

応用数学

山本有作¹

Oct. 18, 2004

¹名古屋大学 計算理工学専攻 杉原研究室

目次

第 1 章	数値計算における誤差	7
1.1	計算機における実数の表現	7
1.2	丸め誤差	8
1.2.1	丸めと丸め誤差	8
1.2.2	情報落ち	10
1.2.3	桁落ち	11
1.3	打ち切り誤差	14
1.3.1	打ち切り誤差 (truncation error)	14
1.3.2	打ち切り誤差の緩和	15
1.4	誤差の伝播	16
第 2 章	非線形方程式の解法	19
2.1	二分法	19
2.2	ニュートン法 (単根の場合)	21
2.3	ニュートン法 (重根の場合)	25
2.4	ニュートン法 (連立方程式の場合)	25
第 3 章	関数の補間	27
3.1	ラグランジュ補間	27
3.2	ニュートン補間	28
3.3	ラグランジュ補間の誤差	30
3.4	スプライン補間	31
第 4 章	数値積分法	33
4.1	台形公式	33
4.2	シンプソン公式	34
4.3	台形公式とシンプソン公式の誤差	36
4.4	二重指数型数値積分公式	38
第 5 章	数値微分法と加速法	43
5.1	差分近似による数値微分	43
5.2	数値微分における h の定め方	44
5.3	加速法の適用	46

第 6 章	常微分方程式の解法	49
6.1	オイラー法	49
6.2	ホイン法	50
6.3	高階常微分方程式と連立常微分方程式	51
第 7 章	偏微分方程式の解法 (I)	53
7.1	偏微分方程式の分類	53
7.2	陽的差分法	54
7.3	陰的差分法	58
7.4	クランク = ニコルソン法	59
第 8 章	偏微分方程式の解法 (II)	61
8.1	ポアソン方程式に対する差分法	61
8.2	差分法から生じる連立一次方程式の解法	62
第 9 章	連立一次方程式の解法	65
9.1	数値計算における連立一次方程式	65
9.2	係数行列の性質の分類	66
9.3	ガウスの消去法	67
9.3.1	アルゴリズム	68
9.3.2	計算量	69
9.3.3	ピボット選択	70
9.4	LU 分解	71
9.5	特別な係数行列に対するガウスの消去法	74
9.5.1	帯行列に対するガウスの消去法	75
9.5.2	対称行列に対するガウスの消去法	76

図 目 次

1.1	2進浮動小数点数の格納	8
1.2	もっとも近い浮動小数点数への丸め	10
1.3	微小な長方形の足し合わせによる積分の近似	14
1.4	微小な台形の足し合わせによる積分の近似	16
2.1	解から遠い初期値から出発したためにニュートン法が収束し ない例	24

第1章 数値計算における誤差

1.1 計算機における実数の表現

物理学の実験などでは、数字の有効桁を明示したい場合、

$$0.504 \times 10^3 \quad (= 504)$$

$$0.123 \times 10^{-1} \quad (= 0.0123)$$

のような書き方をすることがよくある。このように表現された数を（10進）浮動小数点数と呼ぶ。

計算機の中では、実数は2進浮動小数点数で表現される。2進浮動小数点数の一般形は

$$\pm(0.d_1d_2\cdots d_t) \times 2^n \quad (= \sum_{i=1}^t d_i 2^{-i} \times 2^n) \quad (1.1)$$

となる。ここで、 $d_1, d_2, \dots, d_t$ はそれぞれ 0 または 1 である。 $\pm$ を符号部、 $0.d_1d_2\cdots d_t$ を仮数部、 2^n を指数部と呼ぶ。通常、指数 n は小数点のすぐ右の数字 d_1 が 1 になるように決める。このときの表現を正規化表現と呼ぶ。たとえば、 0.001101×2^{-5} は正規化表現では 0.1101×2^{-7} となる。

2進浮動小数点数 (1.1) は、計算機の中で図 1.1 のように格納される。指数部の表現に k ビットを使う場合、ここで表現できる数は 2^k 通りとなる。したがって、指数の範囲を $L (< 0)$ から $U (> 0)$ までと決めた場合、 $U - L + 1 < 2^k$ ならば、この k ビットですべての指数が表現できる。また、仮数部の格納では、正規化表現で $d_1 = 1$ であることを用いて d_1 の格納を省略する（ケチ表現）。従って格納に必要なビット数は $t - 1$ ビットとなる。以上の約束の下では、表現できる絶対値最大の数値、絶対値最小の数値はそれぞれ

$$(0.111\cdots 1) \times 2^U = (1 - 2^{-t}) \times 2^U, \quad (1.2)$$

$$(0.100\cdots 0) \times 2^L = 2^{L-1} \quad (1.3)$$

となる。なお、0 は上記の約束の範囲では表せない（常に $d_1 = 1$ だから）ので、すべてのビットが 0 の場合は 0 を表すと特別に約束するのが普通である。この場合、指数の取りうる範囲 $U - L + 1$ は 2^k より小さくなる。

最近のパソコンでは、2進浮動小数点数の表現に IEEE 方式を使うのが普通である。IEEE 方式では、32 個のビットで 1 個の浮動小数点数を表す単精

表 1.1: IEEE 方式の 2 進浮動小数点数に関する各種パラメータ

項目	単精度型	倍精度型
全ビット数	32	64
指数部ビット数	8	11
仮数部ビット数	23 ($t = 24$)	52 ($t = 53$)
L	-125	-1021
U	128	1024
絶対値最大の数	3.4×10^{38}	1.8×10^{308}
絶対値最小の数	1.2×10^{-38}	2.2×10^{-308}

度型と 64 個のビットで 1 個の浮動小数点数を表す倍精度型とがある。それぞれについて、各部のビット数、 L 、 U 、表現できる絶対値最大・最小の数は表 1.1 のようになっている。

浮動小数点数に対して計算機内で演算を行った場合、結果の絶対値が表現できる最大の数より大きくなることがある。たとえば、非常に大きい数どうしの掛け算を行った場合、大きい数に対する指数関数の計算を行った場合などにこのようなことが起こりうる。これをオーバーフローと呼ぶ。オーバーフローが起これば、プログラムは異常終了するのが普通である。一方、演算結果の絶対値が表現できる最小値より小さくなることがある。これをアンダーフローと呼ぶ。アンダーフローが起こった場合、通常、計算機は演算結果を 0 で置き換えて計算を続行する。

1.2 丸め誤差

1.2.1 丸めと丸め誤差

計算機に入力の数値を与える場合、その数値が 2 進浮動小数点数として正確に表されとは限らない。 $\sqrt{2}$ のような無理数や、有効桁数が (2 進数換算で) 仮数部の桁数より大きい数などはもちろん、10 進数では有限桁で表せる 0.2 のような数も、2 進数では 0.0011001100110011... のような循環小数になり、有限桁では表せない。これらの数を、それに近い 2 進浮動小数点で近似することを丸めと呼ぶ。10 進数の場合と同様、丸めの方式には切り捨て、切り上げ、四捨五入 (2 進数の場合は 0 捨 1 入) などがある。丸めによって生じる誤差を丸め誤差と呼ぶ。

丸めは演算を行った後でも必要になる。これは、仮数部が t 桁の浮動小数点数に対して演算を行った結果は、一般に仮数部 t 桁では正確に表せないからである。たとえば (わかりやすくするため 10 進数で考えるが) 0.123×10^0 と 0.567×10^{-3} という 2 つの仮数部 3 桁の浮動小数点数を加える場合、まず指数部を揃えるために桁ずらしを行うことにより、結果は

$$\begin{array}{r}
 0.123000 \times 10^0 \\
 +) \quad 0.000567 \times 10^0 \\
 \hline
 0.123567 \times 10^0
 \end{array}$$

となり，仮数部は 6 桁になる。この場合，四捨五入による丸めを行うことにより，結果を 0.124×10^0 のように表示できる。

いま， $x = (0.d_1d_2 \cdots d_t d_{t+1} \cdots) \times 2^n$ という数を 0 捨 1 入により仮数部 t 桁の 2 進浮動小数点数に丸める場合を考える。隣り合う 2 個の浮動小数点数 $\underline{x}$ ， $\bar{x}$ を

$$\begin{aligned}
 \underline{x} &= (0.d_1d_2 \cdots d_t) \times 2^n \\
 \bar{x} &= (0.d_1d_2 \cdots d_t + 2^{-t}) \times 2^n
 \end{aligned}$$

とおくと，

$$\underline{x} \leq x \leq \bar{x} \quad (1.4)$$

であり， x は $\underline{x}$ ， $\bar{x}$ のうち，近い方に丸められる（図 1.2）。丸めた結果を $\tilde{x}$ とすると，丸め誤差の上限は明らかに

$$|x - \tilde{x}| \leq 2^{-t+n-1} \quad (1.5)$$

となる。また， x は

$$2^{n-1} \leq x < 2^n \quad (1.6)$$

の範囲にあるから，丸めによる相対誤差は常に

$$\frac{|x - \tilde{x}|}{|x|} \leq \frac{2^{-t+n-1}}{2^{n-1}} = 2^{-t} \quad (1.7)$$

を満たす。

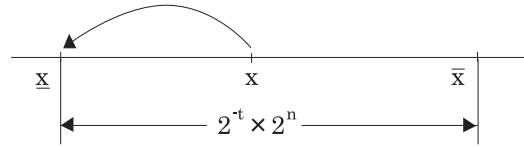


図 1.1: もっとも近い浮動小数点数への丸め

1.2.2 情報落ち

丸め誤差が原因となって生じる現象のうちで，数値計算上特に注意しなくてはならないものとして，情報落ちと桁落ちがある。ここでは，まず情報落ちについて説明する。

浮動小数点数に対する加算で，2つの数の指数部が異なる場合，たとえば

$$x = (0.d_1d_2 \cdots d_t) \times 2^n,$$

$$y = (0.c_1c_2 \cdots c_t) \times 2^m$$

の加算を行う場合には，まず桁ずらしを行って2つの数の指数部を合わせる必要がある。たとえば $m = n - 3$ のときは，

$$\begin{array}{r} 0.d_1d_2d_3d_4 \cdots d_t \quad \times 2^n \\ +) \quad 0.0 \ 0 \ 0 \ c_1 \cdots c_{t-3}c_{t-2}c_{t-1}c_t \quad \times 2^n \\ \hline \end{array}$$

のように， y の仮数部を3桁右にずらす必要がある。

いま， y が x に比べて極端に小さく， $m = n - t - 1$ となる場合を考えると，桁ずらしをして加算を行った結果は

$$\begin{array}{r} 0.d_1d_2 \cdots d_t0 \ 0 \ 0 \cdots 0 \quad \times 2^n \\ +) \quad 0.0 \ 0 \ \cdots 0 \ 0 \ c_1c_2 \cdots c_t \quad \times 2^n \\ \hline 0.d_1d_2 \cdots d_t0 \ c_1c_2 \cdots c_t \quad \times 2^n \end{array}$$

となる。ところが，結果を仮数部 t 桁になるよう0捨1入で丸めると，第 $t+1$ 桁の0以下の数値は省略されてしまい，結果は $0.d_1d_2 \cdots d_t \times 2^n$ で x そのものになってしまう。このような現象を（ y に入っている情報が完全に抜け落ちてしまうという意味で）情報落ちという。

情報落ちが問題となる場合として，級数の計算が挙げられる。たとえば

$$S_n = \sum_{i=1}^n \frac{1}{i^2} = 1 + \frac{1}{4} + \frac{1}{9} + \cdots + \frac{1}{n^2} \quad (1.8)$$

を計算する場合， $\lim_{n \rightarrow \infty} S_n = \frac{\pi^2}{6}$ だから，部分和は一定値 $\frac{\pi^2}{6}$ に近づいていく。一方，足される項は $\frac{1}{i^2}$ で，どんどん小さくなる。したがって， n が非常に大きい場合，ある i より後では，情報落ちが生じ，加算を行っても部分和は変化しなくなってしまう。また，非常に長い2本のベクトル a, b の内積を計算する場合も，情報落ちにより小さな要素の値が内積に反映されなくなることは起こりうる。

級数の計算で情報落ちの影響を少なくするには，数列の各項の大きさがわかっている場合，小さい項から順に足していくことが有効である。たとえば，上の例では

$$S_n = \frac{1}{n^2} + \frac{1}{(n-1)^2} + \frac{1}{(n-2)^2} + \cdots + \frac{1}{4} + \frac{1}{9} + 1 \quad (1.9)$$

と計算することにより，部分和と足される項との大きさの差が小さくなり，情報落ちが起きる可能性が減少する。しかし，ベクトルの内積の場合には，一般には各項の大きさに規則性がないため，このような方法は取りにくい。このような場合に情報落ちを避けるには，計算の精度を上げ，倍精度型あるいは4倍精度型を使うことが有効である。

1.2.3 桁落ち

浮動小数点数に対する減算（あるいは正の数と負の数との加算）で，両方の数が非常に近い場合，たとえば仮数部の上位 k 桁が等しい場合を考える。このとき，減算の結果は

$$\begin{array}{rcl} x & = & 0.d_1d_2\cdots d_kd_{k+1}\cdots d_t \times 2^n \\ -) \quad y & = & 0.d_1d_2\cdots d_kc_{k+1}\cdots c_t \times 2^n \\ \hline x - y & = & 0.0\ 0\ \cdots 0\ b_{k+1}\cdots b_t \times 2^n \\ & = & 0.b_{k+1}\cdots b_t \times 2^{n-k} \end{array}$$

となり，結果の有効数字は $t - k$ 桁で 2 個の入力の有効数字から大きく減少する。これを桁落ちと呼ぶ。

桁落ちは，入力に含まれる相対誤差を大きく拡大する。これを見るため，減算の入力となるべき真の値を x, y ，それぞれに加わった誤差を $\Delta x, \Delta y$ として，減算の入力を

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= x + \Delta x \\ \tilde{y} &= y + \Delta y \end{aligned}$$

と書く。さらに，結果の真の値を $z = x - y$ ，その誤差を Δz と書く。すると減算の結果は（丸める前の時点で）

$$\begin{aligned} \tilde{z} &= \tilde{x} - \tilde{y} \\ &= (x + \Delta x) - (y + \Delta y) \\ &= (x - y) + (\Delta x - \Delta y) \\ &= z + \Delta z \end{aligned} \tag{1.10}$$

となる。これより

$$\begin{aligned} \Delta z &= \Delta x - \Delta y \\ \frac{\Delta z}{z} &= \frac{\Delta x}{z} - \frac{\Delta y}{z} = \frac{x}{z} \cdot \frac{\Delta x}{x} - \frac{y}{z} \cdot \frac{\Delta y}{y} \\ \left| \frac{\Delta z}{z} \right| &\leq \left| \frac{x}{z} \right| \left| \frac{\Delta x}{x} \right| + \left| \frac{y}{z} \right| \left| \frac{\Delta y}{y} \right| \end{aligned} \tag{1.11}$$

が成り立つ。式 (1.11) は，結果 z の相対誤差が入力 x の相対誤差の $|x/z|$ 倍程度に拡大されうること示す。いま，桁落ちが起こる状況のときは x と y が非常に近くて $|z| \ll |x|$ であるから，相対誤差の拡大率は非常に大きくなる。

桁落ちが起こりやすい例として，2 次方程式 $ax^2 + bx + c = 0$ の解の公式

$$x_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \tag{1.12}$$

$$x_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \tag{1.13}$$

がある。いま、 $b > 0$ かつ $b^2 \gg 4ac$ とすると、 $\sqrt{b^2 - 4ac} \approx b$ だから、 x_1 の計算においては分子で桁落ちが起こる。一方、 x_2 の計算では、分子が負の数 $-b$ と正の数 $\sqrt{b^2 - 4ac} \approx b$ との差だから、桁落ちは生じず、精度上の問題は起こらない。 x_1 の計算において桁落ちを避けるには、次のように「分子の有理化」を行う。

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{(-b + \sqrt{b^2 - 4ac})(-b - \sqrt{b^2 - 4ac})}{2a(-b - \sqrt{b^2 - 4ac})} \\ &= \frac{4ac}{2a(-b - \sqrt{b^2 - 4ac})} \\ &= \frac{2c}{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}} \end{aligned} \quad (1.14)$$

変形した式では、分母は符号が違う数どうしの引き算だから、桁落ちの問題は生じない。

桁落ちが起こるもう一つの例として、Taylor 展開による指数関数 e^{-x} の計算が挙げられる。この場合、たとえば $x = 20$ とすると e^{-x} は 10^{-9} 程度のオーダーの非常に小さい数になる。ところが、Taylor 展開の式

$$e^{-x} = 1 - \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} - \frac{x^3}{3!} + \cdots \quad (1.15)$$

において最初のほうの項は 1 のオーダーであるから、計算の過程で結果が 0 に近くなるような引き算が生じ、そこで桁落ちが生じて精度が悪くなると予想される。これを防ぐには、

$$\begin{aligned} e^{-x} &= \frac{1}{e^x} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \cdots} \end{aligned} \quad (1.16)$$

のように変形すればよい。式 (1.16) では分母の級数はすべての項が正であるから、桁落ちは起こらず、精度の良い計算が可能となる。

数値計算を行うに当たっては、なるべく上記のような式変形を行い、値が近い数どうしの減算を避けるようにすることが、精度を保つ上で重要である。ただし、このような工夫はいつでも可能とは限らないため、必要に応じて倍精度計算、4 倍精度計算などを併用することも重要である。