計算物理学II (第8回)

今回の内容

- 数値微分・数値積分
- 今回からはレポート問題の範囲ではありません。

数値微分

微分：極限をとる操作

$$f'(a) = \lim_{h\to 0} \frac{f(a+h) - f(a)}{h}$$

数値計算では極限は取れない(実数変数で表せる数の精度に限界がある)
有限の小さなhについて差分をとることで微係数を見積もるのが基本

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} + \mathcal{O}(h)$$

hのオーダーの項は無視

- この式だと誤差はh程度。hを小さくすれば精度は上がるが限界がある。
  (小さなhではf(a+h)とf(a)の値が近くなり桁落ちが発生。倍精度実数の精度の範囲内で同じになってしまう)
- 数値計算ではhの値は自由に変えられないことがある。

  例： f(x)の値は x= 0, 0.1, 0.2, 0.3, ... と0.1刻み(グリッド点)のxでの値しかわからないが
  x=0.5での微係数f'(0.5)を精度良く計算したい場合など

3点公式

$x=x_i$でのTaylor展開

$$f(x_i+h)=f(x_i)+f'(x_i)h+\frac{1}{2}f''(x_i)h^2+\frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)h^3+\mathcal{O}(h^4),$$
$$f(x_i-h)=f(x_i)-f'(x_i)h+\frac{1}{2}f''(x_i)h^2-\frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)h^3+\mathcal{O}(h^4),$$

$$f'(x_i)=\frac{-f(x_i-h)+f(x_i+h)}{2h}+\mathcal{O}(h^2)$$

x_iでの微分を計算するのに$f(x_i-h)$と$f(x_i+h)$を使うだけで
Taylor展開の次の次数のf''の項がキャンセルするため精度が上がる

5点・7点・9点公式は講義資料参照(同様にTaylor展開からhの高次項を消す)
9点公式では近傍の8点のxでの値を使うことで誤差を$O(h^8)$にまで小さくすることができる

高階微分

$x=x_i$でのTaylor展開

$$f(x_i+h)=f(x_i)+f'(x_i)h+\frac{1}{2}f''(x_i)h^2+\frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)h^3+\mathcal{O}(h^4),$$
$$f(x_i-h)=f(x_i)-f'(x_i)h+\frac{1}{2}f''(x_i)h^2-\frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)h^3+\mathcal{O}(h^4),$$

同様に$f'(x_i)$を消去して$f''(x_i)$に関する式を導出する(３点公式)

$$f''(x_i)=\frac{f(x_i-h)-2f(x_i)+f(x_i+h)}{h^2}+\mathcal{O}(h^2)$$

5点、7点、9点公式・・も高次項を消去することで導出できる(講義資料参照)

数値積分

積分も極限操作

$$\int_a^b f(x)dx = \lim_{h\to 0}\sum_{i=0}^{N-1} f(x_i)h \qquad x_i = a + ih$$

数値計算では有限のhについて積分を評価
積分は区間を分割できるのである程度小さな区間[x_i-h,x_i+h]を近似することを考える

$$\int_{a=x_0}^{b=x_N} dx = \int_{x_0}^{x_1} + \int_{x_1}^{x_2} + \cdots + \int_{x_{N-2}}^{x_{N-1}} + \int_{x_{N-1}}^{x_N} dx$$

$$\int_{x_{i-1}=x_i-h}^{x_{i+1}=x_i+h} f(x)dx$$

数値積分

被積分関数を積分区間の領域でTaylor展開

$$f(x_i+h) = f(x_i) + f'(x_i)h + \frac{1}{2}f''(x_i)h^2 + \frac{1}{3!}f^{(3)}(x_i)h^3 + \mathcal{O}(h^4)$$

最低次だけ取ると

$$\int_{x_i-h}^{x_i+h} f(x)dx = \int_{x_i-h}^{x_i+h} [f(x_i) + \mathcal{O}(h)]dx = 2f(x_i)h + \mathcal{O}(h^2)$$

高さf(x_i)、幅2hの短冊で積分を近似。

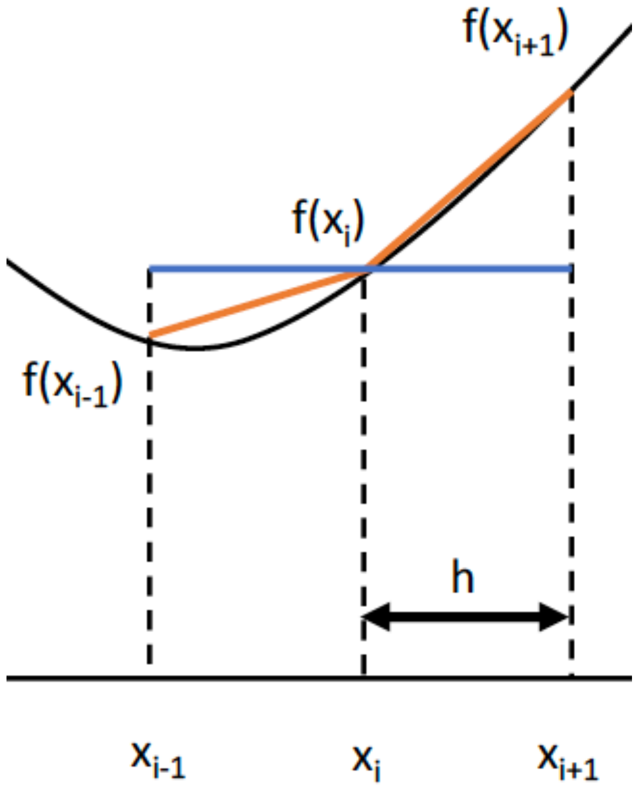
$$\begin{aligned}\int_{x_0}^{x_N} f(x)dx &= \left(\int_{x_0}^{x_2} + \int_{x_2}^{x_4} + \cdots + \int_{x_{N-4}}^{x_{N-2}} + \int_{x_{N-2}}^{x_N}\right) f(x)dx \\ &= 2[f(x_1) + f(x_3) + \cdots + f(x_{N-3}) + f(x_{N-1})]h + \mathcal{O}(h)\end{aligned}$$

区分求積法

台形公式

Taylor展開の1次まで考慮(右図の赤い線)

$$f(x) = \begin{cases} f(x_i) + \dfrac{f(x_i) - f(x_i - h)}{h}(x - x_i) + \mathcal{O}(h^2) & (x_i - h \leq x \leq x_i) \\ f(x_i) + \dfrac{f(x_i + h) - f(x_i)}{h}(x - x_i) + \mathcal{O}(h^2) & (x_i \leq x \leq x_i + h) \end{cases}$$



２つの台形で近似することになるため

$$\int_{x_i - h}^{x_i + h} f(x)dx = \frac{h}{2}[f(x_{i-1}) + 2f(x_i) + f(x_{i+1})] + \mathcal{O}(h^3)$$

全区間を足し上げると

$$\int_{x_0}^{x_N} f(x)dx = h\left[\frac{1}{2}f(x_0) + f(x_1) + f(x_2) + \cdots + f(x_{N-2}) + f(x_{N-1}) + \frac{1}{2}f(x_N)\right] + \mathcal{O}(h^2)$$

区分求積法とほぼ同じだが両端で1/2の因子をかけるだけで精度が向上する

Simpsonの公式

Taylor展開の2次の項まで取り入れる

$$f(x_i+h)=f(x_i)+f'(x_i)h+\frac{1}{2}f''(x_i)h^2+\mathcal{O}(h^3)$$

$$\begin{aligned}\int_{x_i-h}^{x_i+h} f(x)dx &= \int_{x_i-h}^{x_i+h}\left[f(x_i)+f'(x_i)(x-x_i)+\frac{1}{2}f''(x_i)(x-x_i)^2+\mathcal{O}(h^3)\right]dx \\ &= 2hf(x_i)+\frac{1}{3}f''(x_i)h^2+\mathcal{O}(h^5) \\ &= \frac{h}{3}[f(x_{i-1})+4f(x_i)+f(x_{i+1})]+\mathcal{O}(h^5)\end{aligned}$$

$f^{(3)}(x_i)$は効かない(奇関数)ので
台形公式よりh^2精度が向上

$f''(x_i)$は3点公式で近似

足し合わせると (Nは偶数)

$$\int_{x_0}^{x_N} f(x)dx=\frac{h}{3}[f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+\cdots+2f(x_{N-2})+4f(x_{N-1})+f(x_N)]+\mathcal{O}(h^4)$$

Taylor展開の3次・4次項まで入れた公式はSimpsonの3/8公式、Booleの公式(講義資料参照)

Gauss求積法

- 座標点が等間隔の場合→台形・Simpson公式など
- 座標点を自由に設定できる場合→Gauss求積法のほうが少ない点数で精度が出る

Gauss-Legendre求積法

ゼロ点(abscissa)：x_iはLegendre多項式$P_n(x_i)$=0となるゼロ点
重み(weight)：w_i

$$w_i = \frac{2}{(1 - x_i^2)[P_n'(x_i)]^2}$$

区間[-1,1]の積分はゼロ点と重みを使って近似できる (変数変換で区間の変更も可能)

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$

x_i, w_iは自分で計算も可能だが教科書の表やインターネット上を検索すれば様々なnでの値が利用可能

積分区間が有限ではない場合は
Gauss-Laguerre求積法([0,∞))やGauss-Hermite求積法((-∞,∞))を使うことができる