
時間、空間に関する偏微分方程式
↓
まずは、微分のコンピュータによる評価法

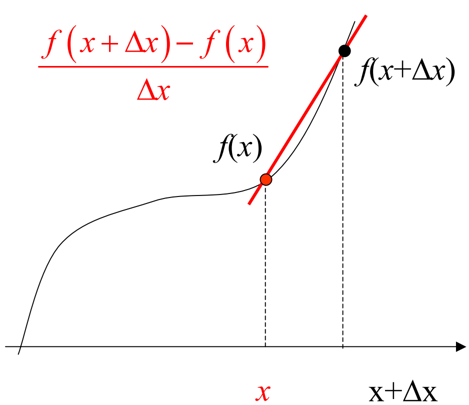
<u>差分法</u>の直感的理解

差分法（Finite Difference Method, FDM）とは微係数を差分式に変換する離散化方法の一つである

まずは微係数の差分による近似を考える（微分方程式を差分法を用いて解く問題は後ほど）

微分の復習(I)

$$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}$$



注目点

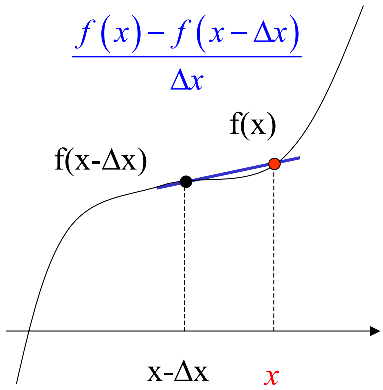
右からの極限

$$\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}$$

が存在するとき、
右側微（分）係数と呼ぶ。

$$f'_{+}(x)=\lim_{\Delta x\to 0}\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}$$

微分の復習(II)



左からの極限

$$\lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x)-f(x-\Delta x)}{\Delta x}$$

が存在するとき、
左側微（分）係数と呼ぶ。

$$f'_{-}(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x)-f(x-\Delta x)}{\Delta x}$$

微分の復習(III)

右側微係数と左側微係数が一致するとき、関数fは点xで微分可能であると言い、その共通の値をfのxにおける微係数と呼ぶ。

$$\frac{df}{dx} = f'(x) = f'_{-}(x) = f'_{+}(x)$$

差分法の直感的理解(I)

前進差分近似

差分法は微分の定義式の極限(=lim)をやめ、近似(≅)に直したものである。

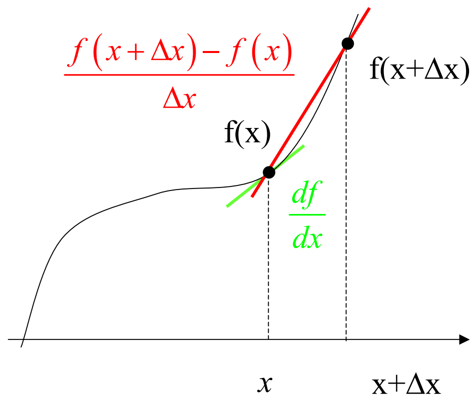
$$\frac{df}{dx} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

↓

$$\frac{df}{dx} \cong \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

Δxがある程度小さければ上式は近似的に成り立つ。

前進差分近似



差分法の直感的理解(II)

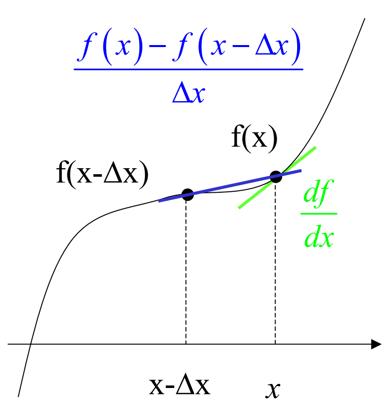
後進差分近似

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

↓

$$\frac{df}{dx} \cong \frac{f(x) - f(x-\Delta x)}{\Delta x}$$

後進差分近似



例2　放射性物質の崩壊(IV-2-E)

$$\frac{dQ(t)}{dt} = \cdots \quad \Rightarrow \quad \boxed{\frac{q(t+\Delta t) - q(t)}{\Delta t}} = \cdots$$

時間微分に前進差分近似*
を適用した離散化式

$$\frac{dQ(t)}{dt} = \cdots \quad \Rightarrow \quad \boxed{\frac{q(t) - q(t-\Delta t)}{\Delta t}} = \cdots$$

差分法のための準備

数学の復習:テイラー級数展開

テイラー級数展開(I-Q)

$f(x)$を点$x=a$の周りでテイラー展開

$$f(x)=f(a)+\frac{f'(a)}{1!}(x-a)+\frac{f''(a)}{2!}(x-a)^2+\frac{f'''(a)}{3!}(x-a)^3+\cdots$$

例題：次の関数を（x=0の周りで）xの整級数に展開せよ

(1) e^x

(2) $\sin(x)$

(3) $\log(1+x)$

テイラー級数展開(II)

例題2： $f(x+\Delta x)$を点xの周りでテイラー展開せよ。

上式を以下の形に変形せよ。

$$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}=\cdots$$

前進差分法の精度(I)

前進差分近似式

$$f'(x) \cong \frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x}$$

比べてみると…

$$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x} = f'(x) + \Delta x\frac{f''(x)}{2!} + \Delta x^2\frac{f'''(x)}{3!} + \cdots$$

本来近似したいもの

余分なもの
＝打ち切り誤差

$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x} \cong f'(x)$ と近似すると、これらの項は打ち切られるので

前進差分法の精度(II)

前進差分近似式

$$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x} - f'(x) = \Delta x\frac{f''(x)}{2!} + \Delta x^2\frac{f'''(x)}{3!} + \cdots$$

本来近似したいもの

余分なもの
＝打ち切り誤差

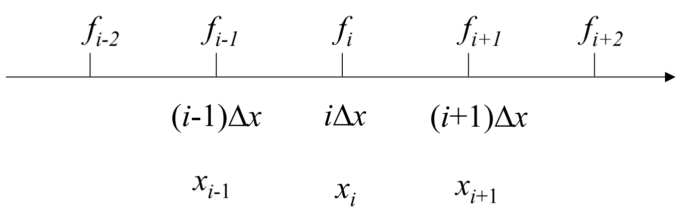
Δxは十分小さい（$\Delta x<<1$）と仮定しているので、
$\Delta x>>\Delta x^2>>\Delta x^3>>$・・・
したがって、打ち切り誤差で最も影響の大きいのは初項（ $0.5\Delta x f''(x)$ ）である。打ち切り誤差の初項がΔx^kに比例する近似式はk次精度であるという。上記前進差分法は1次精度である。これをよく以下のように書く。

$$\frac{f(x+\Delta x)-f(x)}{\Delta x} - f'(x) = O(\Delta x)$$

後進差分法の精度

練習問題： $f(x\text{-}\Delta x)$を点xの周りでテイラー展開した式を用いて後進差分法の精度を評価せよ。

一般的な差分近似式の導出(I)

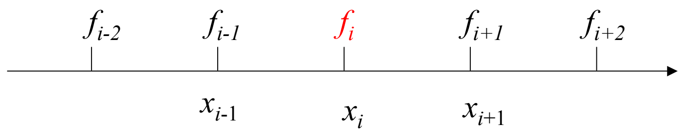


位置 $i\Delta x$における$f(i\Delta x)=f_i$と表す。

前進差分 $$f_i' = \left.\frac{df}{dx}\right|_i \cong \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x}$$

後進差分 $$f_i' = \left.\frac{df}{dx}\right|_i \cong \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x}$$

一般的な微係数の近似

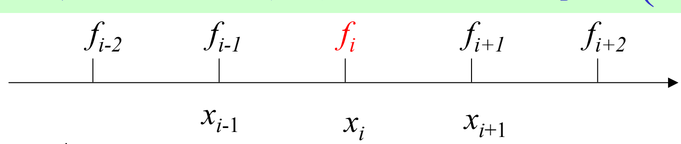


差分式

$$\cdots + c_{i-1}f_{i-1} + c_i f_i + c_{i+1}f_{i+1} + \cdots = \left.\frac{d^j f}{dx^j}\right|_i + O\left(\Delta x^k\right)$$

近似したい微係数　　打ち切り誤差

一般的な差分近似式の導出(II)



$\left.\frac{df}{dx}\right|_i$ を周りの点のfから求めることを考える。

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_i \cong af_{i-1} + bf_i + cf_{i+1} \qquad \cdots\text{(A)}$$

$f_{i\text{-}1}$, f_{i+1}を点iの周りでテイラー展開する。

$$f_{i+1} = f_i + \frac{f_i'}{1!}\Delta x + \frac{f_i''}{2!}\Delta x^2 + \frac{f_i'''}{3!}\Delta x^3 + \cdots$$

$$f_{i-1} = f_i - \frac{f_i'}{1!}\Delta x + \frac{f_i''}{2!}\Delta x^2 - \frac{f_i'''}{3!}\Delta x^3 + \cdots$$

(A)式右辺に代入整理

一般的な差分近似式の導出(III)

(A)式に代入整理

$$af_{i-1}+bf_i+cf_{i+1}=(a+b+c)f_i+(c-a)\Delta x f_i'$$
$$+(a+c)\frac{\Delta x^2}{2}f_i''+(c-a)\frac{\Delta x^3}{6}f_i'''+\cdots$$

$$af_{i-1}+bf_i+cf_{i+1}=\left.\frac{df}{dx}\right|_i+O\left(\Delta x^k\right)$$ としたいのだから、

とりあえず、

$$a+b+c=0,\ (c-a)\Delta x=1$$

未知係数は3つだからもう一つ式を立てないといけない。
なるべく、精度を良くする（打ち切り誤差を少なくする）ために、

$$a+c=0$$

とする。

一般的な差分近似式の導出(IV)

$$a+b+c=0,\ (c-a)\Delta x=1,\ a+c=0$$

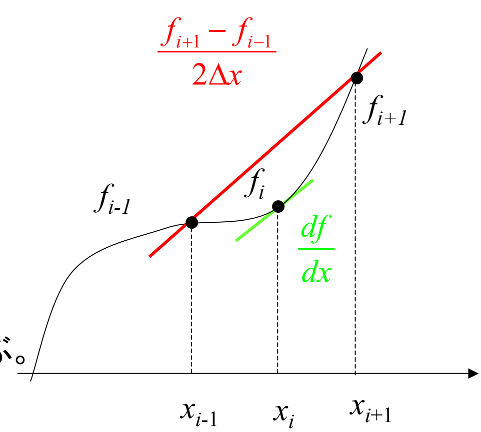
a,b,cについて解く。

$$a=-\frac{1}{2\Delta x},\ b=0,\ c=\frac{1}{2\Delta x}$$

⇩

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_i\cong\frac{f_{i+1}-f_{i-1}}{2\Delta x}$$

この近似を中心差分近似とよぶ。



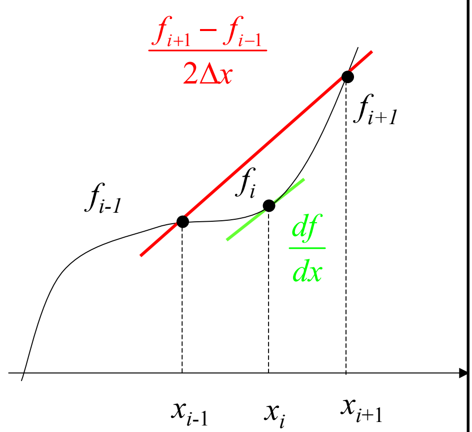
一般的な差分近似式の導出(V)

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_i \cong \frac{f_{i+1}-f_{i-1}}{2\Delta x}$$

この近似を中心差分近似とよぶ。
もっと、ちゃんと書くと

$$\frac{f_{i+1}-f_{i-1}}{2\Delta x} = \left.\frac{df}{dx}\right|_i + \frac{\Delta x^2}{6} f_i''' + \cdots$$

$$= \left.\frac{df}{dx}\right|_i + O\left(\Delta x^2\right)$$

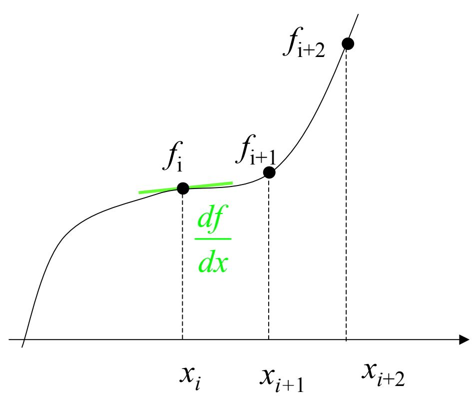


したがってこの近似は二次精度であり、二次(精度)中心差分と呼ぶこともある。

一般的な差分近似式の導出(VI)

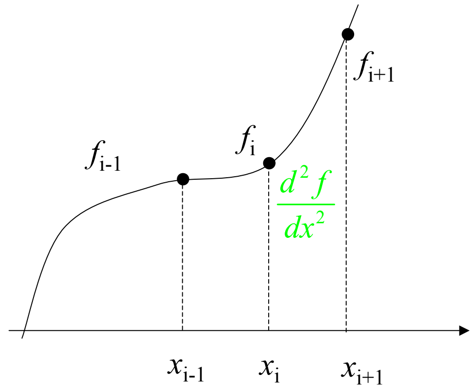
練習1:　点iに対して非対称な以下の近似式で、なるべく精度の高いものを作れ。
また、その精度は？

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_i \cong af_i + bf_{i+1} + cf_{i+2}$$



一般的な差分近似式の導出(VII)

練習2: 点iでの二階の微係数の差分近似式を作れ。また、その精度も評価せよ。



一般的な差分近似式の導出(VIII)

練習3: 点iの周りの5点を用いた1階の微係数の差分近似式で、なるべく精度の高いものを作れ。また、その精度は？

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_i \cong af_{i-2} + bf_{i-1} + cf_i + df_{i+1} + ef_{i+2}$$

ここまでに現れた差分法のまとめ

	差分式	打ち切り誤差の初項
前進差分	$\dfrac{f_{i+1}-f_i}{\Delta x}$	$\dfrac{\Delta x}{2}f''(x)$
後進差分	$\dfrac{f_i-f_{i-1}}{\Delta x}$	$-\dfrac{\Delta x}{2}f''(x)$
2次中心差分	$\dfrac{f_{i+1}-f_{i-1}}{2\Delta x}$	$\dfrac{\Delta x^2}{6}f'''(x)$
3点非対称差分	$\dfrac{-1.5f_i+2f_{i+1}-0.5f_{i+2}}{\Delta x}$	$-\dfrac{\Delta x^2}{3}f'''(x)$
5点対称（4次中心差分）	$\dfrac{f_{i-2}-8f_{i-1}+8f_{i+1}-f_{i+2}}{12\Delta x}$	$-\dfrac{\Delta x^4}{30}f''''(x)$

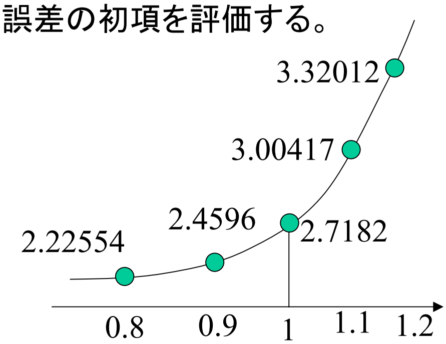
精度の妥当性検討(I-1)

対象とする関数：$f(x)=e^x$

$x=1$における差分近似式で、$\Delta x=0.1$として

$\left.\dfrac{df}{dx}\right|_{x=1}$ および打ち切り誤差の初項を評価する。

$f(0.8)=2.22554$
$f(0.9)=2.4596$
$f(1)=2.71828$
$f(1.1)=3.00417$
$f(1.2)=3.32012$



精度の妥当性検討(I-2)

	$\left.\frac{df}{dx}\right\|_{x=1}$	誤差	初項
厳密解	2.7183	ー	
前進差分			
後進差分			
二次中心差分			
3点非対称差分			
5点対称			

精度の妥当性検討(II-1)

対象とする関数: $f(x)=e^x$

$x=1$における差分近似式で、$\Delta x=0.1$として

$\left.\frac{d^2 f}{dx^2}\right|_{x=1}$ および打ち切り誤差の初項を評価する。

2階微係数に対する差分式

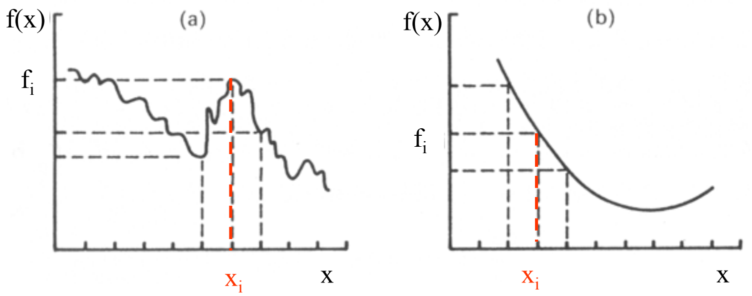
	差分式	打ち切り誤差の初項
二次中心	$\dfrac{f_{i-1}-2f_i+f_{i+1}}{\Delta x^2}$	$\dfrac{\Delta x^2}{12}f''''(x)$
3点非対称	$\dfrac{f_i-2f_{i+1}+f_{i+2}}{\Delta x^2}$	$\Delta x f'''(x)$
5点対称	$\dfrac{-f_{i-2}+16f_{i-1}-30f_i-16f_{i+1}-f_{i+2}}{12\Delta x^2}$	$-\dfrac{\Delta x^4}{90}f''''''(x)$

精度の妥当性検討(II-2)

	$\left.\dfrac{d^2 f}{dx^2}\right\|_{x=1}$	誤差	初項
厳密解	2.7183	ー	
二次中心差分			
3点非対称差分			
5点対称			

メッシュ間隔の重要性(I)

数値解析において、問題に適したメッシュを使うことが重要である。この点を、三角関数型の波形の例に考えてみる。



メッシュ間隔の重要性(II)

対象とする関数

$$f\left(x\right)=\cos\left(mx\right)$$

m : 波数
$m=2\pi/\lambda$ （λ : 波長）

点iにおける一階微係数の厳密値

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_i=-m\sin\left(mx_i\right)$$

振幅　位相

メッシュ間隔の重要性(III)

$f(x)=\cos(mx)$ の二次中心差分近似

i番目の点におけるfの値

$$f_i=\cos(mi\Delta x)=\cos(mx_i)$$

$$\cos a-\cos b$$
$$=-2\sin\frac{a+b}{2}\sin\frac{a-b}{2}$$

一階微係数の二次中心差分近似

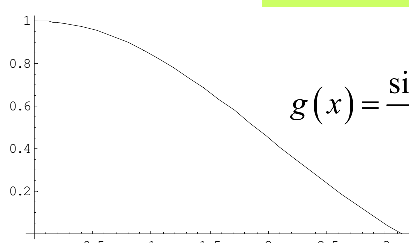
$$\left.\frac{df}{dx}\right|_i \cong \frac{f_{i+1}-f_{i-1}}{2\Delta x}=\frac{\cos\left(m\left(x_i+\Delta x\right)\right)-\cos\left(m\left(x_i-\Delta x\right)\right)}{2\Delta x}$$

メッシュ間隔の重要性(IV)

振幅の誤差を調べてみよう

一階微係数の厳密値と二次中心差分近似の比

$$\frac{\text{Approximation}}{\text{Exact}}=\frac{-\sin(m\Delta x)}{\Delta x}\div(-m)$$
$$=\frac{\sin(m\Delta x)}{m\Delta x}$$



$$g(x)=\frac{\sin x}{x}$$

メッシュ間隔の重要性(V)

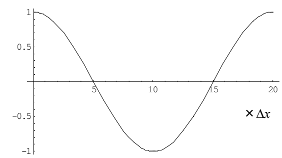
一階微係数の厳密値と二次中心差分近似の比

$$\frac{\text{Approximation}}{\text{Exact}}=\frac{\sin(m\Delta x)}{m\Delta x}$$

λ=20Δx（長波長）の場合（1周期に20点）

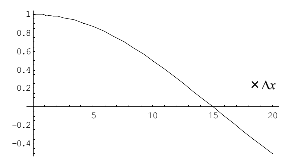
$$m\Delta x=\frac{2\pi}{\lambda}\Delta x=\frac{\pi}{10}$$

$$\frac{\text{Approximation}}{\text{Exact}}=\frac{\sin(\pi/10)}{\pi/10}\approx 0.984$$



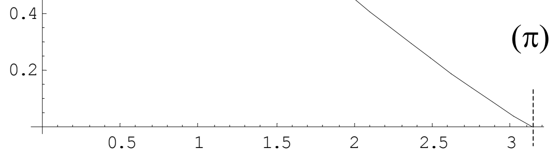
λ が更に大きくなると、$m\Delta x\to 0$より

$$\frac{\text{Approximation}}{\text{Exact}}=\lim_{m\Delta x\to 0}\frac{\sin(m\Delta x)}{m\Delta x}=\mathbf{1}$$



メッシュ間隔の重要性(VI)

$$g(x)=\frac{\sin x}{x}$$ のグラフ



メッシュ間隔の重要性(VII)

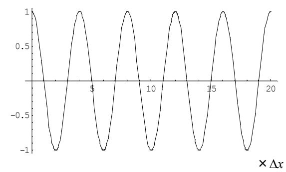
一階微係数の厳密値と二次中心差分近似の比

$$\frac{\text{Approximation}}{\text{Exact}} = \frac{\sin(m\Delta x)}{m\Delta x}$$

λ=4Δx（短波長）の場合（1周期に4点）

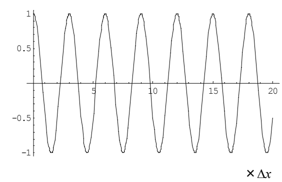
$$m\Delta x = \frac{2\pi}{\lambda}\Delta x = \frac{\pi}{2}$$

$$\frac{\text{Approximation}}{\text{Exact}} = \frac{\sin(\pi/2)}{\pi/2} \approx 0.634$$



λ がさらに小さくなると、$m\Delta x$→πより

$$\frac{\text{Approximation}}{\text{Exact}} = \lim_{m\Delta x \to \pi} \frac{\sin(m\Delta x)}{m\Delta x} = 0$$



メッシュ間隔の重要性(VII)

前進差分近似

一階微係数の前進差分近似

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_i \cong \frac{f_{i+1}-f_i}{\Delta x} = \frac{\cos(m(x_i+\Delta x)) - \cos(mx_i)}{\Delta x}$$

$$= -\frac{\sin(m\Delta x/2)}{\Delta x/2}\sin(mx_i + m\Delta x/2)$$

一階微係数の厳密値

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_i = -m\sin(mx_i)$$

振幅にも位相にも誤差！

メッシュ間隔の重要性(VIII)

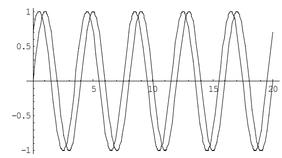
振幅にも位相にも誤差！

一階微係数の前進差分近似

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_i \cong -\frac{\sin\left(m\Delta x/2\right)}{\Delta x/2}\sin\left(m\left(x_i+\Delta x/2\right)\right)$$

一階微係数の厳密値

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_i = -m\sin\left(mx_i\right)$$



振幅の誤差 $\quad \dfrac{\sin\left(m\Delta x/2\right)}{m\Delta x/2}$

前進差分近似の特徴

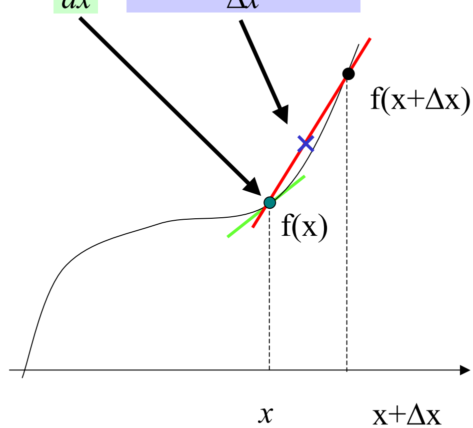
位相の誤差 $\quad \dfrac{m\Delta x}{2}$ ⇒ 波の形が $-\dfrac{\Delta x}{2}$ ずれる

移動性

ずれの直感的理解

前進差分近似

$$\frac{df}{dx} \cong \frac{f\left(x+\Delta x\right)-f\left(x\right)}{\Delta x}$$



メッシュ間隔の重要性I

練習問題：二階微係数の場合に同様の議論をせよ。
（$\lambda=20\Delta x$（長波長）、$\lambda=4\Delta x$（短波長）の場合の振幅の比）

メッシュ間隔の重要性II

練習問題：二階微係数の場合に同様の議論をせよ。

メッシュ間隔の重要性III

$f(x) = \cos(mx)$ の4次中心差分近似

一階微係数の4次中心差分近似

$$\left.\frac{df}{dx}\right|_i \cong \frac{f_{i-2} - 8f_{i-1} + 8f_{i+1} - f_{i+2}}{12\Delta x} = \frac{-2\sin(2m\Delta x) + 16\sin(m\Delta x)}{12\Delta x}\sin(mx_i)$$

$$= \frac{\sin(m\Delta x)\left[-4 + \cos(m\Delta x)\right]}{3\Delta x}\sin(mx_i)$$

メッシュ間隔の重要性IV

振幅の誤差を調べてみよう

一階微係数の厳密値と4次中心差分近似の比

$$\frac{\text{Approximation}}{\text{Exact}} = \frac{\sin(m\Delta x)\left[-4 + \cos(m\Delta x)\right]}{3\Delta x} \div (-m)$$

$$= \left[\frac{4}{3} - \frac{\cos(m\Delta x)}{3}\right]\frac{\sin(m\Delta x)}{m\Delta x}$$

三角波に関する振幅比

		振幅比	
導関数	方法	長波長 $\lambda=20\Delta x$	短波長 $\lambda=4\Delta x$
$\dfrac{df}{dx}$	2次中心	0.9836	0.6366
	4次中心	0.9996	0.8488

		振幅比	
導関数	方法	長波長 $\lambda=20\Delta x$	短波長 $\lambda=2\Delta x$
$\dfrac{d^2 f}{dx^2}$	2次中心	0.9918	0.4053
	4次中心	0.9999	0.5404

近似解の収束性