第6章前半 pp.185—205

数値計算法　　演習問題 11

11.01　$dy/dx=y/(1+x)$ with $y(0)=1$ を解析的に解きなさい。

11.02　Euler法を説明しなさい。
$dy/dx=2y/(1+x)$ with $y(0)=0.5$ を解析的にまず解き、
Euler法で手計算で求めた値を比較し、その誤差を求めよ。

11.03　ホイン法を説明しなさい。
$dy/dx=2y/(1+x)$ with $y(0)=0.5$ をホイン法で手計算で求め、
その誤差が Euler 法と比較して縮小していることを確認せよ。

11.04　Runge-Kutta法とは？
実際にC-program を使て計算し誤差がどう縮小するか確認しよう。

11.05　合成関数の微分について説明せよ。

11.06　偏微分とは？

11.07　２次のTaylor展開とは？

11.08　拡散方程式とは？

11.09　粒子の保存則 (Continuity Equation)について説明せよ。

11.01 $dy/dx = y/(1+x)$ を解く。　　第6章 常微分方程式 pp.185〜205

$y=(C)(1+x)$ とすると、$\frac{dy}{dx}=C$ である。$\frac{dy}{dx}=\frac{y}{1+x}=C$ を満足する。

$x=x_0$ の時、$y=y_0$ なら、$y_0=(C)(1+x_0)$ より $C=\frac{y_0}{1+x_0}$　$y(x)=\left(\frac{y_0}{1+x_0}\right)(1+x)$ となる。

if $y=1$ when $x=0$.　$(y_0=1, x_0=0)$ より、$y(x)=(1+x)$ となる。(例題2 p.186)

11.02 Euler法で解く。

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx}=f(x,y) \\ y(x_0)=y_0 \end{cases}$$ とする。

① 適当に h の値を小さくとる。

② $i=0$ として、$x[i]=x_0$　$y[i]=y_0$ と置く。

③ $\begin{pmatrix} x[i+1]=x[i]+h \\ y[i+1]=y[i]+(h)f(x[i],y[i]) \end{pmatrix}$ を計算する。

④ $i=i+1$ として、step③をくりかえす!!

$\frac{dy}{dx}=\frac{2y}{1+x}$; $y(0)=0.5$ の時

$y(x)=(C)(1+x)^2$ が一般解で、

初期条件を満足する特別解は $y=\frac{1}{2}(1+x)^2$ となる。

x	0	0.5	1.0
y	0.5	1.125	2.0

← (真の値)

$\begin{pmatrix} x=0.5 \text{ の時 } y=\frac{1}{2}(1.5)^2=\frac{1}{2}\left(\frac{3}{2}\right)^2=\frac{9}{8}=1.125 \\ x=1 \text{ の時 } y=\frac{1}{2}(2)^2=2 \quad \text{のはず。} \end{pmatrix}$

$x[0]=0$　$y[0]=0.5$ として、　$x[1]=x[0]+0.5=0.5$　$y[1]=(0.5)+(0.5)(1)=1.0$

$f(x[0],y[0])=\frac{(2)y[0]}{1+x[0]}=1$　真の y の値 $y(0.5)=1.125$ だから、

誤差は $\Delta y=y[1]-y(0.5)=-0.125$ となる。

次に、$x[1]=0.5$, $y[1]=1.0$ として、　$x[2]=x[1]+0.5=1.0$　$y[2]=1+(0.5)\frac{4}{3}=\frac{5}{3}=1.67$

$f[x[1],y[1]]=\frac{(2)y[1]}{1+x[1]}=\frac{(2)(1)}{1.5}=\frac{4}{3}$;　$\Delta y=y[2]-y(1)=-0.33$ となる。

[誤差] がどんどん大きくなる…

11.03 ホイン法で解く。

for $i=1$ to n, $x[i]=x[i-1]+h$ とする。$x[0]=x_0$, $x[n]=x_n$ とする。

$f[i-1]=f(x[i-1],y[i-1])$ とする。　(Euler法で近似)　(p.193参照)

$y[i]=y[i-1]+\left(\frac{h}{2}\right)\{f[i-1]+f(x[i],\ y[i-1]+hf[i-1])\}$ とする!!

$\begin{pmatrix} k_1=(h)f[i-1]=(h)f(x[i-1],y[i-1]) \\ k_2=(h)f(x[i],\ y[i-1]+k_1) \end{pmatrix}$ とすると、$y[i]=y[i-1]+\frac{1}{2}(k_1+k_2)$ となる。

$\frac{dy}{dx}=\frac{2y}{1+x}$; $y(0)=0.5$ の時。(p.194 例題4)

$y(x)=\frac{1}{2}(1+x)^2$ となるが、$x=0.5$ の時、$y(0.5)=\frac{1}{2}\left(\frac{3}{2}\right)^2=\frac{9}{8}=1.125$ だったが、

Euler法では、$h=0.5$ の時、$x[1]=0.5$ の時、$y[1]=1.0$ で $\Delta x=-0.125$ だったが、

ホイン法では、　$k_1=(0.5)\frac{(2)(0.5)}{1+0}=0.5$　$k_2=(0.5)\frac{(2)(0.5+0.5)}{1+0.5}=\frac{2}{3}$

$y[1]=0.5+\frac{1}{2}\left(0.5+\frac{2}{3}\right)=0.5+\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+\frac{2}{3}\right)=0.5+\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{7}{6}\right)=\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{13}{6}\right)=\frac{13}{12}=1.083$

$\Delta y=y[1]-y(0.5)=1.083-1.125=-0.042$ となり 誤差が縮小した…

11.04 Runge-Kutta 法とは？

$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$; $y(x_0) = y_0$ を解くにあたり、まず、for $i = 1$ to n, $x[i] = x[i-1] + h$ とする。
$x[0] = x_0$; $y[0] = y_0$; $x[n] = x_n$; $y[n] = y_n$; $\left(k1 = f[i-1] = f(x[i-1], y[i-1]) \right)$ とする。

Euler 法では、$y[i] = y[i-1] + (h)(k1)$ とした。

ホイン法では、$y[i] = y[i-1] + \left(\frac{h}{2}\right)\{k1 + f(x[i], \underbrace{y[i-1] + h \cdot k1}_{})\}$ とした!!
（Euler 法での $y[i]$ である!!）

Runge-Kutta 法では……

$$y[i] = y[i-1] + \left(\frac{h}{6}\right)(k1 + 2k2 + 2k3 + k4) \text{ とする!!}$$

ここで

$$\boxed{\begin{aligned} k1 &= f[i-1] = f(x[i-1], y[i-1]) \\ k2 &= f\left(x[i-1] + \frac{h}{2}, y[i-1] + \frac{h}{2}k1\right) \\ k3 &= f\left(x[i-1] + \frac{h}{2}, y[i-1] + \frac{h}{2}k2\right) \\ k4 &= f(x[i], y[i-1] + h k3) \end{aligned}}$$

とする!!

$[x_0, x_n]$ の区間を大域区間と呼ぶ。
$[x_0, x_0 + h]$ などを局所区間と呼ぶ。

（この計算手順で実際に、C-Program を使って、解析解（真値）と数値計算値（近似値）の誤差を色々調べてみよう!! 刻み幅 h が $\frac{1}{2}$ 倍になると、誤差は、Euler 法では $\frac{1}{2}$ 倍、ホイン法では $\frac{1}{4}$ 倍、Runge-kutta 法では $\frac{1}{16}$ 倍となる!! この誤差を大域誤差という。）
局所誤差は、Euler 法では、$\frac{1}{4}$ 倍、ホイン法では $\frac{1}{16}$ 倍、Runge-kutta 法では $\frac{1}{32}$ 倍となる!!

11.05 合成関数の微分

$f(x) = A(x)B(x)$ の時、$\frac{df}{dx} = \frac{dA}{dx}B(x) + A(x)\frac{dB}{dx}$ として計算する。

$f(x) = A(B(x))$ の時は、$A(B)$ をまず B で微分して $\left(\frac{dA}{dB}\right)$ を求める。
次に、$B(x)$ を x で微分して $\left(\frac{dB}{dx}\right)$ を求める

$$\frac{df}{dx} = \left(\frac{dA}{dB}\right)\left(\frac{dB}{dx}\right) \text{ となる!!}$$

$f(x) = (x^2+1)^2$ の場合　$f(x) = A(B(x))$ $\begin{pmatrix} A(B) = B^2 \\ B(x) = x^2+1 \end{pmatrix}$ と書ける。

$\left(\frac{dA}{dB} = 2B \; ; \; \frac{dB}{dx} = 2x \; ; \right)$ より $\frac{df}{dx} = \left(\frac{dA}{dB}\right)\left(\frac{dB}{dx}\right) = (2B)(2x)$

$\frac{df}{dx} = (2)(x^2+1)(2x) = (4x)(x^2+1)$ となる。 p.199

$f(x) = (x+1)(x^2+1)^2$ の時。　$f(x) = A(x)B(x)$ $\begin{pmatrix} A(x) = x+1 \\ B(x) = (x^2+1)^2 \end{pmatrix}$ とする。

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{dA}{dx} \cdot B(x) + A(x)\frac{dB}{dx} = (1)(x^2+1)^2 + (x+1)(4x)(x^2+1)$$

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

$$\frac{df(x)}{dx} = (x^2+1)(5x^2+4x+1) \text{ となる。}$$

（p.199 例題7）

11.06 偏微分とは、

たとえば $f(x,y)=x^2+y^3$ の時、$\dfrac{\partial f}{\partial x}=2x$，$\dfrac{\partial f}{\partial y}=3y^2$ となる。 (p.201 参照)

一般に、$f(x)=g(A(x),B(x))$ の時、$\dfrac{df}{dx}=\dfrac{\partial g}{\partial A}\dfrac{dA}{dx}+\dfrac{\partial g}{\partial B}\dfrac{dB}{dx}$ となる。

11.07 2次の Taylor 展開法とは？ (Taylor 級数) $f(x)\approx f(x_0)+(x-x_0)\left.\dfrac{df}{dx}\right|_{x=x_0}+\dfrac{1}{2}(x-x_0)^2\left.\dfrac{d^2f}{dx^2}\right|_{x=x_0}$ に似ている。

$\dfrac{dy}{dx}=f(x,y)$；$y(x_0)=y_0$； の時、$x[0]=x_0$ $y[0]=y_0$ として、

$y[i+1]=y[i]+(h)f(x[i],y[i])+\left(\dfrac{h^2}{2}\right)f'(x[i],y[i])$ で近似する。

ここで $f'(x,y)=\dfrac{d}{dx}f(x,y)=\dfrac{\partial f}{\partial x}+\dfrac{\partial f}{\partial y}\dfrac{dy}{dx}=\left(\dfrac{\partial f}{\partial x}\right)+\left(\dfrac{\partial f}{\partial y}\right)f(x,y)$ となる。

$\dfrac{dy}{dx}=f(x,y)=\dfrac{2y}{1+x}$ の場合　$\dfrac{\partial f}{\partial x}=-\dfrac{2y}{(1+x)^2}$；$\dfrac{\partial f}{\partial y}=\dfrac{2}{1+x}$；

($y(0)=0.5$ として) $f'(x,y)=-\dfrac{2y}{(1+x)^2}+\left(\dfrac{2}{1+x}\right)\left(\dfrac{2y}{1+x}\right)=\dfrac{2y}{(1+x)^2}$ となる。

従って、$y[i+1]=y[i]+(2h)\left(\dfrac{y[i]}{1+x[i]}\right)+(h^2)\dfrac{y[i]}{(1+x[i])^2}$ となる。

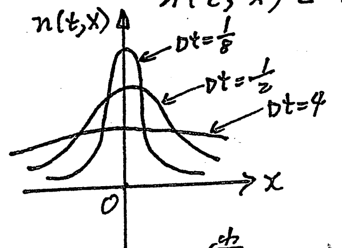
$i=0$ として、$x[0]=x_0=0$；$y[0]=y_0=0.5$，$h=0.5$ を代入して、$y[1]=1.125$ を得る。

これは、厳密解(真値) $y(0.5)=1.125$ と一致している!! (p.205)

11.08 拡散方程式とは？

濃度関数 $n(t,x)$ を求めたい。 $\dfrac{dn}{dt}=D\dfrac{d^2n}{dx^2}$；$D$=拡散係数

$n(t,x)=\dfrac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\exp\left[-\dfrac{x^2}{4Dt}\right]$ を1つの解として持っている!!



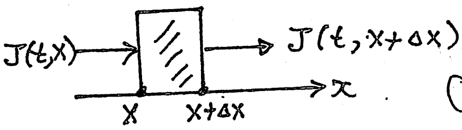
初期値(@$t=0$) 粒子が $x=0$ の点にすべて集中していたが、時間がたつにつれ、$x=\pm\infty$ に拡散していく様子を表わす分布関数である。大学入試の偏差値分布もこのような「ガウス分布」となる…

$\begin{cases} J=-D\dfrac{dn}{dx} \\ \dfrac{dn}{dt}=D\dfrac{d^2n}{dx^2} \end{cases}$ とする。

常に、$\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}n(t,x)\,dx=1$ となっている。

11.09 粒子の保存法則

区間 $[x,x+\Delta x]$ の区間にある粒子の数は $n(t,x)\Delta x$ とする。



(時間 Δt でこの区間に入る粒子の数) $=J(t,x)\Delta t$

(時間 Δt でこの区間から出る粒子の数) $=J(t,x+\Delta x)\Delta$

時間 Δt の間で、区間 $[x,x+\Delta x]$ にある粒子密度の変化分を $\Delta n(t,x)$ とする。

時間 Δt の間で、区間 $[x,x+\Delta x]$ にある粒子の変化分は、$(\Delta x)\cdot\Delta n(t,x)$ となる。

$(\Delta x)\Delta n(t,x)=J(t,x)\Delta t-J(t,x+\Delta x)\Delta t$

$\dfrac{\Delta n(t,x)}{\Delta t}=\dfrac{1}{\Delta x}[J(t,x)-J(t,x+\Delta x)]$ ⇒ $\boxed{\dfrac{dn}{dt}+\dfrac{dJ}{dx}=0}$