計算情報学Ｉ

名古屋大学　情報文化学部
自然情報学科３年
第１３回

鈴木泰博
情報文化学部・大学院情報科学研究科
複雑系科学専攻

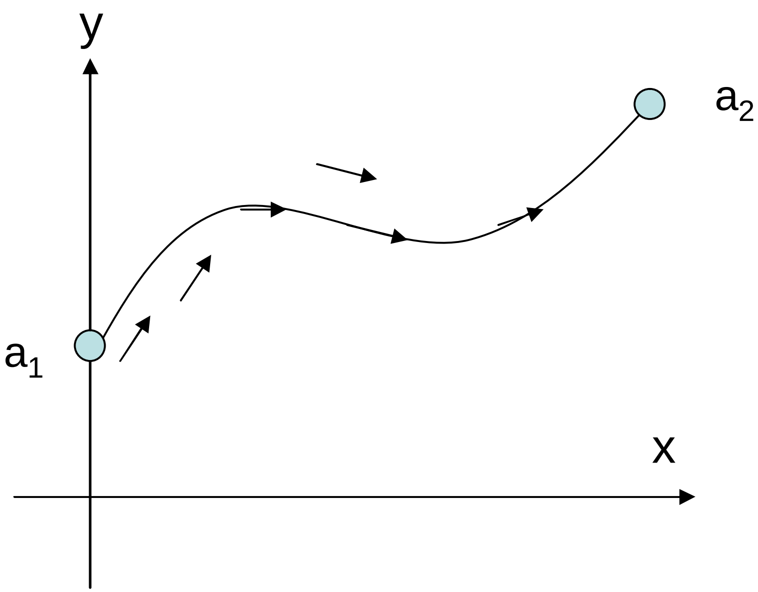
Science of
interactions

Agenda
計算情報学　Ｉ　第１３回

前回の復習（常微分方程式の境界値問題

偏微分方程式の差分解法

2階常微分方程式の境界値問題



$$\begin{cases} y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x) \\ y(0) = a_1,\ y(1) = a_2 \end{cases}$$

初期値問題と異なり、境界条件があらかじめ与えられている場合は、初期値問題とおき方が大幅に異なる。

差分方程式による近似

① y(x + h) を第3項までテイラー展開せよ。

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + O((\Delta x)^2)$$

② y(x – h) を第3項までテイラー展開せよ。

$$y(x-h) = y(x) - hy'(x) + \frac{h^2}{2!}y''(x) + O((\Delta x)^2)$$

③ ①、②よりy’(x)について解け… ① ー ②

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

④ ①、②よりy’’(x)について解け…① + ②

$$\frac{f(x+h) - 2y(x) + f(x-h)}{h^2} = y''(x)$$

Science of interactions

常微分方程式の境界値問題

$$\frac{f(x+h)-2y(x)+f(x-h)}{h^2}=y''(x)$$

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

$$\begin{cases} y'' = p(x)y' + q(x)y + r(x) \\ y(0)=a_1,\ y(1)=a_2 \end{cases}$$

$$\frac{f(x_j+h)-2f(x_j)+f(x_j-h)}{h^2}=p_j\frac{f(x_j+h)-f(x_j-h)}{2h}+q_j y(x_j)+r_j$$

$$\underbrace{-(1-\frac{h}{2}p_j)}_{\beta_j}y_{j-1}+\underbrace{(2+h^2q_j)}_{\alpha_j}y_j\underbrace{-(1-\frac{h}{2}p_j)}_{\gamma_j}y_{j+1}=\underbrace{-h^2r_j}_{d_j}$$

Science of interactions

境界値問題

以上を整理すると

$$
\begin{array}{lllll}
\alpha_1 y_1 & +\gamma_1 y_2 & & & = d_1 - \beta_1 y_0 \\
\beta_2 y_1 & +\alpha_2 y_2 & +\gamma_2 y_3 & & = d_2 \\
 & \beta_3 y_2 & +\alpha_3 y_3 & +\gamma_3 y_4 & = d_3 \\
 & & \vdots & \vdots & \vdots \quad \vdots \\
 & & \beta_{N-1} y_{N-1} & +\alpha_{N-1} y_{N-1} & = d_{N-1} - \gamma_{N-1} y_N
\end{array}
$$

最終的には以下の連立方程式に帰着される。

$$
\begin{pmatrix}
\alpha_1 & \gamma_1 & & & & \\
\beta_2 & \alpha_2 & \gamma_2 & & & \\
 & \beta_3 & \alpha_3 & \gamma_3 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & \beta_{N-2} & \alpha_{N-2} & \gamma_{N-2} \\
 & & & & \beta_{N-1} & \alpha_{N-1}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{N-2} \\ y_{N-1}
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
d_1 - \beta_1 y_0 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{N-2} \\ d_{N-1}
\end{pmatrix}
$$

あとは、ガウスの消去法などで連立方程式を解けばよい。
境界条件を様々に変える場合はLU分解をしておくと計算が楽

偏微分方程式の差分解法

Science of
interactions

偏微分方程式

我々は3次元の世界に住んでいるので、実問題は多次元になることが多い。するとどうしても偏微分方程式を解かねばならないことになる。実際、多種多様な偏微分方程式があり、そのための解法にもいろいろなものがあるが基本的に解くのは困難な場合が多い。

本講義では2変数、2階、線形の偏微分方程式を扱う。一般には、

$$A\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+2B\frac{\partial^2 u}{\partial x\partial y}+C\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}+D\frac{\partial u}{\partial x}+E\frac{\partial u}{\partial x}+Fu=f(x,y)$$

と書くことができ、2階の導関数の係数の判別式から

$$\begin{cases} B^2-AC<0 & \text{楕円型} \\ B^2-AC=0 & \text{放物型} \\ B^2-AC>0 & \text{双曲型} \end{cases}$$

と分類することができる。

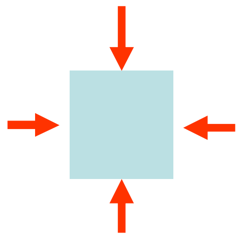
偏微分方程式

$$A\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D\frac{\partial u}{\partial x} + E\frac{\partial u}{\partial x} + Fu = f(x, y)$$

$$\begin{cases} B^2 - AC < 0 & \text{楕円型} \\ B^2 - AC = 0 & \text{放物型} \\ B^2 - AC > 0 & \text{双曲型} \end{cases}$$

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

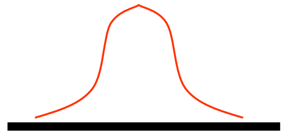
ラプラス方程式



熱伝導率

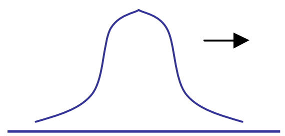
$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

1次元熱伝導方程式



$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$$

1次元波動方程式



差分方程式による近似（再掲）

① y(x + h) を第3項までテイラー展開せよ。

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{h^2}{2!} y''(x) + O((\Delta x)^2)$$

② y(x – h) を第3項までテイラー展開せよ。

$$y(x-h) = y(x) - hy'(x) + \frac{h^2}{2!} y''(x) + O((\Delta x)^2)$$

③ ①、②よりy'(x)について解け… ① ー ②

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

④ ①、②よりy''(x)について解け…① + ②

$$\frac{f(x+h) - 2y(x) + f(x-h)}{h^2} = y''(x)$$

Science of interactions

差分方程式による偏微分方程式の近似

$$u(x \pm h, y) = u(x, y) \pm h u_x(x, y) + \frac{h^2}{2!} u_x^2(x, y) \pm \frac{h^3}{3!} u_x^3(x, y) + \frac{h^4}{4!} u_x^4(x, y) + R$$

u(x,y)に関するテイラー展開より、

$$u(x \pm h, y) = u(x, y) \pm h u_x(x, y) + \ldots$$

$$\frac{u(x \pm h, y) - u(x, y)}{h} \cong u_x^1(x, y)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} \cong \frac{u(x, y + h) - u(x, y)}{h}$$

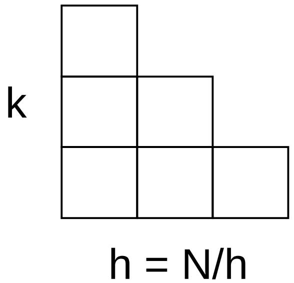
$$u(x \pm h, y) = u(x, y) \pm h u_x(x, y) + \frac{h^2}{2!} u_x^2(x, y) \pm \ldots$$

$$u_x^2(x, y) \cong \frac{u(x + h, y) - 2u(x, y) + u(x - h, y)}{h^2}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{u(x, y + h) - u(x, y) + u(x, y - h)}{h^2}$$

偏微分方程式の差分解法

① 解くべき領域を差分格子に分割する



② 差分方程式を用いて変微分方程式を書き換える
求めた差分方程式近似の式を代入する“だけ”

③
陽解法 → 漸化式を計算する (誤差が大きくなる)
計算の仕方はオイラー法とよく似ている。

陰解法 → 連立一次方程式を解く (計算量は多くなるが精度は高い)
計算の仕方は常微分方程式の境界値問題とほぼ同様

Science of interactions

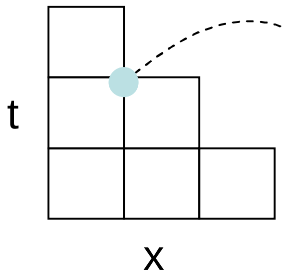
1次元熱伝導方程式

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$
$$u(0,t) = u(1,t) = 0, (t > 0),$$
$$u(x,0) = f(x), (0 \le x \le 1)$$

両端の温度は0

温度分布はf(x)で与えられる。

① 格子を生成する（この場合は正方格子）



$$u_j^n \approx u(x_j, t_n)$$

② 差分方程式に変換する（単に、そのまま放り込むだけ！）

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

より、

$$u_j^{n+1} = ru_{j-1}^n + (1-2r)u_j^n + rn_{j-1}^n, (r = \Delta t/(\Delta x)^2)$$

Science of interactions

1次元熱伝導方程式 つづき

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$
$$u(0,t) = u(1,t) = 0, (t > 0),$$
$$u(x,0) = f(x), (0 \le x \le 1)$$

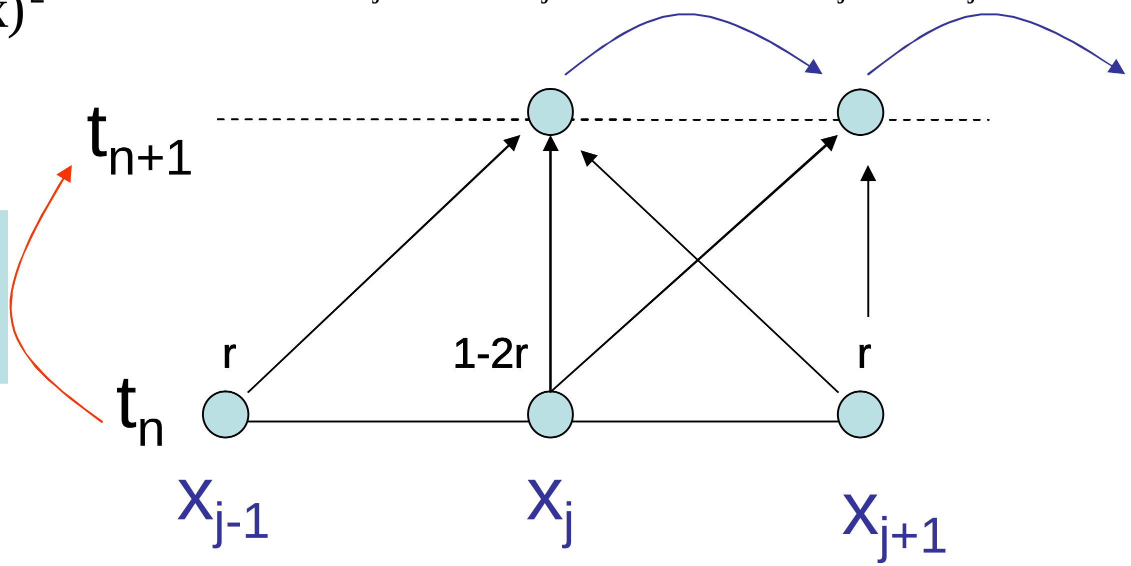
両端の温度は0

温度分布はf(x)で与えられる。

② 差分方程式に変換する（単に、そのまま放り込むだけ！）

$$\frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}$$ より、 $$u_j^{n+1} = ru_{j-1}^n + (1-2r)u_j^n + rn_{j-1}^n, (r = \Delta t / (\Delta x)^2)$$

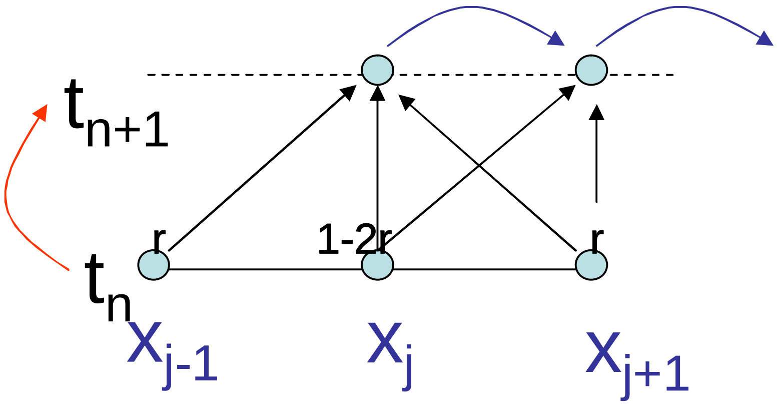
次々に決まってゆく
（陽的解法）
計算量は少なくてすむ



初期条件で値はすべてわかっている！！

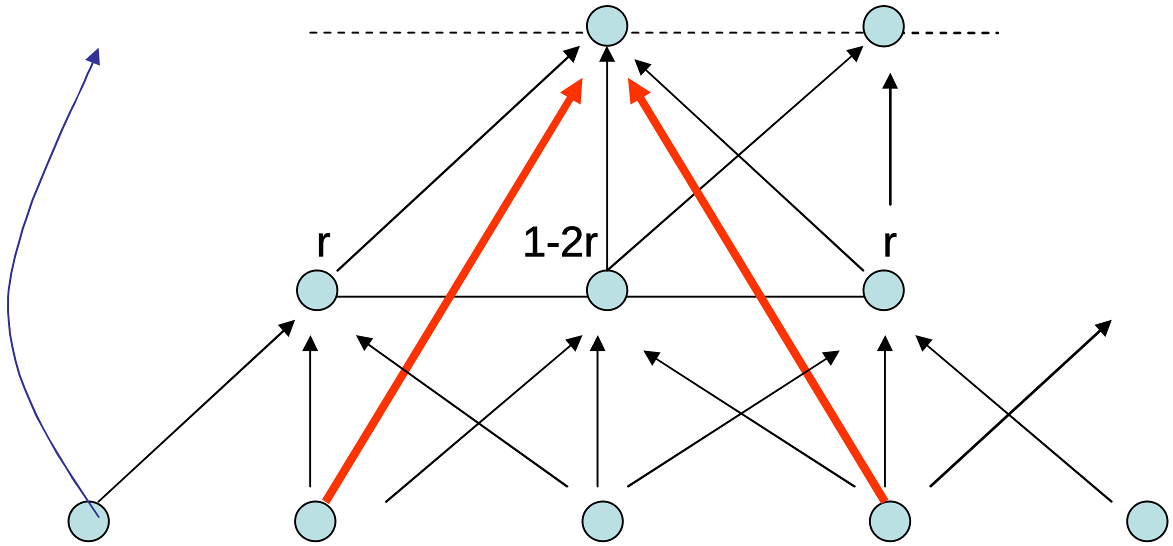
Science of interactions

1次元熱伝導方程式
陽的解法



次々に決まってゆく
(陽的解法)
計算量は少なくてすむ

⊿tを2倍にすると
⊿xが1/2になってしまう。



熱は熱源から瞬時に全空間に伝わる性質があるが、陽的解法の場合はその物理的性質を充分に取り込むことができない。

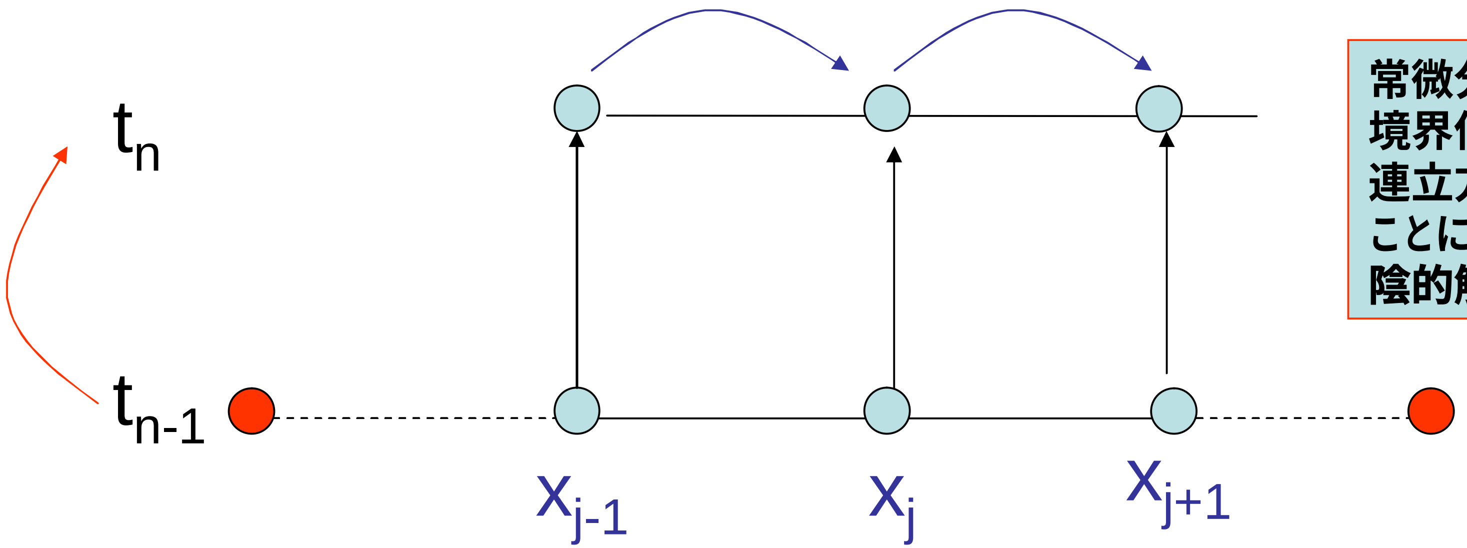
1次元熱伝導方程式
陰的解法

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2},$$
$$u(0,t) = u(1,t) = 0, (t > 0),$$
$$u(x,0) = f(x), (0 \le x \le 1)$$

② 差分方程式に変換する（ここを“ちょこっと”変えてみると…陰的解法の出来上がり！）

ここに注目！

$$\frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t} = \frac{u_{j+1}^n - 2u_j^n + u_{j-1}^n}{(\Delta x)^2}$$ より、$$u_j^{n-1} = -ru_{j-1}^n + (1+2r)u_j^n - rn_{j-1}^n, (r = \Delta t/(\Delta x)^2)$$



常微分方程式の境界値問題と同様の連立方程式を解くことになる。
陰的解法

解法の評価

差分方程式の厳密解を用いて陽的・陰的解法の評価を行う。天下り的であるが、差分方程式は波数ξの正弦波を表す以下の解を持つ。

$$u_j^n = g^n \exp(i\xi j\Delta t), i = \sqrt{-1}$$

ただ、放り込んで整理するだけ

g を適当に選ぶことにより、差分方程式の厳密解を得ることができる。

$$g^{n+1}\exp(i\xi j\Delta x) = rg^n \exp(i\xi(j-1)\Delta x)$$

$$+(1-2r)g^n \exp(i\xi j\Delta x)$$

$$+rg^n \exp(i\xi(j-1)\Delta x)$$

$$u_j^{n+1} = ru_{j-1}^n + (1-2r)u_j^n + rn_{j-1}^n, (r = \Delta t/(\Delta x)^2)$$

両辺を$g^n \exp(i\xi j\Delta x)$で割ることにより

$$g = r\exp(-i\xi\Delta x) + (1-2r) + r\exp(i\xi\Delta x)$$

ここでオイラーの公式$2\cos(z) = \exp(iz) + \exp(-iz)$を用いて

$$= (1-2r) + 2r\cos(\xi\Delta x)$$

半角の公式より

$$= 1 - 4r\sin^2\left(\frac{\xi\Delta x}{2}\right)$$

Science of interactions

解法の評価
陽的解法

$$|g| = |1 - 4r\sin^2\left(\frac{\xi\Delta x}{2}\right)|$$

|g|>1だと g^nは発散してしまうので、発散しない解を求めるためには |g|<1であることが必要。

$$-1 \le 1 - 4r\sin^2\left(\frac{\xi\Delta x}{2}\right) \le 1$$

より、$r \le \dfrac{1}{2\sin^2(\frac{\xi\Delta x}{2})} \le \dfrac{1}{2} \ldots r = \dfrac{\Delta t}{(\Delta x)^2}$

$(\Delta x)^2$に対してΔtを大きくとると、解は発散してしまうことがわかる。

Science of interactions

解法の評価
陰的解法

$$u_j^{n-1} = -ru_{j-1}^n + (1+2r)u_j^n - rn_{j-1}^n, (r = \Delta t/(\Delta x)^2)$$

陰的解法のスキームで同様の計算を行うと、

$$-rg^n \exp(i(j-1)\xi\Delta x) + (1-2r)g^n \exp(ij\Delta x)$$
$$-rg^n \exp(i(j+1)\xi\Delta t) = g^{n-1}\exp(ij\xi\Delta x)$$

より、

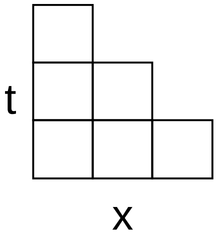
$$g(1+2r-2r\cos\xi\Delta x) = 1$$

となるから、

$$g = \frac{1}{1+4r\sin^2\dfrac{\xi\Delta x}{2}}$$ よって、$|g| \le 1$

したがって、任意のrに対して解は発散しないことがわかる！

ラプラス方程式の差分解法



① 格子を生成する（正方格子）

② 差分方程式に変換する。

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

$$u(0,y)=-4, u(1,y)=4, (0\le y\le 1)$$

$$u(x,0)=0, u(x,1)=1, (0<x<1)$$

$$\frac{u^k_{j+1}-2u^k_j-u^k_{j-1}}{h^2}+\frac{u^{k+1}_j-2u^k_j+u^{k-1}_j}{h^2}=0$$

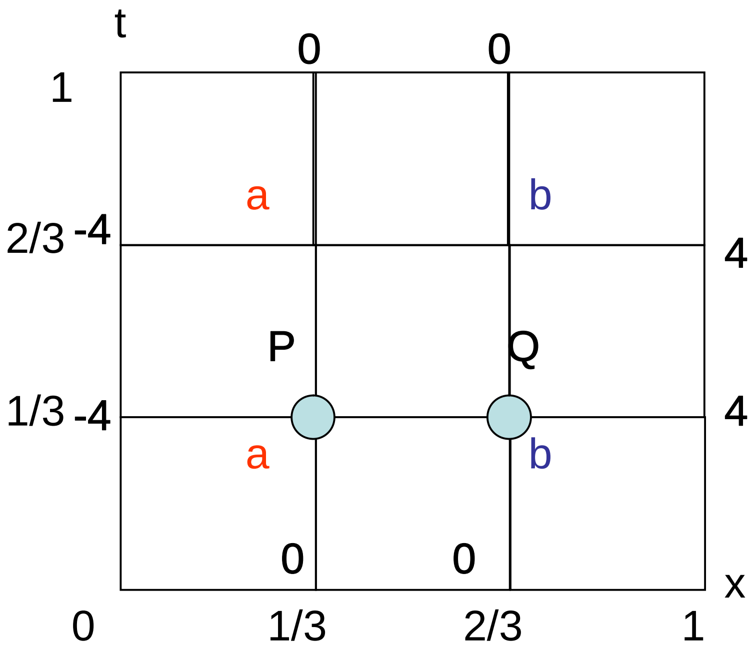
より、

$$u^k_j=\frac{1}{4}(u^k_{j+1}+u^{k+1}_j+u^k_{j-1}+u^{k-1}_j)$$

③ $(N\text{-}1)^2$元の連立方程式を解く

ラプラス方程式の差分解法
N=3の場合

$$\frac{u^{k}_{j+1}-2u^{k}_{j}-u^{k}_{j-1}}{h^2}+\frac{u^{k+1}_{j}-2u^{k}_{j}+u^{k-1}_{j}}{h^2}=0$$



点Pでは、

$$\frac{b-2a-4}{(1/3)^2}+\frac{a-2a+0}{(1/3)^2}=0$$

点Qでは、

$$\frac{4-2b+a}{(1/3)^2}+\frac{b-2b+0}{(1/3)^2}=0$$

より、

$$\begin{cases} -3a+b=4 \\ a-3b=-4 \end{cases}$$

この方程式を解くと、$a=-1, b=1$

つまり、

$u_p(\frac{1}{3},\frac{1}{3})=-1$(厳密解は$-1.0457$),

$u_Q(\frac{2}{3},\frac{1}{3})=1$(厳密解は$1.0457$)

ラプラシアン(⊿)の意味

ラプラス方程式の差分方程式変換式は

$$\frac{4}{h^2}\left(\frac{u_{j+1}^{k}+u_{j-1}^{k}+u_{j}^{k+1}+u_{j}^{k-1}}{4}-u_{j}^{k}\right)=0$$

と書き換えられる。括弧内の第１項はu_j^kの算術平均を意味している。つまり、ラプラシアンとは任意の点の平均値と関数値の差を表す。

最大値の原理
ある領域でラプラス方程式を満たす解 u を考える。そして、その領域全体における u の最大値、および、最小値を考える。その場合、u が定数でない限り、領域の内部に最大値も最小値も存在しない。