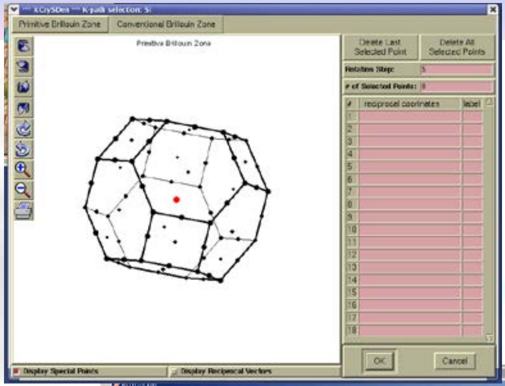
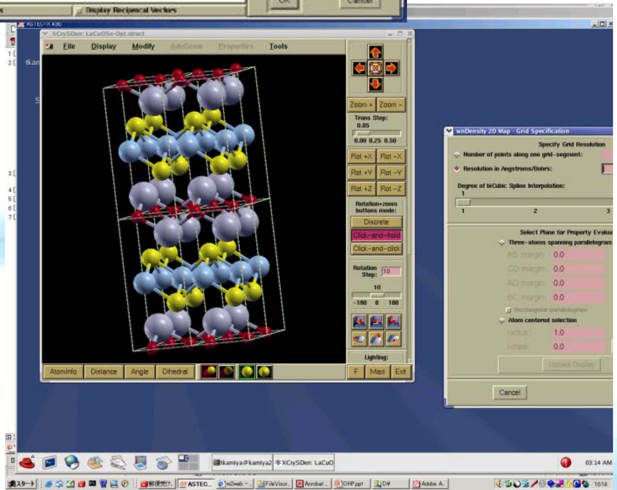
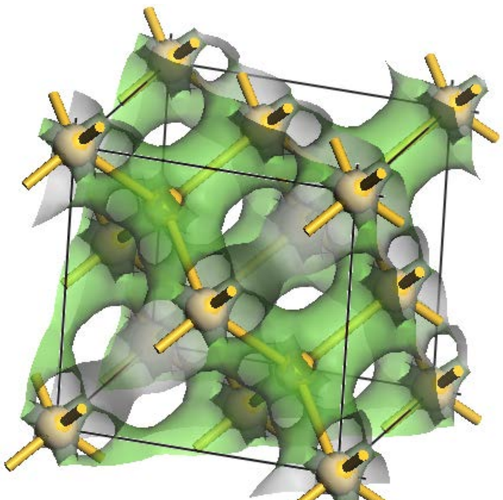
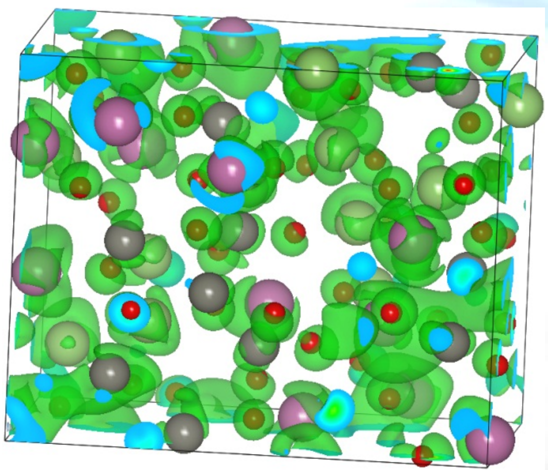
計算材料科学特論

神谷利夫









講義予定

神谷担当講義資料配布: http://conf.msl.titech.ac.jp/Lecture/

6月12日	神谷1 (コンピュータの原理)
6月15日	神谷2 (数値微分･積分、常微分方程式)
6月19日	神谷3 (分子動力学法、補間、平滑化、線形最小自乗)
6月22日	神谷4 (最適化、方程式の数値解、非線形最小自乗)
6月26日	神谷5 (Monte Carlo法、Fourier変換、行列)
6月29日	笹川1 (量子論おさらい1)
7月 3日	若井1 (微構造形成への応用、Monte Carlo法その１）
7月 6日	笹川2 (量子論おさらい2)
7月10日	若井2 (微構造形成への応用、Monte Carlo法その２）
7月13日	笹川3 (第一原理計算:基礎)
7月17日	若井3 (微構造形成への応用、Phase Field法）
7月20日	笹川4 (第一原理計算:応用1)
7月24日	若井4 （有限要素法その１）
7月27日	笹川5 (第一原理計算:応用2)
7月31日	若井5（有限要素法その２）
8月 3日	期末試験

神谷担当講義のまとめ (試験範囲)

・コンピュータの仕組み
　コンピュータ特有の誤差と
　プログラミングにおける注意点

・数値微分・積分
　差分法の考え方と簡単な計算

・微分方程式の解法
　Euler法、Verlet法、Runge-kutta法の特徴
　二階微分方程式の解き方

・方程式の解法
　二分法、Newton法の考え方、特徴

・最小二乗法
　線形最小二乗法の特徴
　非線形最小化問題の解き方の概略、問題点・注意点

・平滑化
　平滑化の考え方、利点と問題点・注意点

・フーリエ変換
　フーリエ変換の特徴と問題点

・ある実験データが与えられた時、どのような方法でデータ処理、解析ができるか

・自分の研究で、どのような目的で、どのような数値解析を使えるか

試験対象外

・自己無動着法
・Monte Carlo法
・KK変換
・行列問題の解法

数値微分

数値計算: 微分

$\dfrac{df(x)}{dx}$ をコンピュータでどのように計算するか

微分 d を差分 Δ で置き換える

$$\frac{df(x)}{dx} \sim \frac{\Delta f(x)}{\Delta x} = \frac{f(x+h)-f(x)}{(x+h)-x} = \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$$

h を 小さくすれば精度が上がる ⇔ 桁落ち誤差

32bit浮動小数点 (~7桁) ：扱う最小数値の 5桁下が限界
64bit浮動小数点 (~16桁): 扱う最小数値の 14桁下が限界

$$f(x+h) = f(x) + \frac{df(x)}{dx}h + \frac{1}{2}\frac{d^2 f(x)}{dx^2}h^2 + O(h^3)$$

$$\frac{f(x+h)-f(x)}{h} = \frac{df(x)}{dx} + \boxed{\frac{1}{2}\frac{d^2 f(x)}{dx^2}h + O(h^2)}$$

差分誤差

数値微分: 例

$f(x) = x^3$

$df(x)/dx = 3x^2$

		h=	1	0.1	0.01	0.001	1.00E-06
x	f(x)	df(x)/dx	Δf(x)/Δx				
0	0	0	1	0.01	0.0001	1E-06	1E-12
0.1	0.001	0.03	1.33	0.07	0.0331	0.0303	0.0300003
0.2	0.008	0.12	1.72	0.19	0.1261	0.1206	0.1200006
0.3	0.027	0.27	2.17	0.37	0.2791	0.2709	0.2700009
0.4	0.064	0.48	2.68	0.61	0.4921	0.4812	0.4800012
0.5	0.125	0.75	3.25	0.91	0.7651	0.7515	0.7500015
0.6	0.216	1.08	3.88	1.27	1.0981	1.0818	1.0800018
0.7	0.343	1.47	4.57	1.69	1.4911	1.4721	1.4700021
0.8	0.512	1.92	5.32	2.17	1.9441	1.9224	1.9200024
0.9	0.729	2.43	6.13	2.71	2.4571	2.4327	2.4300027
1	1	3	7	3.31	3.0301	3.003	3.000003
1.1	1.331	3.63	7.93	3.97	3.6631	3.6333	3.6300033
1.2	1.728	4.32	8.92	4.69	4.3561	4.3236	4.3200036
1.3	2.197	5.07	9.97	5.47	5.1091	5.0739	5.070003899
1.4	2.744	5.88	11.08	6.31	5.9221	5.8842	5.8800042
1.5	3.375	6.75	12.25	7.21	6.7951	6.7545	6.750004499
1.6	4.096	7.68	13.48	8.17	7.7281	7.6848	7.680004799
1.7	4.913	8.67	14.77	9.19	8.7211	8.6751	8.6700051
1.8	5.832	9.72	16.12	10.27	9.7741	9.7254	9.720005399
1.9	6.859	10.83	17.53	11.41	10.8871	10.8357	10.8300057
2	8	12	19	12.61	12.0601	12.006	12.000006

数値微分: 精度を上げる

$$\frac{df(x)}{dx} \sim \frac{f(x+h)-f(x)}{h} \qquad \frac{df(x)}{dx} \sim \frac{f(x)-f(x-h)}{h}$$

*x*に関して対称ではない

$$\frac{df(x)}{dx} \sim \left[\frac{f(x+h)-f(x)}{h} + \frac{f(x)-f(x-h)}{h}\right]/2 = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$

$\boldsymbol{f(x) = x^3}$ $\qquad$ $\boldsymbol{df(x)/dx = 3x^2}$

		h=	1	1	0.01	0.01
x	f(x)	df(x)/dx	(f(x+h)-f(x))/h	(f(x+h)-f(x-h))/(2h)	(f(x+h)-f(x))/h	(f(x+h)-f(x-h))/(2h)
0	0	0	1	1	0.0001	0.0001
0.2	0.008	0.12	1.72	1.12	0.1261	0.1201
0.4	0.064	0.48	2.68	1.48	0.4921	0.4801
0.6	0.216	1.08	3.88	2.08	1.0981	1.0801
0.8	0.512	1.92	5.32	2.92	1.9441	1.9201
1	1	3	7	4	3.0301	3.0001
1.2	1.728	4.32	8.92	5.32	4.3561	4.3201
1.4	2.744	5.88	11.08	6.88	5.9221	5.8801
1.6	4.096	7.68	13.48	8.68	7.7281	7.6801
1.8	5.832	9.72	16.12	10.72	9.7741	9.7201
2	8	12	19	13	12.0601	12.0001

数値微分: 平均を取って精度を上げる

$$\frac{df(x)}{dx} \sim \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$$

誤差: $$\frac{f(x+h)-f(x)}{h} = \frac{df(x)}{dx} + \boxed{\frac{1}{2}\frac{d^2 f(x)}{dx^2}h + \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(x)}{dx^3}h^2 + O(h^4)}$$

$$\frac{df(x)}{dx} \sim \left[\frac{f(x+h)-f(x)}{h} + \frac{f(x)-f(x-h)}{h}\right]/2 = \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}$$

$$f(x+h) = f(x) + \frac{df(x)}{dx}h + \frac{1}{2}\frac{d^2 f(x)}{dx^2}h^2 + \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(x)}{dx^3}h^3 + O(h^4)$$

$$f(x-h) = f(x) - \frac{df(x)}{dx}h + \frac{1}{2}\frac{d^2 f(x)}{dx^2}h^2 - \frac{1}{3!}\frac{d^3 f(x)}{dx^3}h^3 + O(h^4)$$

誤差: $$\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} = \frac{df(x)}{dx} + \boxed{\frac{1}{3!}\frac{d^3 f(x)}{dx^3}h^2 + O(h^3)}$$

数値微分: 展開

$$f(x+h) = f(x) + \frac{df(x)}{dx}h + \frac{1}{2}\frac{d^2 f(x)}{dx^2}h^2 + O(h^3)$$

$$\frac{df(x)}{dx} \sim \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} \sim \frac{f'(x+h) - f'(x)}{h} = \frac{\dfrac{f(x+2h) - f(x+h)}{h} - \dfrac{f(x+h) - f(x)}{h}}{h}$$

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

$$f(x+h) \sim f(x) + \frac{f(x+h) - f(x)}{h}h + \frac{1}{2}\frac{f(x+2h) - 2f(x+h) - f(x)}{h^2} + O(h^3)$$

$$= f(x) + [f(x+h) - f(x)] + \frac{1}{2}[f(x+2h) - 2f(x+h) - f(x)]$$

$$= \frac{1}{2}[f(x+2h) - f(x)]$$

$$\boxed{\frac{df(x+h)}{dx} \sim \frac{f(x+2h) - f(x)}{2h}}$$

平均を取った場合と同じ精度

より精度の高い近似式も可能

$$f(x+h) = f(x) + \frac{df(x)}{dx}h + \frac{1}{2}\frac{d^2 f(x)}{dx^2}h^2 + \frac{1}{6}\frac{d^3 f(x)}{dx^3}h^3 + O(h^4)$$

高次の微分公式

$$
\begin{aligned}
[3\text{点公式}]\ f'(a) &= \frac{1}{h}\left\{\frac{1}{2}f(a+h)-\frac{1}{2}f(a-h)\right\}\\
&+ \frac{1}{6}f^{(3)}(a)h^2+\cdots\\
[5\text{点公式}]\ f'(a) &= \frac{1}{h}\left\{-\frac{1}{12}f(a+2h)+\frac{2}{3}f(a+h)-\frac{2}{3}f(a-h)+\frac{1}{12}f(a-2h)\right\}\\
&+ \frac{1}{30}f^{(5)}(a)h^4+\cdots\\
[7\text{点公式}]\ f'(a) &= \frac{1}{h}\left\{\frac{1}{60}f(a+3h)-\frac{3}{20}f(a+2h)+\frac{3}{4}f(a+h)-\frac{3}{4}f(a-h)\right.\\
&+ \left.\frac{3}{20}f(a-2h)-\frac{1}{60}f(a-3h)\right\}\\
&+ \frac{1}{140}f^{(7)}(a)h^6+\cdots
\end{aligned}
$$

補外型微分: Richardson補外

森正武, FORTRAN 77 数値計算プログラミング、岩波書店 (1987年増補版)

- 中点則から出発し、高次の微分に相当する公式を自動的に適用し、要求精度を満たすまで続ける。

1. 刻み幅 h_0で中点則 $D_0^{(0)} = (f(x+h) - f(x-h)) / (2h)$ で微分を計算する
2. 刻み幅を $h_k = (1/2)^k h$ として計算した微分を$D_0^{(k)}$ とする
3. 次の式を計算する

$$D_m^{(k)} = \frac{4^m D_{m-1}^{(k+1)} - D_{m-1}^{(k)}}{4^m - 1}$$

4. $|D_m^{(0)} - D_{m-1}^{(0)}|$ が必要精度以下になったら終了

数値微分の誤差

$$\left.\frac{d}{dx}\exp(x)\right|_{x=1}$$

解析解: exp(1) = 2.71828182845905

N_{div}	h	2点	3点	5点	7点	Richardson extra	
1	0.5	8.09E-01	1.15E-01	-5.83E-03	3.18E-04		
2	0.25	3.70E-01	2.84E-02	-3.57E-04	4.80E-06	-3.57E-04	
3	0.125	1.77E-01	7.08E-03	-2.22E-05	7.43E-08		
4	0.0625	8.67E-02	1.77E-03	-1.38E-06	1.16E-09	2.06E-09	
5	0.03125	4.29E-02	4.42E-04	-8.64E-08	1.81E-11		
6	0.01563	2.13E-02	1.11E-04	-5.40E-09	2.64E-13		
7	0.00781	1.06E-02	2.77E-05	-3.38E-10	4.44E-15		
8	0.00391	5.32E-03	6.91E-06	-2.11E-11	-7.90E-14	-1.38E-14	
9	0.00195	2.66E-03	1.73E-06	-1.37E-12	-3.51E-14		
10	0.00098	1.33E-03	4.32E-07	-1.23E-13	-3.65E-13		
11	0.00049	6.64E-04	1.08E-07	-8.42E-13	-5.70E-13		
12	0.00024	3.32E-04	2.70E-08	-2.36E-13	7.04E-13		
13	0.00012	1.66E-04	6.75E-09	1.28E-12	5.52E-13		
14	6.1E-05	8.30E-05	1.69E-09	-2.36E-13	-1.93E-12		
15	3.1E-05	4.15E-05	4.19E-10	-5.09E-12	-1.69E-12		
16	1.5E-05	2.07E-05	1.06E-10	-7.51E-12	1.63E-11	-3.11E-15	
17	7.6E-06	1.04E-05	1.92E-11	-1.48E-11	3.64E-12		
18	3.8E-06	5.18E-06	-9.94E-12	-4.87E-11	-9.94E-12	4.52E-13	
19	1.9E-06	2.59E-06	-9.94E-12	-2.93E-11	-2.18E-12	1.69E-12	
20	9.5E-07	1.30E-06	-1.26E-10	-8.75E-11	-1.03E-10	2.74E-12	
32	2.3E-10	8.71E-07	-8.25E-08	-4.00E-07	-5.91E-07	-1.66E-13	

データが等間隔でない場合

x	y
x_{-1}	y_{-1}
x_0	y_0
x_1	y_1

平均をとる

$$y'(x_0) = \frac{1}{2}\left[\frac{y_1 - y_0}{x_1 - x_0} + \frac{y_0 - y_{-1}}{x_0 - x_{-1}}\right]$$

多項式を使う: Lagrangeの補間公式

$$P_{n-1}(x) = f(x_0)\varphi_0(x) + f(x_1)\varphi_1(x) + \cdots f(x_{n-1})\varphi_{n-1}(x)$$

$$\varphi_i(x) = \frac{\prod_{k\neq i}^{n-1}(x - x_k)}{\prod_{k\neq i}^{n-1}(x_i - x_k)} = \prod_{k\neq i}^{n-1}\frac{(x - x_k)}{(x_i - x_k)}$$

$$y(x) = y_{-1}\frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_{-1} - x_0)(x_{-1} - x_1)} + y_0\frac{(x - x_{-1})(x - x_1)}{(x_0 - x_{-1})(x_0 - x_1)} + y_1\frac{(x - x_{-1})(x - x_0)}{(x_1 - x_{-1})(x_1 - x_0)}$$

$$y'(x) = y_{-1}\frac{2x - (x_0 + x_1)}{(x_{-1} - x_0)(x_{-1} - x_1)} + y_0\frac{2x - (x_{-1} - x_1)}{(x_0 - x_{-1})(x_0 - x_1)} + y_1\frac{2x - (x_{-1} - x_0)}{(x_1 - x_{-1})(x_1 - x_0)}$$

数値積分

数値積分

$$F(x) = \int_{x_0}^{x} g(x')dx'$$ をコンピュータでどのように計算するか

積分 を和 で置き換える

$$\int_{x_0}^{x} g(x')dx' = \sum_{i=0}^{x_i = x} g(x_i)h$$

差分式からの導出:

$$\frac{df(x)}{dx} \sim \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad \Rightarrow \quad g(x) \sim \frac{F(x+h) - F(x)}{h}$$

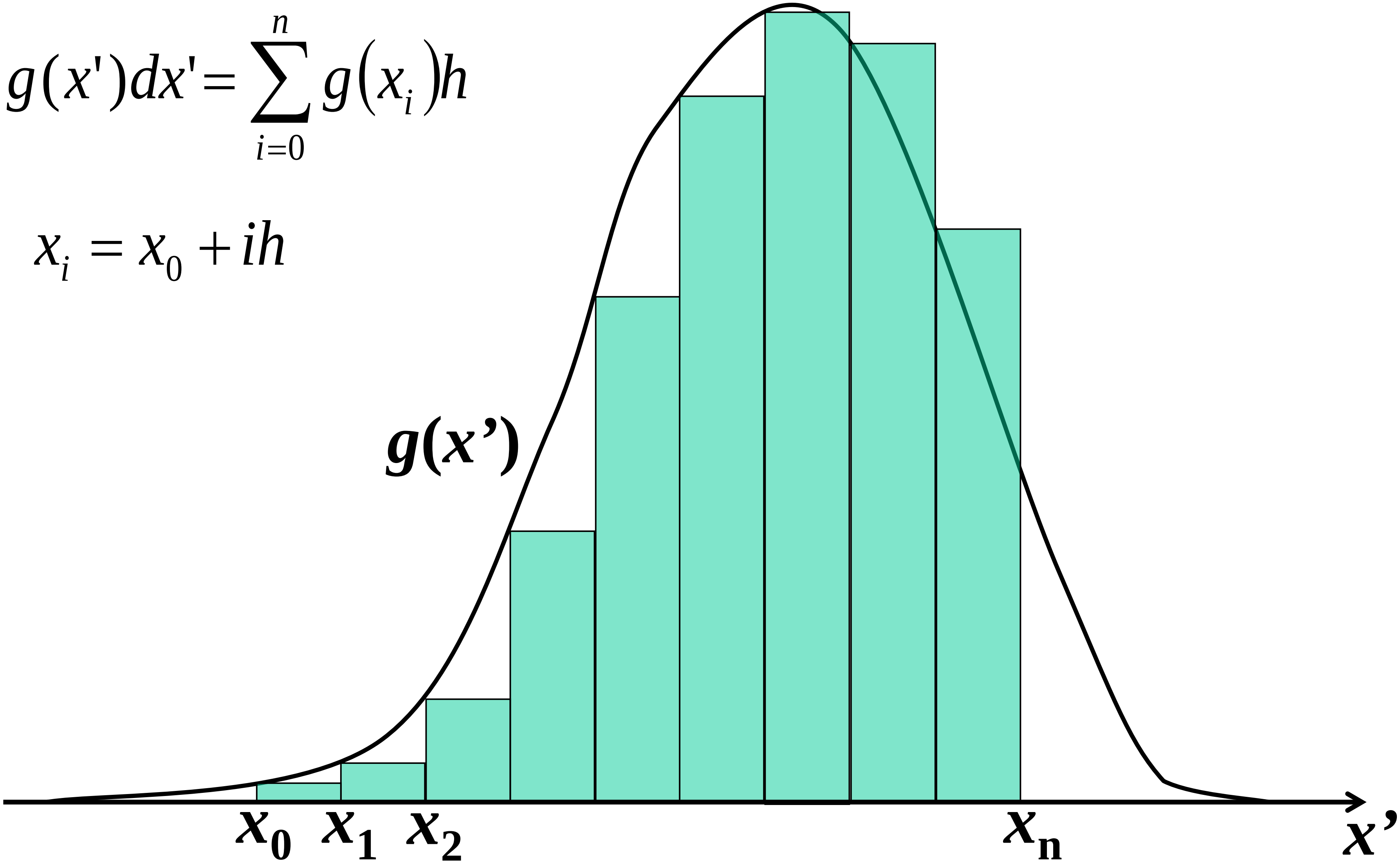
$$F(x+h) = F(x) + g(x)h = F(x-h) + \left[g(x) + g(x-h)\right]h$$

$$= \sum_{i=0}^{x_i = x} g(x_i)h$$

数値積分 (Rieman積分)

$$\int_{x_0}^{x} g(x')dx' = \sum_{i=0}^{n} g(x_i)h$$

$$x_i = x_0 + ih$$



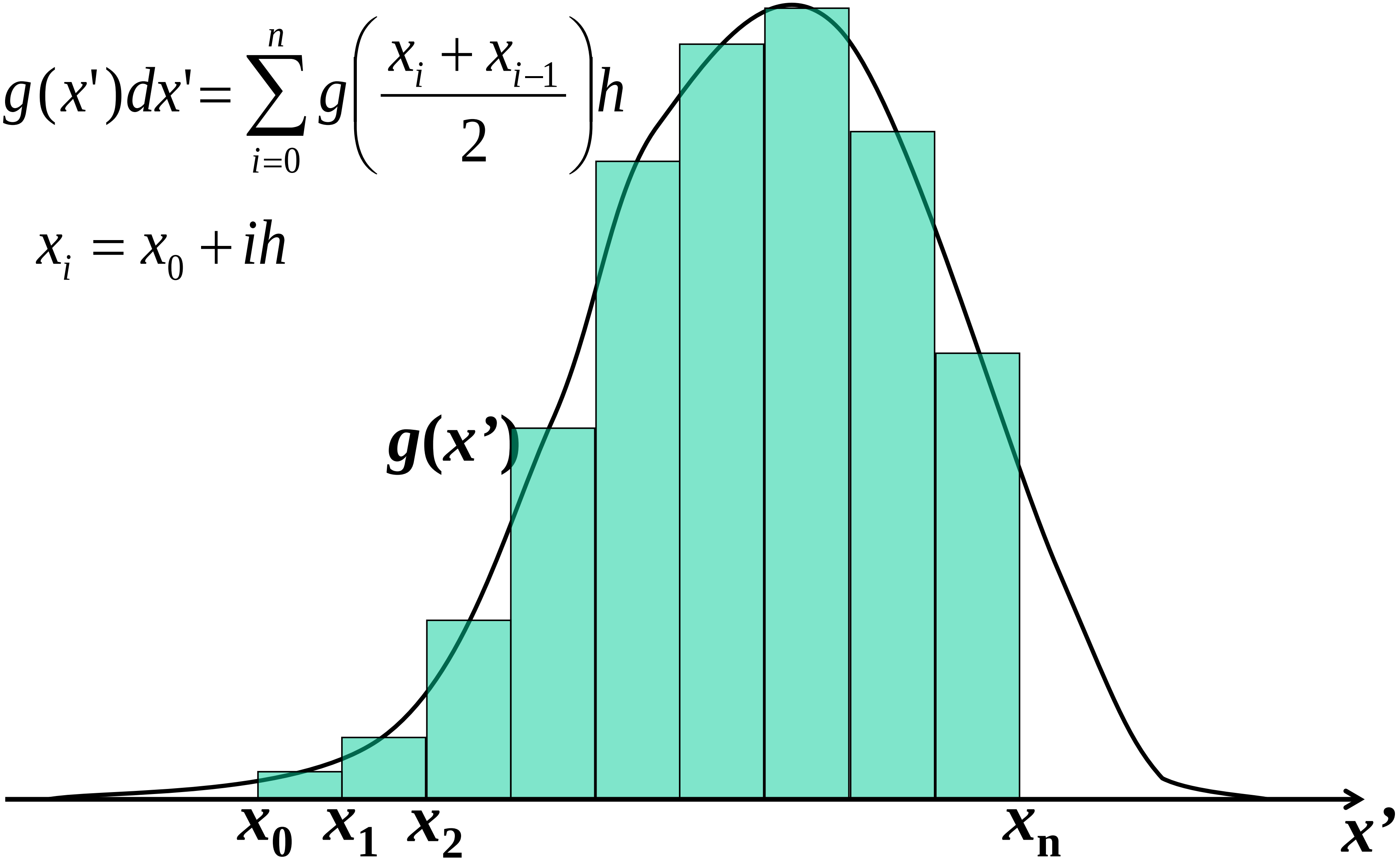
非対称: $g(x)$が増加関数 => 過小評価

$g(x)$が減少関数 => 過大評価

数値積分: 平均値を使う (中点則)

$$\int_{x_0}^{x} g(x')dx' = \sum_{i=0}^{n} g\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right)h$$

$$x_i = x_0 + ih$$



$(x_i+x_{i-1})/2$ における $g(x)$ がわからないといけない

=> $g(x)$が数値データで与えられていると使えない

数値積分: 台形公式

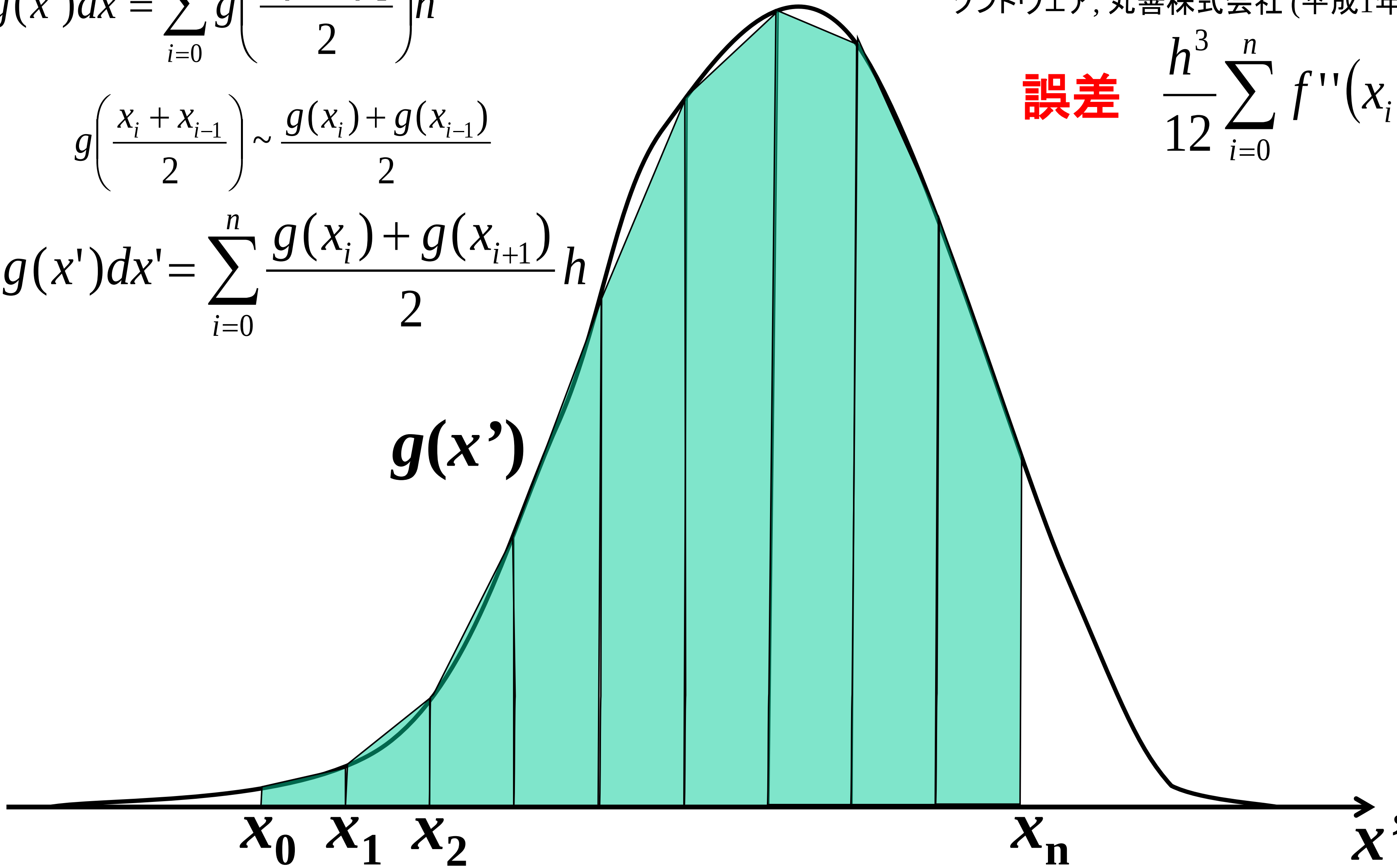
渡部力ら監修、Fortran77による数値計算ソフトウェア, 丸善株式会社 (平成1年)

$$\int_{x_0}^{x} g(x')dx' = \sum_{i=0}^{n} g\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right)h$$

$$g\left(\frac{x_i + x_{i-1}}{2}\right) \sim \frac{g(x_i) + g(x_{i-1})}{2}$$

$$\int_{x_0}^{x} g(x')dx' = \sum_{i=0}^{n} \frac{g(x_i) + g(x_{i+1})}{2}h$$

誤差 $\frac{h^3}{12}\sum_{i=0}^{n} f''(x_i)$



数値積分: Simpson法

$$g(x_i) \sim g(x_1) + a_1(x_i - x_1) + a_2(x_i - x_1)^2$$

で近似し、x_0, x_1, x_2で精確に $f(x_0)$, $f(x_1)$, $f(x_2)$に一致するように a_i を決める ($x_i = x_1 - h, x_1, x_1 + h$)

2区間 ($x = x_0 \sim x_0 + 2h$) の積分

$$\int_{x_0}^{x_2} g(x')dx' \sim \frac{1}{3}h\left[g(x_0) + 4g(x_1) + g(x_2)\right]$$

多区間 ($x = x_0 \sim x_n = x_0 + nh$) の積分

$$\int_{x_0}^{x_n} g(x')dx' \sim \frac{h}{3}\left[g(x_0) + 4g(x_1) + 2g(x_2) + 4g(x_3) + 2g(x_4) + \cdots + g(x_n)\right]$$

数値積分: Simpson法

$$g(x_i) \sim g(x_1) + a_1(x_i - x_1) + a_2(x_i - x_1)^2$$

で近似し、x_0, x_1, x_2で精確に $f(x_0)$, $f(x_1)$, $f(x_2)$に一致するように a_i を決める ($x_i = x_1 - h, x_1, x_1 + h$)

$$g(x_0) \sim g(x_1) - a_1 h + a_2 h^2$$
$$g(x_2) \sim g(x_1) + a_1 h + a_2 h^2$$

$$\Rightarrow \quad a_1 = \frac{g(x_2) - g(x_0)}{2h} \qquad a_2 = \frac{g(x_2) - 2g(x_1) + g(x_0)}{2h^2}$$

$$\int_{x_0}^{x_2} g(x')dx' \sim g(x_1)x_2 + \frac{1}{2}\frac{g(x_2)-g(x_0)}{2h}(x_2 - x_1)^2 + \frac{1}{3}\left[\frac{g(x_2)-2g(x_1)+g(x_0)}{2h^2}\right](x_2 - x_1)^3$$
$$-\left\{g(x_1)x_0 + \frac{1}{2}\frac{g(x_2)-g(x_0)}{2h}(x_0 - x_1)^2 + \frac{1}{3}\left[\frac{g(x_2)-2g(x_1)+g(x_0)}{2h^2}\right](x_0 - x_1)^3\right\}$$
$$= 2g(x_1)h + 2\left[\frac{g(x_2)-2g(x_1)+g(x_0)}{6}\right]h$$
$$= \frac{1}{3}\left[g(x_2) + 4g(x_1) + g(x_0)\right]$$

片岡勲 他、数値解析入門, コロナ社

誤差 $\leq \dfrac{nh^5}{180}\left|f^{(4)}(x_i)\right|$

Newton-Cotes公式

- **台形則**

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)dx = h\left[\frac{1}{2}f_1 + \frac{1}{2}f_2\right] + O(h^3 f'')$$

- **Simpson則**

$$\int_{x_1}^{x_3} f(x)dx = h\left[\frac{1}{3}f_1 + \frac{4}{3}f_2 + \frac{1}{3}f_3\right] + O(h^5 f^{(4)})$$

- **Simpsonの3/8則**

$$\int_{x_1}^{x_4} f(x)dx = h\left[\frac{3}{8}f_1 + \frac{9}{8}f_2 + \frac{9}{8}f_3 + \frac{3}{8}f_4\right] + O(h^5 f^{(4)})$$

- **Bode則**

$$\int_{x_1}^{x_5} f(x)dx = h\left[\frac{14}{45}f_1 + \frac{64}{45}f_2 + \frac{24}{45}f_3 + \frac{64}{45}f_4 + \frac{14}{45}f_5\right] + O(h^7 f^{(6)})$$

Simpson法より単純和(台形則)の方が良い

$$\int_{x_0}^{x_n} g(x')dx' \sim \frac{h}{3}\left[g(x_0)+4g(x_1)+2g(x_2)+4g(x_3)+2g(x_4)+\cdots+g(x_n)\right]$$

積分範囲が $x_0 \sim x_n$ と有限

両無限積分 (積分範囲 -∞ ~ ∞) では、x_0, x_nは本質的な意味を持たない

$$\int_{x_0}^{x_n} g(x')dx' \sim \frac{h}{3}\left[g(x_{-1})+4g(x_0)+2g(x_1)+4g(x_2)+2g(x_3)+\cdots+g(x_{n-1})\right]$$

でも良い。上の2つの式の平均を取ると

$$\int_{x_0}^{x_n} g(x')dx' \sim \frac{h}{3}\left[0.5g(x_{-1})+2.5g(x_0)+3g(x_1)+3g(x_2)+3g(x_3)+3g(x_4)+\cdots+0.5g(x_n)\right]$$

両無限積分では端の値は無視できるほど小さいことを考えると

$$\int_{x_0}^{x_n} g(x')dx' \sim h\left[g(x_1)+g(x_2)+g(x_3)+g(x_4)+\cdots+g(x_{n-2})\right]$$

となる。

端値が無視できることを考えると、台形則の結果と一致する

その他の数値積分法の特徴

Newton-Cotes法: $g(x)$を等分割し、各積分点を通る
多項式で近似して解析的に積分する

・台形則 (一次式)
・高次のSimpson則 (二次式、三次式)
・Boole則 (四次式)

計算点位置も含めて精度が最大になるようにする
(精度は高い、積分点が等間隔でない)

・Gauss-Legendre法
・Gauss-Chebyshev法

補間型 (補間関数で精度を上げられる、計算量が多い？)

・Spline積分

補外型 (精度は高い、積分精度の確認が可能)

・ロンバーグ積分

変数変換型 (無限積分や特異点がある場合に有利)

・二重指数関数型公式

Gauss-Legendre法

戸田英雄, 小野令美，入門 数値計算, オーム社 (昭和58年)

- 積分区間に n個の積分点を選ぶ際、積分点と重みの 2*n*個のパラメータを $f(x)$ が (2*n*-1)次の多項式に一致するように決める。
- 端点を含まないので、積分区間端に特異点があっても計算できる
- 有限区間で解析的な関数の積分では最も精度が高い

- 分点はLegendre多項式の零点

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\left(x^2 - 1\right)^2 = 0$$

- 重み $w_i = \dfrac{2(1-x^2)}{(n+1)^2\left[P_{n+1}(x_i)\right]^2}$

$$S = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) w_i$$

Gauss-Legendre法: 分点と重み

i 欄の分点は-1を掛ける

分点	重み係数
4 点公式	
−0.861136311594052575223946488892	0.347854845137453857373063949221
−0.339981043584856264802665759103	0.652145154862546142626936050778
+0.339981043584856264802665759103	0.652145154862546142626936050778
+0.861136311594052575223946488892	0.347854845137453857373063949221
5 点公式	
−0.906179845938663992797626878299	0.236926885056189087514264040719
−0.538469310105683091036314420700	0.478628670499366468041291514835
0	0.568888888888888888888888888888
+0.538469310105683091036314420700	0.478628670499366468041291514835
+0.906179845938663992797626878299	0.236926885056189087514264040719
6 点公式	
−0.932469514203152027812301554493	0.171324492379170345040296142172
−0.661209386466264513661399595019	0.360761573048438607569833513837
−0.238619186093196908630501721680	0.467913934572691047389870343989
+0.238619186093196908630501721680	0.467913934572691047389870343989
+0.661209386466264513661399595019	0.360761573048438607569833513837
+0.932469514203152027812301554493	0.171324492379170345040296142172
7 点公式	
−0.949107912342758524526189684047	0.129484966168869693270611432679
−0.741531185599394439863864773280	0.279705391489276667901467771423
−0.405845151377397166906606412076	0.381830050505118944950369775488
0	0.417959183673469387755102040816
+0.405845151377397166906606412076	0.381830050505118944950369775488
+0.741531185599394439863864773280	0.279705391489276667901467771423
+0.949107912342758524526189684047	0.129484966168869693270611432679

補外型積分: Romberg積分

戸田英雄, 小野令美, 入門 数値計算, オーム社 (昭和58年)

被積分関数が積分区間で十分性質が良く、積分区間が有限な場合

・台形則から出発し、高次のニュートン・コーツ型に相当する公式を自動的に適用し、要求精度を満たすまで続ける。

1. 積分区間 $[a, b]$ で、刻み幅 $h_0 = b - a$ で台形則で積分を計算し、その近似値を $S_{0,0}$ とする
2. 刻み幅を $h_1 = (1/2)h_0$ とし、各区間の台形則の和として $S_{1,0}$ とする
3. 刻み幅を $h_k = (1/2)h_{k-1}$ とし、各区間の台形則の和として $S_{k,0}$ とし、次の式で $S_{k,d}$ ($d = 1, 2, \cdots, k$) を求める

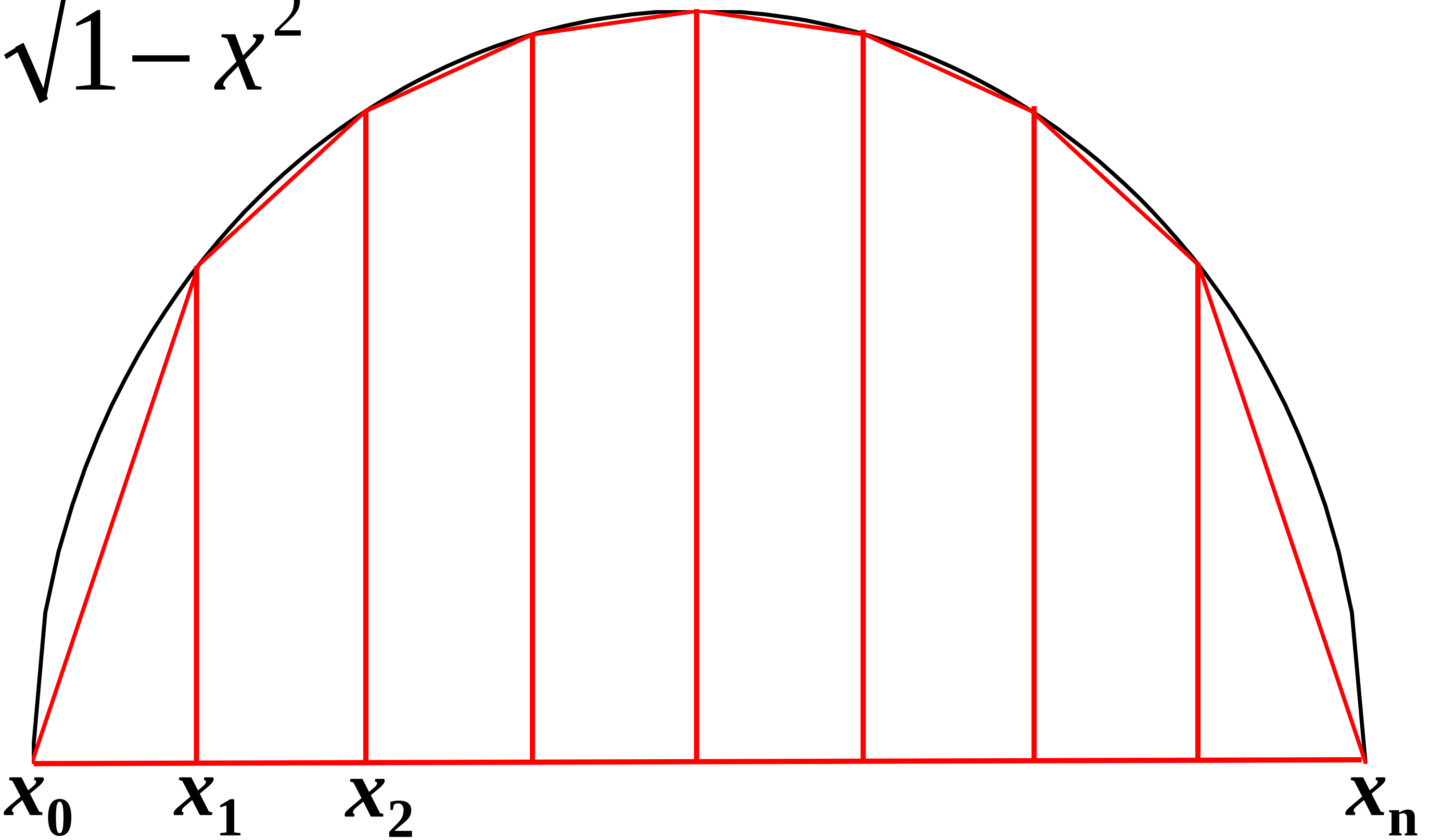
$$S_{k,d} = \frac{4^d S_{k,d-1} - S_{k-1,d-1}}{4^d - 1}$$

4. $S_{k,k}$ を積分の近似値とする。$|S_{k,k} - S_{k-1,k-1}|$ が必要精度以下になったら終了

特異点を含む場合の問題

$$F(x) = \int_{x_0}^{x} g(x')dx'$$

$$g(x) = \sqrt{1 - x^2}$$



$|f'(x)|$, $|f''(x)|$ が大きい場合に積分精度が悪くなる

変数変換型: 伊理・森口・高沢(I.M.T.)の公式

戸田英雄, 小野令美, 入門 数値計算, オーム社 (昭和58年)

端点に特異性のある有限区間の積分に有効

変数変換

$$x = \phi(u) = \frac{1}{Q}\int_0^u \exp\left(-\frac{1}{t} - \frac{1}{1-t}\right)dt \qquad \phi'(u) = \frac{1}{Q}\exp\left(-\frac{1}{t} - \frac{1}{1-t}\right)$$

$$Q = \int_0^1 \exp\left(-\frac{1}{t} - \frac{1}{1-t}\right)dt = 0.00702985841$$

により、区間 [0,1] の積分を、同じ区間 [0,1] の積分

$$\int_0^1 f(x)dx = \int_0^1 f(\phi(u))\phi'(u)du$$

に変換し、台形則で近似値を求める

1. $x = (x' - a) / (b - a)$ **の変換で積分区間を [0,1]にする。**

$$\int_a^b f(x')dx' = (b-a)^{-1}\int_0^1 f(x)dx$$

2. **あらかじめ分点** $x_k = \phi(k/n)$ **と重み** $w_k = \phi'(k/n)$ **を計算しておく**

3. $I = h\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)w_k$ **を求める** ($h = n^{-1}(b-a)^{-1}$)

変数変換型: 二重指数関数型公式

戸田英雄, 小野令美, 入門 数値計算, オーム社 (昭和58年)

端点に特異性のある積分や、無限区間の積分を求めるのに有効

変数変換により、区間 (-∞, ∞) の積分に変換し、台形則でもとめる

$$S = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f\left(\phi(nh)\right)\phi'(nh)$$

$\int_{-1}^{1} f(x)dx$ **のとき**

$$x_n = \phi(nh) = \tanh\left[\frac{\pi}{2}\sinh(nh)\right] \qquad \phi'(nh) = \frac{\pi}{2}\frac{\cosh nh}{\cosh^2\left((\pi/2)\sinh nh\right)}$$

$\int_{0}^{\infty} f(x)dx$ **のとき**

$$x_n = \phi(nh) = \exp\left[\frac{\pi}{2}\sinh(nh)\right] \qquad \phi'(nh) = \frac{\pi}{2}\cosh nh \exp\left(\frac{\pi}{2}\sinh nh\right)$$

$\int_{0}^{\infty} f(x)dx$ **で *f*(*x*) が exp(-*x*) の因子を含んでいるとき**

$$x_n = \phi(nh) = \exp\left[\frac{\pi}{2}\left(nh - \exp(-nh)\right)\right] \qquad \phi'(nh) = \frac{\pi}{2}\left(1 + \exp(-nh)\right)\exp\left(\frac{\pi}{2}\left(nh - \exp(-nh)\right)\right)$$

$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx$ **のとき**

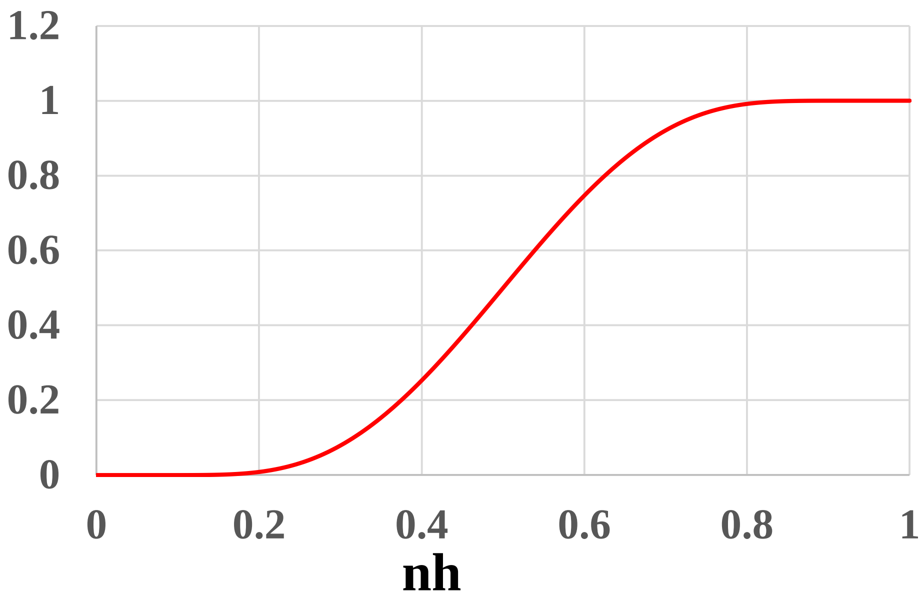
$$x_n = \phi(nh) = \sinh\left[\frac{\pi}{2}\sinh(nh)\right] \qquad \phi'(nh) = \frac{\pi}{2}\cosh nh \cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(nh)\right)$$

変数変換型: 伊理・森口・高沢(I.M.T.)の公式

戸田英雄, 小野令美, 入門 数値計算, オーム社 (昭和58年)

$$x_n = \phi(nh) = \frac{1}{Q}\int_0^{nh} \exp\left(-\frac{1}{t} - \frac{1}{1-t}\right) dt$$

Q = 0.00702985841

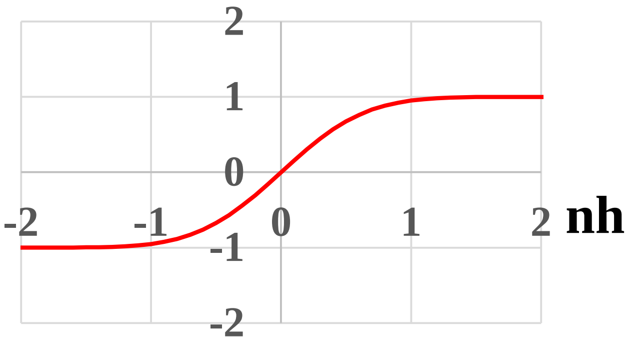


変数変換型: 二重指数関数型公式の積分点

戸田英雄, 小野令美, 入門 数値計算, オーム社 (昭和58年)

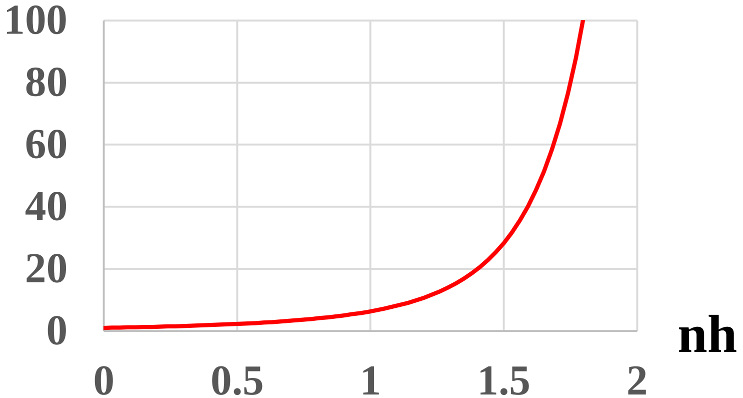
$\int_{-1}^{1} f(x)dx$ **のとき**

$$x_n = \phi(nh) = \tanh\left[\frac{\pi}{2}\sinh(nh)\right]$$



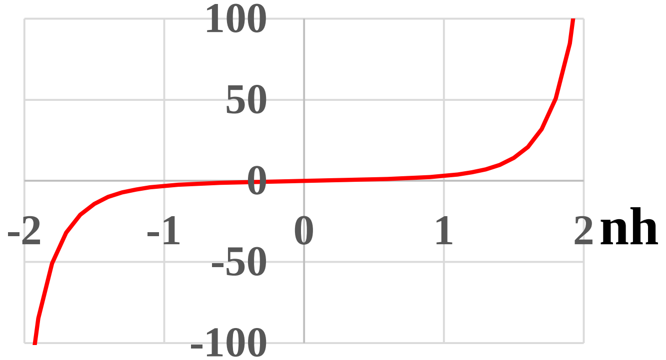
$\int_{0}^{\infty} f(x)dx$ **のとき**

$$x_n = \phi(nh) = \exp\left[\frac{\pi}{2}\sinh(nh)\right]$$



$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx$ **のとき**

$$x_n = \phi(nh) = \sinh\left[\frac{\pi}{2}\sinh(nh)\right]$$



数値積分: 比較

$g(x) = x^2$

$$\int_0^x g(x')dx' = \frac{1}{3}x^3$$

x	g(x)	解析解	$g(x_i)$の和	台形則	Simpson則
0	0	0	0	0	
0.2	0.04	0.003	0	0.004	
0.4	0.16	0.021	0.008	0.024	0.02133

数値積分の誤差: 単調増加関数

$$S = \int_{-1}^{1} \exp(x) dx$$

解析解: exp(1) - exp(-1) = 2.3504023872876

分割数	Rieman	台形則	Simpson	Simpson 3/8	Bode	Romberg	Cubic Spline	3次Gauss-Legendre
1	1.61E+00	-7.36E-01				-7.36E-01		
2	9.83E-01	-1.93E-01	-1.17E-02			-1.17E-02		6.55E-05
3	6.97E-01	-8.64E-02		-5.25E-03				
4	5.39E-01	-4.88E-02	-7.92E-04		-6.85E-05	-6.85E-05	7.19E-03	1.13E-06
5	4.39E-01	-3.13E-02					3.75E-03	
6	3.70E-01	-2.17E-02	-1.59E-04	-3.53E-04			2.35E-03	1.01E-07
7	3.20E-01	-1.60E-02					1.54E-03	
8	2.82E-01	-1.22E-02	-5.06E-05		-1.18E-06	-1.07E-07	1.07E-03	1.81E-08
9	2.51E-01	-9.66E-03		-7.08E-05			7.73E-04	
10	2.27E-01	-7.83E-03	-2.08E-05				5.77E-04	4.75E-09
11	2.07E-01	-6.47E-03					4.41E-04	
12	1.90E-01	-5.44E-03	-1.00E-05	-2.25E-05	-1.05E-07		3.45E-04	1.59E-09
13	1.76E-01	-4.63E-03					2.75E-04	
14	1.64E-01	-4.00E-03	-5.43E-06				2.23E-04	6.32E-10
15	1.53E-01	-3.48E-03		-9.25E-06			1.83E-04	
16	1.44E-01	-3.06E-03	-3.18E-06		-1.88E-08	-4.21E-11	1.52E-04	2.84E-10
17	1.36E-01	-2.71E-03					1.28E-04	
18	1.28E-01	-2.42E-03	-1.99E-06	-4.46E-06			1.08E-04	1.40E-10
19	1.22E-01	-2.17E-03					9.27E-05	
20	1.16E-01	-1.96E-03	-1.30E-06		-4.95E-09		7.99E-05	7.45E-11
32						-3.55E-15		

数値積分の誤差: 特異点のある場合

$$S = \int_{-1}^{1} \sqrt{1-x^2}\,dx$$

解析解: $\pi/2 = 1.5707963$

分割数	Rieman	台形則	Simpson	Simpson 3/8	Bode	Romberg	Cubic Spline	3次Gauss-Legendre
1	1.57E+00	1.57E+00				1.57E+00		
2	5.71E-01	5.71E-01	2.37E-01			2.37E-01		-2.08E-02
3	3.14E-01	3.14E-01		1.57E-01				
4	2.05E-01	2.05E-01	8.28E-02		7.24E-02	7.24E-02	6.93E-02	-7.24E-03
5	1.47E-01	1.47E-01					5.26E-02	
6	1.12E-01	1.12E-01	4.48E-02	5.47E-02			3.97E-02	-3.92E-03
7	8.90E-02	8.90E-02					3.17E-02	
8	7.29E-02	7.29E-02	2.90E-02		2.54E-02	2.47E-02	2.60E-02	-2.54E-03
9	6.12E-02	6.12E-02		2.96E-02			2.18E-02	
10	5.23E-02	5.23E-02	2.07E-02				1.87E-02	-1.81E-03
11	4.53E-02	4.53E-02					1.62E-02	
12	3.98E-02	3.98E-02	1.57E-02	1.92E-02	1.38E-02		1.42E-02	-1.38E-03
13	3.53E-02	3.53E-02					1.26E-02	
14	3.16E-02	3.16E-02	1.25E-02				1.13E-02	-1.09E-03
15	2.85E-02	2.85E-02		1.37E-02			1.02E-02	
16	2.59E-02	2.59E-02	1.02E-02		8.95E-03	8.62E-03	9.25E-03	-8.93E-04
17	2.36E-02	2.36E-02					8.45E-03	
18	2.17E-02	2.17E-02	8.54E-03	1.04E-02			7.76E-03	-7.48E-04
19	2.00E-02	2.00E-02					7.15E-03	
20	1.85E-02	1.85E-02	7.29E-03		6.40E-03		6.63E-03	-6.38E-04
32						3.04E-03		

微分方程式の数値解法

惑星の運動 – 解析解

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = -G\frac{mM}{r^2}\frac{\mathbf{r}}{r}$$

$mr^2\frac{d\theta}{dt} = l$　lは定数、角運動量保存の法則

$$\frac{1}{2}m\left(\frac{dr}{dt}\right)^2 + m\left(\frac{l^2}{2m^2r^2} - \frac{GM}{r}\right) = E$$

$$r(\theta) = \frac{b}{1+\varepsilon\cos(\theta-\delta)}$$

$$b = \frac{l^2}{mc}$$

$$\varepsilon = \sqrt{1+2El^2/mc^2}$$

楕円方程式

軌道長半径　$a' = 2b/(1-\varepsilon^2)$

軌道短半径　$b' = 2b/\sqrt{1-\varepsilon^2}$

離心率＝焦点間の距離/長径　$\varepsilon = \sqrt{1+2El^2/mc^2}$

近点距離　$q=a'(1-e)=b/(1+\varepsilon)$

遠点距離　$Q=a'(1+e)=b/(1-\varepsilon)$

周期　$T = 2\pi\sqrt{ma^3/c}$

方程式の規格化(無次元化)

$$m\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = -G\frac{mM}{r^2}\frac{\mathbf{r}}{r}$$

$$t = \tau_0 T$$

$$r = l_0 R$$

τ_0, l_0は系に特徴的な時間と長さ
T, Rが1.0に近い値になるように選ぶとよい

惑星シミュレーションでの例:

τ_0 = 公転周期あるいは自転周期
l_0 = 公転半径あるいは1天文単位

分子動力学での例:

τ_0 = 時間ステップ
l_0 = Bohr半径(原子単位)

$$m\frac{l_0}{\tau_0^{\ 2}}\frac{d^2\mathbf{R}}{dT^2} = -G\frac{1}{l_0^{\ 2}}\frac{mM}{R^2}\frac{\mathbf{R}}{R}$$

$$\frac{d^2\mathbf{R}}{dT^2} = -G'\frac{mM}{R^2}\frac{\mathbf{R}}{R}$$

$$G' = \frac{G\tau_0^{\ 2}}{l_0^{\ 3}}$$

一階微分方程式の数値解法: Euler法

$$\frac{dx}{dt} = f\left(x, t\right)$$

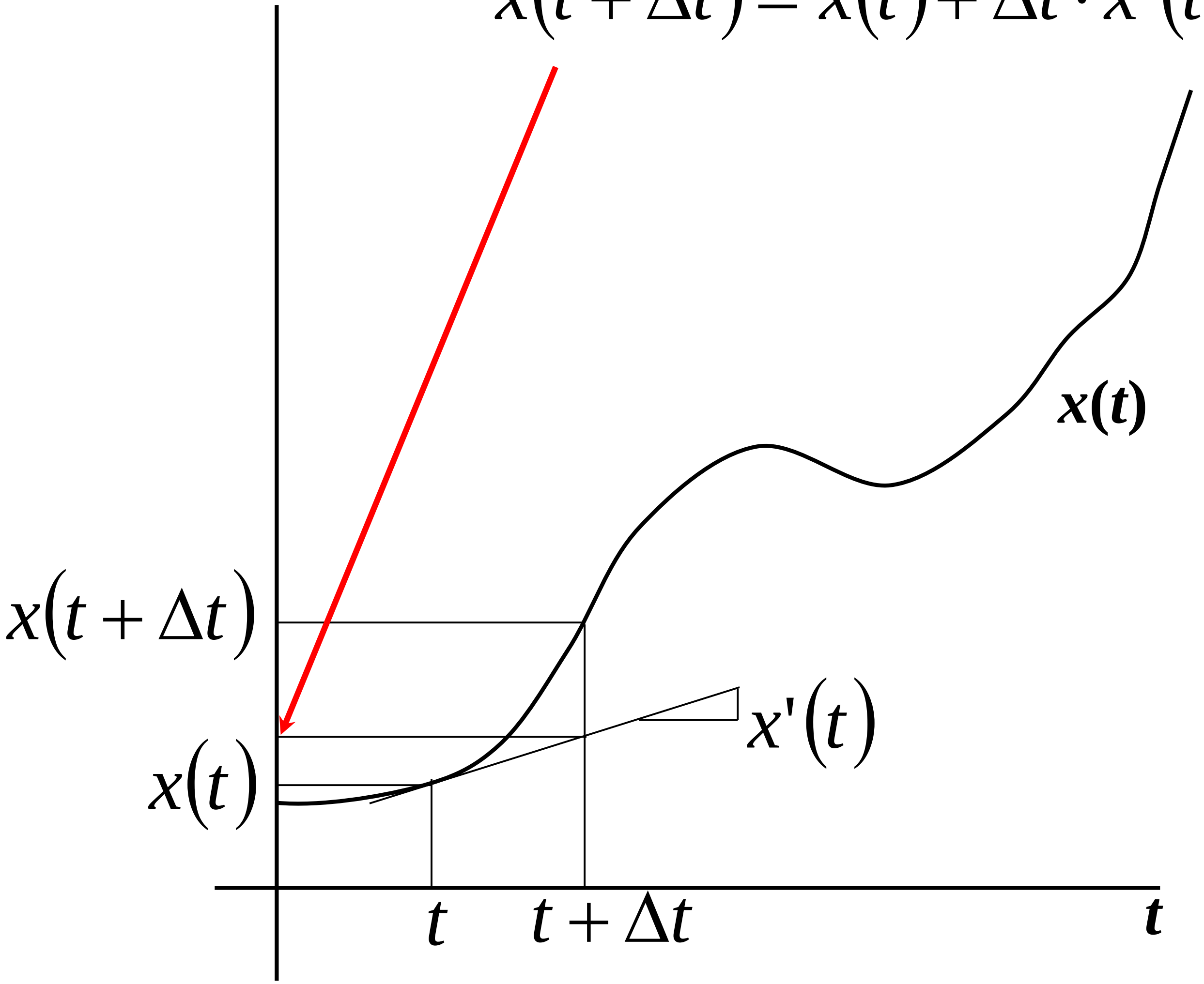
$$\frac{x\left(t+\Delta t\right) - x\left(t\right)}{\Delta t} = f\left(t, x\left(t\right)\right)$$

$$x\left(t+\Delta t\right) = x\left(t\right) + \Delta t \cdot f\left(t, x\left(t\right)\right)$$

- 精度が悪い
- t, $t+\Delta t$ に対して対称ではない

Euler法のイメージ

$$x(t+\Delta t) = x(t) + \Delta t \cdot x'(t)$$



一階微分方程式の数値解法: Heun(ホイン)法

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x)$$

・*t*, *t*+Δ*t* のEuler法を平均する

$$x(t+\Delta t) = x(t) + \frac{1}{2}\Delta t\left[f(t) + f(t+\Delta t)\right]$$

問題: *t*+Δ*t* の解はわかっていないはず

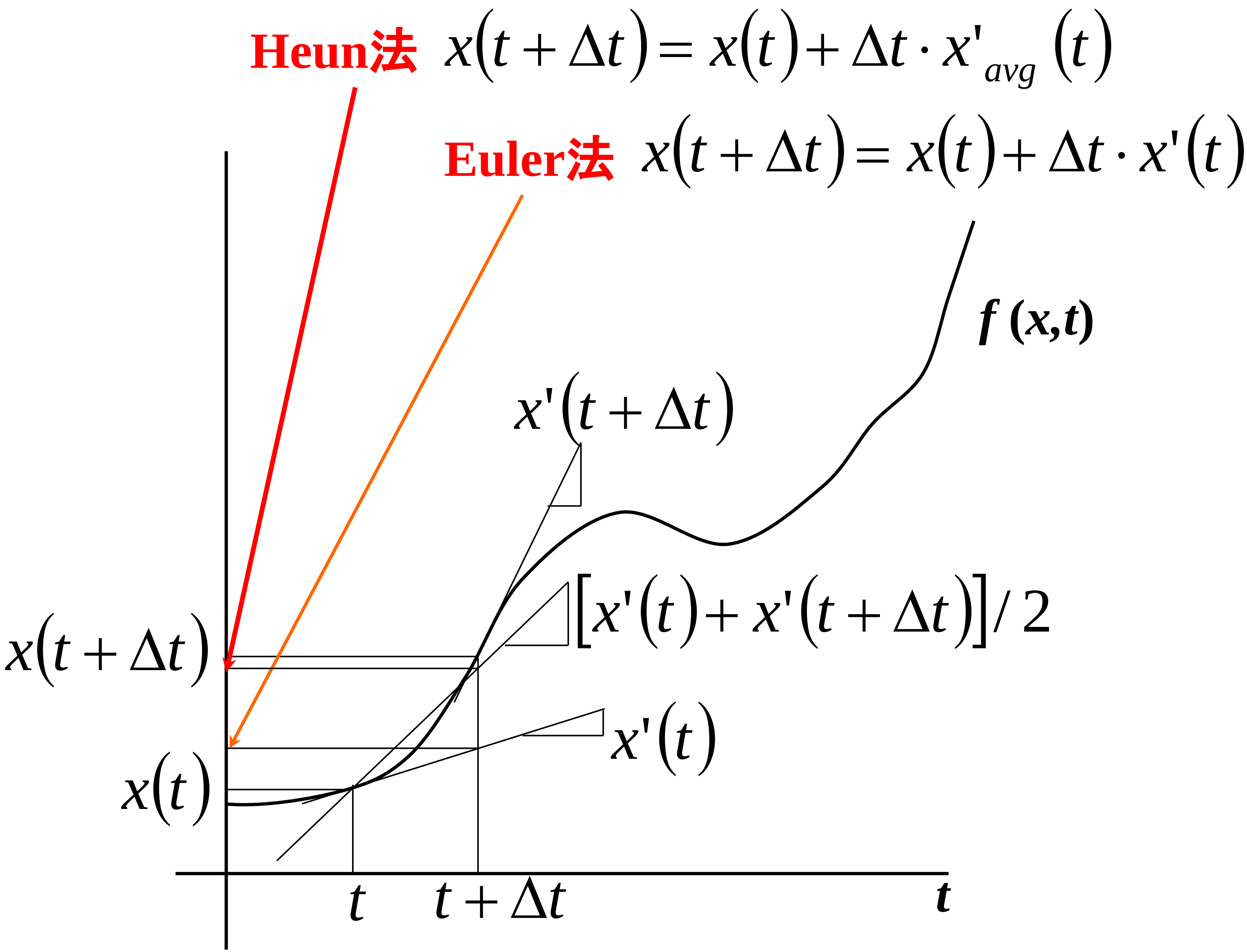
=> Euler法の *t*+Δ*t* の解を利用

$$k_1 = \Delta t \cdot f\left(t, x(t)\right)$$

$$k_2 = \Delta t \cdot f\left(t+\Delta t, x(t)+k_1\right)$$

$$x(t+\Delta t) = x(t) + \frac{k_1 + k_2}{2}$$

x'の平均をとって精度を上げる(Heun法)



一階微分方程式の数値解法: Simpson法

$$\int_{x_0}^{x_2} g(x')dx' \sim \frac{1}{3}h\left[g(x_0)+4g(x_1)+g(x_2)\right]= f(x_2)-f(x_0)$$

$$\frac{df(x)}{dx}=g(x)$$ の解

$$\frac{dx}{dt}=f\left(t,x\right)$$

$$x(t+2\Delta t)=x(t)+\frac{1}{3}\Delta t\left[f(t)+4f(t+\Delta t)+f(t+2\Delta t)\right]$$

3段3次のRunge-kutta公式

$$x(t+\Delta t) = x(t) + \frac{k_1 + 4k_2 + k_3}{6} + O(h^4)$$

$$k_1 = \Delta t \cdot f(t, x)$$

$$k_2 = \Delta t \cdot f(t + \Delta t / 2, x + k_1 / 2)$$

$$k_3 = \Delta t \cdot f(t + \Delta t, x + 2k_2 - k_1)$$

同じ精度で違う取り方もできる

$$k^* = \Delta t \cdot f(t + \Delta t / 4, x + \Delta x / 4)$$

$$k_1 = \Delta t \cdot f(t, x)$$

$$k_2 = \Delta t \cdot f(t + \Delta t / 2, x + k^* / 2)$$

$$k_3 = \Delta t \cdot f(t + \Delta t, x + k_2)$$

微分方程式の数値解法: Runge-kutta法

$$\frac{dx}{dt} = f\left(t, x\right)$$

$$x\left(t+\Delta t\right) = x\left(t\right) + \frac{dx}{dt}\Delta t + \frac{1}{2!}\frac{d^2x}{dt^2}\Delta t^2 + \frac{1}{3!}\frac{d^3x}{dt^3}\Delta t^3 + \cdots$$

$$x\left(t+\Delta t\right) = x\left(t\right) + \mu_1 k_1 + \mu_2 k_2 + \mu_3 k_3 + \cdots$$

$$k_1 = \Delta t \cdot f\left(t, x\right)$$

$$k_2 = \Delta t \cdot f\left(t + \alpha_1 \Delta t, x + \beta_1 k_1\right)$$

$$k_3 = \Delta t \cdot f\left(t + \alpha_2 \Delta t, x + \beta_2 k_1 + \beta_3 k_2\right)$$

誤差が最小になるようにする。

k_iの数n => n段公式

$O(\Delta t^p) = 0$となる公式をp次公式という。

$$k_1 = \Delta t \cdot f\left(t, x\right)$$

$$k_2 = \Delta t \cdot f\left(t + \Delta t/2, x + k_1/2\right)$$

$$k_3 = \Delta t \cdot f\left(t + \Delta t/2, x + k_2/2\right)$$

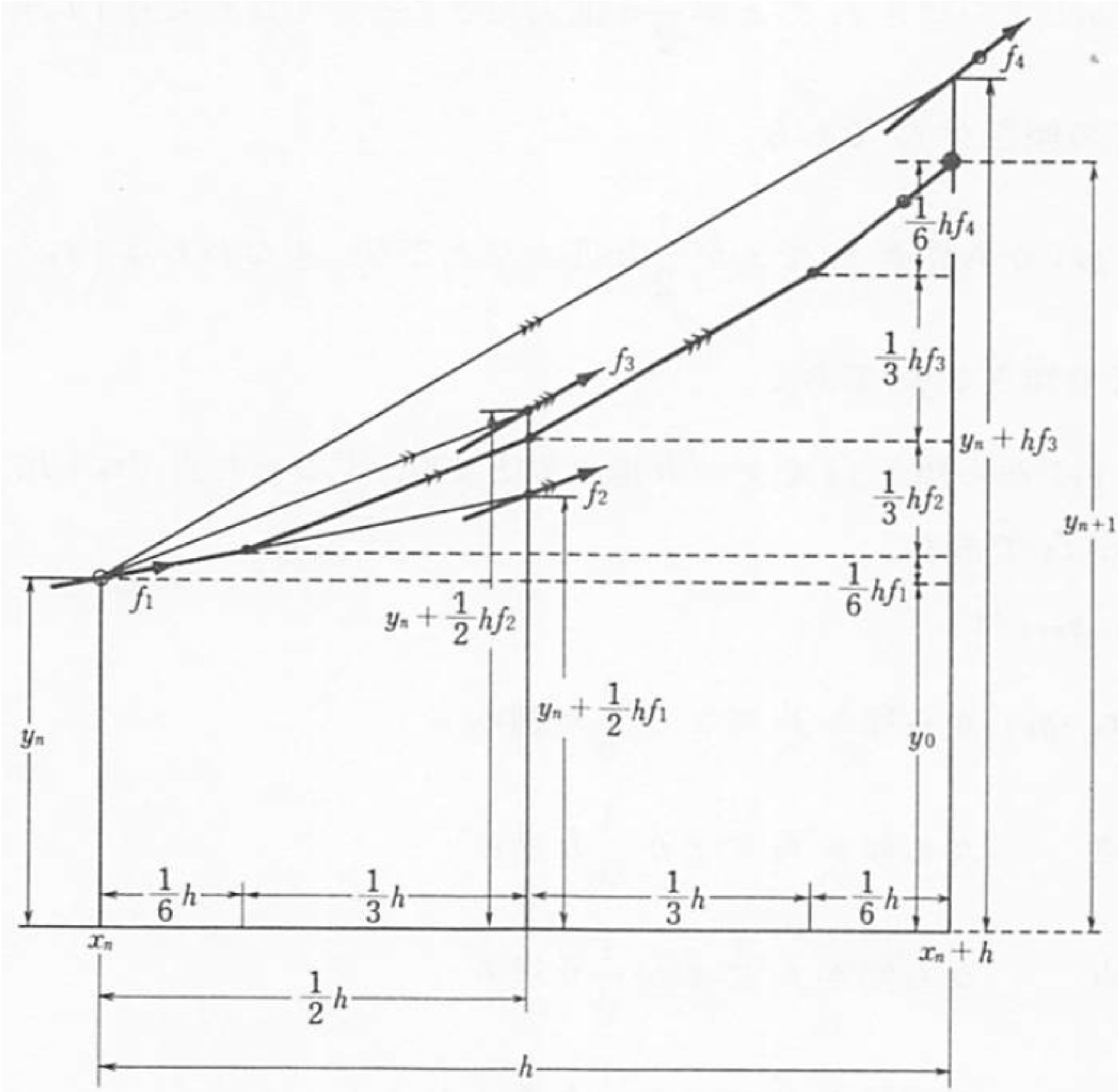
$$k_4 = \Delta t \cdot f\left(t + \Delta t, x + k_3\right)$$

4段4次のRunge-kutta公式

$$x\left(t+\Delta t\right) = x\left(t\right) + \frac{1}{6}k_1 + \frac{1}{3}k_2 + \frac{1}{3}k_3 + \frac{1}{6}k_4$$

微分方程式の数値解法: Runge-kutta法

戸田英雄, 小野令美，入門 数値計算, オーム社 (昭和58年)



分子動力学法: 二階微分方程式の数値解法

$$\frac{d^2\mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i / m_i$$

・二階微分方程式の場合、一階微分方程式に分解するのが良い

$$\frac{d^2x}{dt^2} = f(t, x, v)$$

$$\frac{dv}{dt} = f(t, x, v) \qquad \frac{dx}{dt} = v$$

Euler法

$$v(t+\Delta t) = v(t) + \Delta t \cdot f(t, x(t), v(t))$$

$$x(t+\Delta t) = x(t) + \Delta t \cdot v(t)$$

二階微分方程式の数値解法: Heun法

$$\frac{d^2x}{dt^2} = f\left(t, x, v\right)$$

$$\frac{dv}{dt} = f\left(t, x, v\right) \qquad \frac{dx}{dt} = v(t, x, v)$$

$$k_1 = \Delta t \cdot f\left(t, v\left(t\right)\right)$$

$$k_1' = \Delta t \cdot v\left(t\right)$$

$$k_2 = \Delta t \cdot f\left(t + \Delta t, x(t) + k_1', v\left(t\right) + k_1\right)$$

$$k_2' = \Delta t \cdot v\left(t + \Delta t, x(t) + k_1', v(t) + k_1\right)$$

$$v\left(t + \Delta t\right) = v\left(t\right) + \frac{1}{2}\left(k_1 + k_2\right)$$

$$x\left(t + \Delta t\right) = x\left(t\right) + \frac{1}{2}\left(k_1' + k_2'\right)$$

二階微分方程式の数値解法: Verlet (ベルレ)法

$$\frac{d^2x}{dt^2} = f\left(t, x, v\right)$$

$$\frac{d^2x(t+\Delta t)}{dt^2} \sim \frac{x(t+2\Delta t) - 2x(t+\Delta t) + x(t)}{\Delta t^2}$$

$$x(t+2\Delta t) = 2x(t+\Delta t) - x(t) + \Delta t^2 f\,(t+\Delta t)$$

$$x\left(t+\Delta t\right) = 2x\left(t\right) - x\left(t-\Delta t\right) + \Delta t^2 f\left(t, v\left(t\right)\right)$$

$$v\left(t\right) = \frac{1}{2\Delta t}\left\{x\left(t+\Delta t\right) - x\left(t-\Delta t\right)\right\}$$

- Euler法より精度が高い
- 二階微分方程式を直接解ける

欠点 : 上式に $x(t)$ 同士の引き算が出るため、桁落ちが発生しやすい
f に v が入っている場合、上式の $v(t)$ では計算できない

velocity Verlet 法

$$\frac{d^2x}{dt^2} = f(t, x, v)$$

$$\frac{d^2x(t+\Delta t)}{dt^2} \sim \frac{x(t+2\Delta t) - 2x(t+\Delta t) + x(t)}{\Delta t^2}$$

$$x(t+2\Delta t) = 2x(t+\Delta t) - x(t) + \Delta t^2 f(t+\Delta t)$$

$$x(t+\Delta t) = 2x(t) - x(t-\Delta t) + \Delta t^2 f(t, v(t))$$

$$v(t+\Delta t) = v(t) + \frac{1}{2}\{f(t+\Delta t) + f(t)\}$$

・Verlet法よりも数値解の精度がでる

二階微分方程式の数値解法:
かえる跳び(Leap Flog)法

本質的にVerlet法と同じ。ただしVerlet法では、

$$x(t+\Delta t) = 2x(t) - x(t-\Delta t) + \Delta t^2 f(t, v(t))$$

に $x(t)$ 同士の引き算が出るため、桁落ちが発生しやすい

$$v(t+\Delta t) = v(t-\Delta t) + 2\Delta t \cdot f(t)$$

$$x(t+2\Delta t) = x(t) + 2\Delta t \cdot v(t+\Delta t)$$

として、桁落ちを少なく、精度を高められる。
ただし、求められる $x(t)$ と $v(t)$ が Δt だけずれる。

※Verlet法と等価であることの確認

上式で $v(t-\Delta t) = \dfrac{x(t) - x(t-\Delta t)}{\Delta t}$ としてみる

かえる跳び(Leap Flog)法とVerlet法

$$v(t+\Delta t) = v(t-\Delta t) + 2\Delta t \cdot f(t)$$

$$x(t+2\Delta t) = x(t) + 2\Delta t \cdot v(t+\Delta t)$$

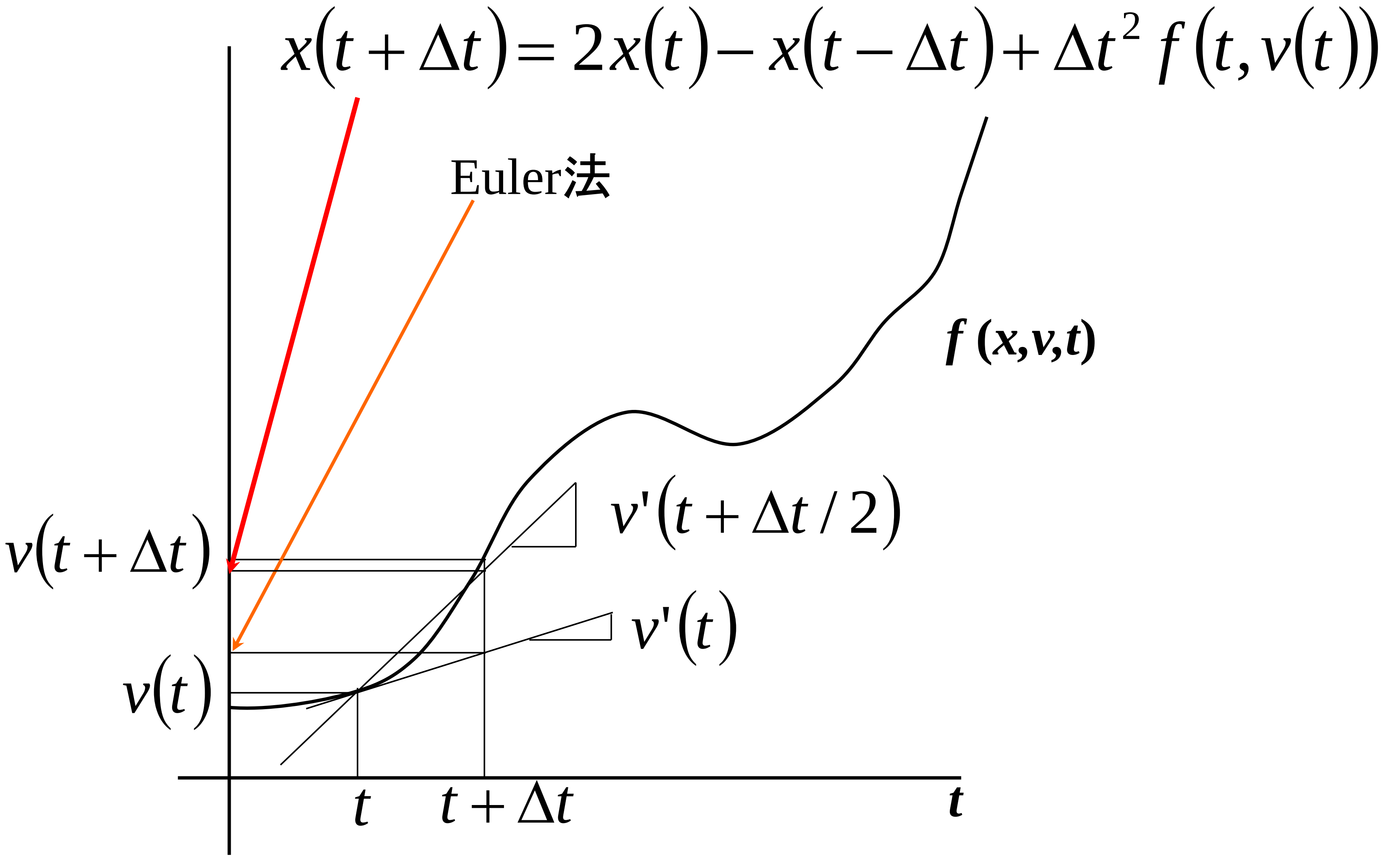
$$v(t-\Delta t) = \frac{x(t) - x(t-\Delta t)}{\Delta t}$$

$$\frac{x(t+\Delta t) - x(t)}{\Delta t} = \frac{x(t) - x(t-\Delta t)}{\Delta t} + 2\Delta t \cdot f(t)$$

$$x(t+\Delta t) = 2x(t) - x(t-\Delta t) + 2\Delta t \cdot f(t)$$

Verlet法

Verlet法, Leap Flog法のイメージ



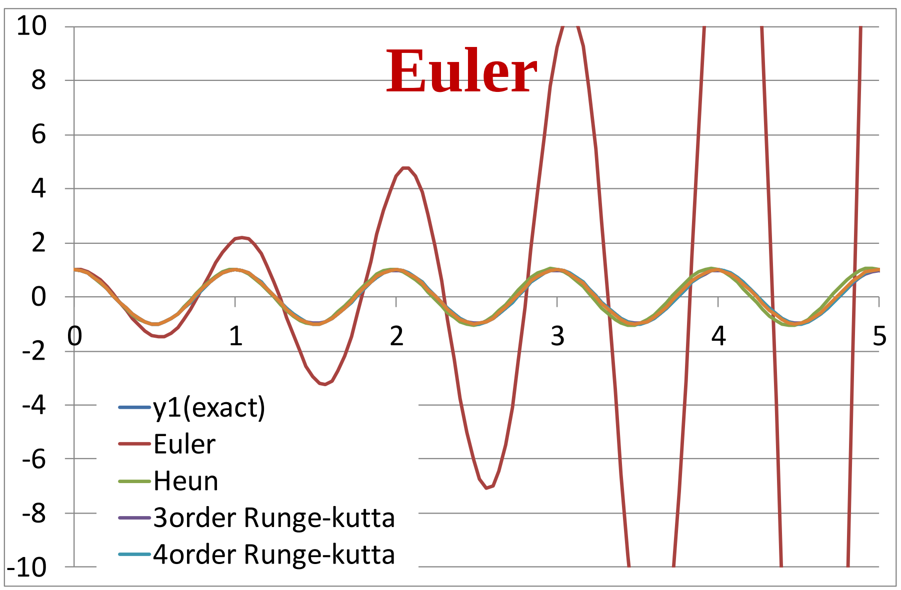
微分方程式の数値解の精度

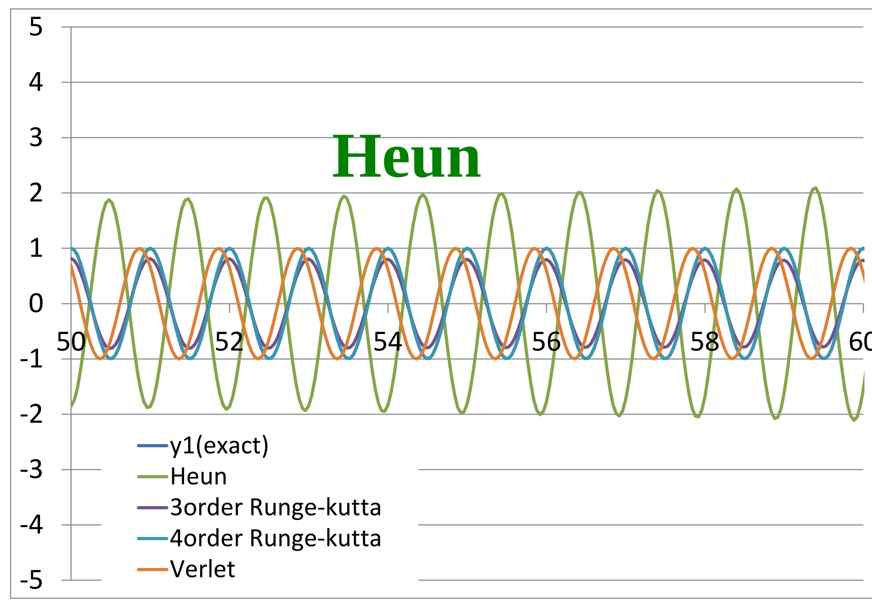
$$\frac{d^2x}{dt^2} = -4\pi^2 x \qquad \left(\frac{dx}{dt} = v, \ \frac{dv}{dt} = -4\pi^2 x \right)$$

厳密解 ($t = 0$: $x = 1.0$, $v = 0.0$)

$$x = \cos(2\pi t) \qquad v = -2\pi \sin(2\pi t)$$

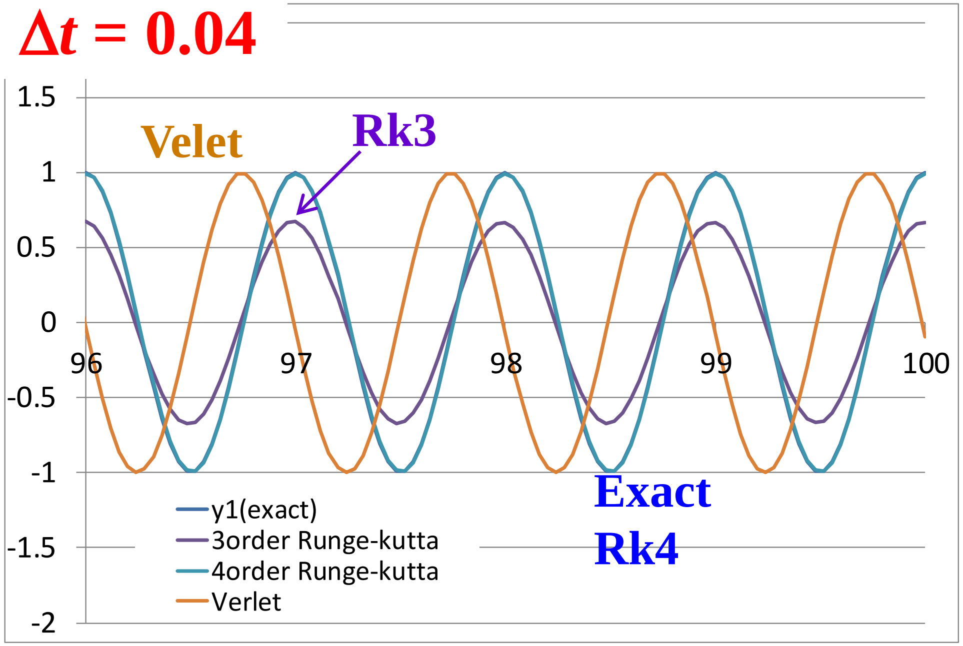
$\Delta t = 0.04$

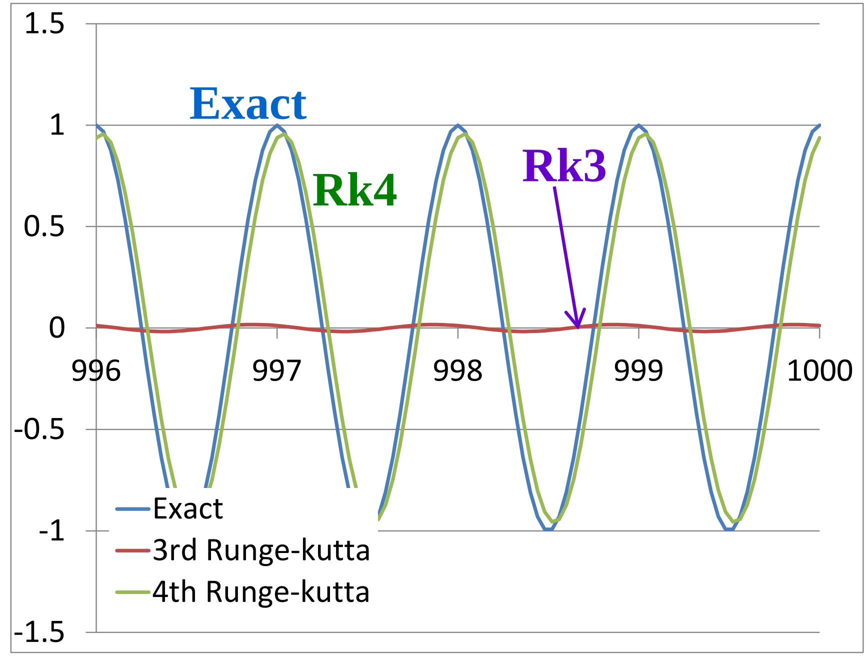




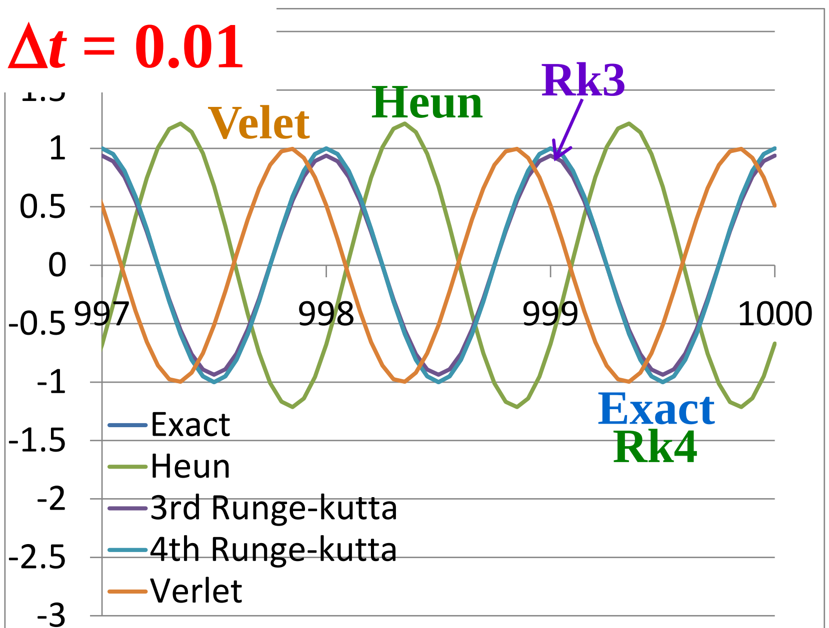
微分方程式の数値解の精度

Δt = 0.04



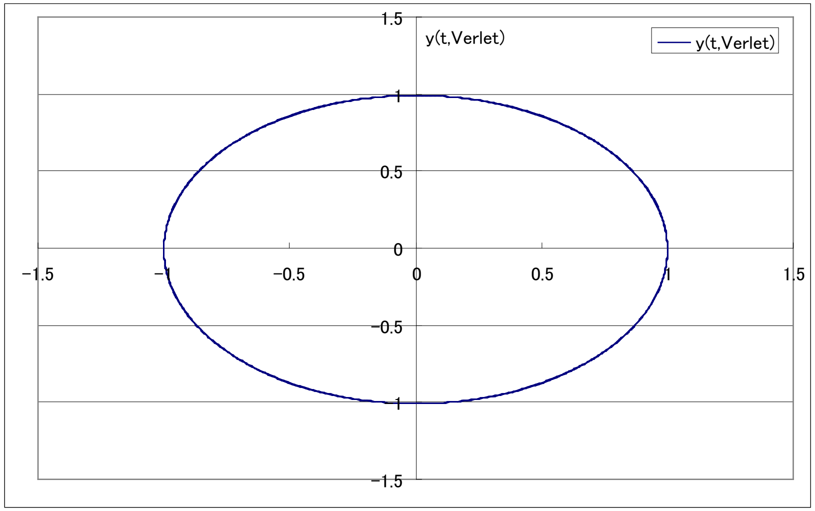


Δt = 0.01



惑星の運動 – 数値解

$\Delta t = 1$ day



$\Delta t = 10$days