2020.2.13

# 2019年度「計算科学特論」最終課題資料

## 今日のテーマ:

講義で学習した微分方程式の数値解法について、その内容の理解について確認する課題を実施する。差分法・有限要素法・スペクトル法の数値計算プログラムを使って計算法の特徴を知る。

講義と演習で学んだ数値計算法に関する課題に取り組みます。

今日の予定

1. レポート課題解説
2. サンプルプログラムの改造方法解説
3. 誤差の評価方法の説明

全て、これまでの演習で利用したサンプルプログラムを元にします。

今日の課題

- 3つの計算法のサンプルプログラムを実行し、動作確認をしてください。
- 3つの計算法に同じ境界値条件を与えて結果を確認してください。
- 3つの計算法で離散化要素数を変更する方法を確認してください。
  ここでは、次の数をそれぞれの計算方法の離散化要素数とします。
  - 差分法:　格子点数
  - 有限要素法: 有限要素数
  - 代用電荷法: 電荷点・拘束点数

  ※それぞれの離散化要素数が、解法の過程で解く連立方程式の変数の数に対応することを確認してください。
- 数値計算結果と厳密解の差を計算し、最大値等で評価する方法を考え、プログラムに実装してください。
- 円形の境界を持つ問題への対応方法を考えてください。

2018 年度「計算科学特論」レポート課題について

提出期限：2020 年 2 月 17 日（月）
※ 2 月 17 日に提出できない場合は、同日中に最終的な提出予定日を申し出てください。

提出方法：電子メール　　　宛先： okano@cs.ehime-u.ac.jp
※ 下記の手順と提出規則にしたがって提出してください。

1. 提出予定の通知

   最終回授業日の 2 月 13 日に提出予定日を申請してください。

   この日に課題を提出してしまっても構いません。これ以降になる場合は、口頭で予定をお申し出いただくか、以下の形式で電子メールで通知してください。提出の予定は変更しても構いませんが、最終変更期限は 2 月 17 日です。
   通知の際のメールについて、

   - 提出時と同じ From: ヘッダを持つようにしてください。
   - Subject: ヘッダは 学生証番号+「計算科学特論レポート」で始めてください。
   - From: ヘッダもしくは Reply-to: ヘッダに返信を受けとれるメールアドレスを指定してください。
   - ↓2 番以降の「レポート提出時の電子メール」とは区別してください。

2. レポート提出時の電子メール本文

   本文には以下の項目を示し、レポートの内容等の評価対象にしなければならないことは書かないでください。

   - 提出者の氏名、所属
   - 添付ファイルのファイル名とそれぞれの内容説明

3. レポート提出時の添付ファイル

   以下のファイルを個別に添付してください。少なくとも 2 本のファイルが必要になるはずです。

   - レポート本文

     PDF 形式にしてください。必須課題、選択課題に関する全ての内容を 1 つのファイルにまとめてください。
     必要の無い限りプログラムリスト全体を提示しないでください。読み易く体裁を整えてください。適切にグラフや図を用いてください。

レポート中にも氏名・学生証番号・何のレポートか判るような情報を提示してください。(表紙をつけるという方法でも構いません。)

- ソースプログラム

  何かしらサンプルプログラムを修正する必要があるはずですので、修正後のプログラムを添付してください。プログラムは tar と gz を使って 1 つのファイルにまとめて添付してください。

  1 本または複数のファイルが他の提出者と同一になる場合はそのことについて、レポートまたは提出時の電子メール本文に示した添付ファイルに関する説明で注記してください。

# レポート課題

## 必須課題２件

全員が提出してください。

1. 差分法、有限要素法、スペクトル法について、それぞれの計算法の特徴を他の方法との違いが判るように A4 半ページから A4 １ページまでの分量で説明してください。

   スペクトル法全般について述べるのが難しければ授業および演習中に説明した範囲の代用電荷法について述べるのでも十分です。

2. １で説明した３つの方法を同じ問題に適用し、その結果を図示し、説明してください。１で述べた特徴と差異を示す数値計算例となるように計画して、結果を比較して説明してください。

## 選択課題１件以上

以下の選択肢のなかから１つ以上について提出してください。

1. ３つの計算法のうち１つ以上の方法について離散化要素数と最大誤差等の近似精度の指標との関係を調べてグラフを示して説明する。
   複数の計算法について示した場合は差異を述べると良い。

2. 差分法・有限要素法を円形の境界を持つ Laplace 方程式の境界値問題に適用する方法を考え、実際に数値計算を実行した結果を示す。

3. 代用電荷法を長方形領域の Laplace 方程式の境界値問題に適用した場合に、電荷点・拘束点の配置がどのような影響を与えるか、数値実験を利用して調べる。

   境界拡大法よりも良い方法を見つけて説明してください。

4. ３つの方法のいずれか、あるいは複数を熱伝導方程式の境界値問題に適用して、数値実験を行い、結果について、説明をしてください。

   とくに、結果がどの程度正しいかを議論するための方法について考え、考察を示してください。

# 補足（ヒント）

必須課題 1 は各自で調べてください。

必須課題 2 について、実施のヒントになりそうな補足をします。課題の内容は以下の 3 点なので、それぞれについて述べます。

1. 3 つの方法を同じ問題に適用する。
2. 計算結果を図示する。
3. 計算結果を考察し説明する。

## 1、3 つの方法を同じ問題に適用する。

3 つの方法のサンプルプログラム diff.sci（差分法）、fem.sci（有限要素法）、csm.sci（代用電荷法）の境界条件を設定している箇所について説明します。

diff.sci（差分法）の関連箇所

```
function w=u(z)
//u 厳密解
//z 引数
//w 関数値
w = real(z).*imag(z); // z が行列で与えられた場合も考慮
w = imag(z);
endfunction
function w=uu(j, k, h, l)
//uu 格子点上の厳密解
//j,k 格子点番号（j が実軸方向、k が虚軸方向）
//h,l 格子間隔（h が実軸方向、l が虚軸方向）
//w 関数値
w = u((j-1)*h+%i*(k-1)*l)
endfunction
```

diff.sci では 2 つの関数 u(), uu()を介して境界条件を設定しています。

微分方程式の境界条件を反映しているのは u()の方です。uu()は格子点番号と座標の変換をするための関数で、これはサンプルプログラムが本質的には座標と格子点との対応情報を持たないので必要になります。

uu()の方から見ると、(j,k)番の格子点に対して

$(j-1)\times h+\mathrm{i}(k-1)\times l$

の複素座標値を引数として u()を呼び出しています。これは問題設定として(0,0)-(1,1)を対角線の端点に置いた正方形の領域に対して設定された格子間隔 h と l のパラメタにもとづいているので、格子点配置や問題の領域を変更しない限りはこのままで使うことになります。

u()の引数に与えられているのは複素座標なので、これをもとに u()の方を見れば良いことになります。

サンプルプログラムでは u()は本質的には 2 行、正確には 2 行目が 1 行目の結果を上書きしてしまうので 1 行の式でしかありません。引数は複素座標なので$z=x+\mathrm{i}y$と考えれば、

`w = real(z).*imag(z);` は $x\times y$ を、
`w = imag(z);` は $y$ を、
与えるものと考えられます。

どちらもラプラス作用素を左からかければ調和関数であることが判りますので、これを厳密解として想定した問題を解いていることになります。

fem.sci（有限要素法）の関連箇所

```
function r=Bfunc(z);
//if imag(z) == 0;
//   r = real(z)*(1-real(z));
//else
//   r = 0;
//end
r = real(z).*imag(z);
//r = real(z)+imag(z);
endfunction
```

サンプルプログラムはコメントアウトされた 2 通りを含む 3 通りの厳密解について例示しています。まず最初のコメントアウトされた箇所

```
if imag(z) == 0;
  r = real(z)*(1-real(z));
else
  r = 0;
end
```

は複素座標で与えられた虚部が 0 の場合、すなわち(0,0)-(1,1)を対角線端点とする正方形領域であれば(0,0)-(1,0)の辺の部分における値とそれ以外とで区別されています。虚部が

０の辺では、`real(z)*(1-real(z))`が返値となるので、$z = x + \mathrm{i}y$と考えれば、この辺においてて$x(1-x)$を値とする境界条件が与えられることになります。それ以外の辺および点ではつねに０になりますが、これは境界条件を定める関数として呼び出されるものなので、１辺を除いて他の境界ではつねに０の値をとる境界条件と考えられます。

残りの部分は厳密解をそれぞれ与えたものになります。これらも同様に$z = x + \mathrm{i}y$と考えれば、コメントアウトされていない　`r = real(z).*imag(z);`　は　$x \times y$　を
コメントアウトされている　`r = real(z)+imag(z);`　は　$x + y$　を
与えるものと考えられます。

両者とも調和関数になります。

csm.sci（代用電荷法）

```
function w=Bfunc(z)
//Bfunc 境界値関数
//z 引数(複素平面座標)
//w 境界値
//w = zeros(z);
//// z の実部が 0 の成分だけを再計算
//w(real(z)==0) = imag(z(real(z)==0)).*(1-imag(z(real(z)==0)));
w = real(z).*imag(z);
//w = real(z)+imag(z);
endfunction
```

これも有限要素法の場合とほぼ同様です。3 通りの条件の例示となっており、コメントアウトされた最初の部分が 1 辺だけ（実部=0）が$y \times (1-y)$で、残りの辺は 0 となる境界条件に対応し、残りの 2 通りがそれぞれ厳密解として$x \times y$と$x + y$を考えた場合になっています。

## 2、計算結果を図示する。

標準のカラーマップは強度に対応していないように見えるので、せめてこれは変更してください。具体的なことは help colormap とするかヘルプブラウザで colormap を検索すれば分かります。

## 3、計算結果を考察し説明する。

必須課題の要請は、３つの方法の特長を計算結果から述べることです。いずれかの結果を改善したり数値的な評価を与えることが目的ではありません。（それは選択課題の内容に対応します。）

問題領域や境界条件の変更は自由にしていただくのが良いと思いますが、一番簡単なのは、サンプルプログラムをできるだけそのまま使うことでしょう。

問題領域には(0,0)-(1,1)を対角線端点とする正方形領域を用いることにして、縦横（実軸・虚軸方向）の分割数を変更して（代用電荷法については辺に沿って配置する電荷点・拘束点の数を変更して）結果がどのように変わるかを調べ、そのことについて述べるのが簡単ではないでしょうか。

1の「3つの方法を同じ問題に適用する」という部分で述べたように同じ境界条件を課す、あるいは同じ厳密解に対応する境界条件を与えるようにサンプルプログラムを改変して、分割数を変更することが必要になります。

具体的には、各サンプルプログラムの以下の箇所を変更することになります。

diff.sci

```
//各パラメタの設定
m=30; H=1; h=H/m; //実軸方向の分割数、辺の長さ、格子間隔
n=30; L=1; l=L/n; //虚軸方向の分割数、辺の長さ、格子間隔
```

fem.sci

```
// メインルーチン
[v,bv,uv,fe,np] = SetupSquare(0,1+%i,12,12);
```

csm.sci

```
//メインルーチン
[x,y] = SetupSquare(0,1+%i,16,16);
```