

# 数值計算法基礎

工学博士 田中 敏幸 著

コロナ社

## まえがき

この本は、情報系の大学3年生を対象として書かれたものであるが、大学4年生や大学院生が研究で数値解析を始めるときにも最初の文献として利用できるように心がけて執筆を行っている。数値計算法、数値解析の基礎的なテキストは多くの方々が執筆されているが、それらはおもに執筆者の所属する各大学等の教科書として執筆されたものである。そのためそれぞれの書籍で扱っている内容は、教科書として利用する大学の卒業研究および大学院での研究に必要な内容に特化しているのが普通である。

私が所属する慶應義塾大学物理情報工学科は、非常に多岐にわたった研究分野の研究室によって構成されているという特色がある。そのためそれぞれの研究室における卒業研究では、行列計算から固有値問題、実験データ解析、偏微分方程式に至る多くの内容が数値計算法として必要となる。いままでに出版されている書籍では取り扱っている範囲が限定されているため、物理情報工学科のすべての研究室で利用できる内容を網羅するためには何冊ものテキストが必要となる。また、必要な内容をすべて網羅している書籍としては、数百ページに及ぶアルゴリズム事典のようなものがあるが、教科書として授業で使用するものとしては不適當である。

数値計算法の基礎を勉強するとき必ずしも研究で利用する高度なレベルのアルゴリズムを勉強する必要はなく、その基礎になる部分を要領よく勉強し、専門の研究を始めたときにさらにレベルアップするという手法をとったほうが研究効率がよいように思われる。本書では、いろいろな分野で利用される数値計算法のアルゴリズムについて、それらの基本的手法についての説明を行っている。固有値問題、常微分方程式などといった一つのトピックスをそれぞれ一つの章にまとめ、それらのトピックスの最も基本的と思われる手法についての説

明を行っている。数値解析アルゴリズムを研究の対象としていない多くの分野では、本書に書かれた内容を理解すれば十分であると思われる。もちろん数値計算アルゴリズムを対象とした専門的な研究では、本書の内容を基礎としてさらに発展的な数値計算手法を学ばなければならないことは言うまでもない。また、本書では数値計算法に関連した最近の話題などについても盛り込んでいる。本書が、これから数値計算法を勉強しようとする読者の一助になれば幸いである。

最後に本書原稿を熟読し、内容に関して多くの御意見をいただいた慶應義塾大学理工学部の相吉英太郎氏、本多 敏氏、畑山明聖氏に心からお礼申し上げます。

2006年1月

田中 敏幸

# 目 次

## 1. 数値計算法の基礎

1.1	問題の記述と解法	1
1.2	数値解析における注意事項	3
1.3	浮動小数点の扱い	6
1.3.1	IEEE754 規格	7
1.3.2	IEEE754 の特殊な数値	8
章 末 問 題		10

## 2. 行列演算の基本

2.1	行列の四則演算	11
2.1.1	行列の加算	11
2.1.2	行列の減算	12
2.1.3	行列の乗算	14
2.2	ピボット選択	16
2.3	三角分解 (LU 分解)	18
章 末 問 題		21

## 3. 連立 1 次方程式

3.1	ガウスの消去法	22
3.1.1	基本アルゴリズム	23
3.1.2	部分ピボット選択付きガウスの消去法	25
3.1.3	逆行列の計算	29
3.2	LU 分解を用いる方法	32
3.2.1	ガウスの消去法に基づく LU 分解	32
3.2.2	クラウト法による解法	37
3.3	ガウス・ザイデル法	39
3.4	SOR 法による計算	40

章 末 問 題 .....	41
---------------	----

## 4. 固有値問題

4.1 固有値の基礎 .....	42
4.2 ヤコビ法 .....	44
4.2.1 固有値の計算 .....	44
4.2.2 固有ベクトルの計算 .....	47
4.3 LR分解による固有値計算 .....	49
4.4 QR分解による固有値計算 .....	51
4.4.1 QR分解 .....	51
4.4.2 グラム・シュミットの直交化法 .....	52
4.5 累乗法と逆反復法 .....	55
4.5.1 累乗法 .....	55
4.5.2 逆反復法 .....	55
章 末 問 題 .....	56

## 5. 実験データの多変量解析

5.1 データの統計的特徴量 .....	57
5.2 最小二乗法 .....	60
5.3 主成分分析 .....	64
5.3.1 主成分とは .....	65
5.3.2 分析の手順 .....	65
5.3.3 主成分の寄与率 .....	67
5.3.4 因子負荷量 .....	67
章 末 問 題 .....	69

## 6. 離散データ点の補間

6.1 線形補間 .....	70
6.2 ラグランジュ多項式による補間 .....	72
6.3 スプライン補間 .....	74
6.3.1 Bスプライン .....	74
6.3.2 Bスプラインの計算方法 .....	78
6.3.3 多価関数に対応したBスプライン .....	79
章 末 問 題 .....	80

## 7. 時系列データの周波数解析

7.1	フーリエ級数から離散的フーリエ変換へ	82
7.1.1	フーリエ級数	82
7.1.2	フーリエ級数展開における注意点	84
7.1.3	離散的フーリエ変換	84
7.1.4	離散的フーリエ変換の注意点	86
7.2	高速フーリエ変換	88
7.2.1	時間間引き型 FFT	88
7.2.2	周波数間引き型 FFT	92
	章 末 問 題	94

## 8. 常微分方程式

8.1	オイラー法と修正オイラー法	95
8.1.1	オイラー法	95
8.1.2	修正オイラー法	96
8.2	ルンゲ・クッタ法	99
8.2.1	4次のルンゲ・クッタ法	99
8.2.2	ルンゲ・クッタ・ジル法	102
8.2.3	連立微分方程式	103
8.2.4	高階の常微分方程式	105
	章 末 問 題	106

## 9. 非線形方程式

9.1	ニュートン法	107
9.1.1	1変数方程式	107
9.1.2	多変数方程式	109
9.2	ベアストウ・ヒッチコック法	111
9.3	DKA法による解法	114
9.3.1	デュラン・カーナーの公式	114
9.3.2	アバースの初期値	115
	章 末 問 題	117

## 10. 数理計画法

10.1	最急降下法	118
10.1.1	勾配を利用した最適解の求め方	118

10.1.2 逐次2分割法によるステップ幅の決定 .....	121
10.1.3 最急降下法の欠点 .....	123
10.2 共役勾配法 .....	124
10.3 ニュートン法の応用 .....	126
章末問題 .....	129

## 11. 数値積分

11.1 台形公式 .....	130
11.2 シンプソンの公式 .....	132
11.3 ガウスの数値積分法 .....	135
11.3.1 ルジャンドル多項式 .....	135
11.3.2 ガウス・ルジャンドルの公式 .....	136
11.3.3 多重積分の数値解法 .....	138
章末問題 .....	140

## 12. 偏微分方程式

12.1 偏微分から差分へ .....	141
12.1.1 前進差分 .....	141
12.1.2 中心差分 .....	142
12.2 差分式構成の注意点 .....	143
12.3 いろいろな偏微分方程式 .....	144
12.3.1 拡散型方程式 .....	144
12.3.2 波動方程式 .....	145
12.3.3 楕円型方程式 .....	147
12.4 数値解析のための条件設定 .....	148
12.4.1 位置に関する条件設定 .....	149
12.4.2 時間変化に関する初期値 .....	149
12.4.3 刻み幅の設定 .....	150
12.4.4 反復計算について .....	151
章末問題 .....	152

## 13. モンテカルロ法

13.1 計算機による乱数の発生 .....	153
13.1.1 一様乱数 .....	153
13.1.2 正規乱数 .....	155

13.1.3 M 系列乱数 .....	156
13.1.4 メルセンヌツイスタ .....	158
13.2 モンテカルロ法の基本的問題 .....	159
13.2.1 ビュッフォンの針の問題 .....	159
13.2.2 求積問題 .....	162
13.2.3 酔歩問題 .....	165
章 末 問 題 .....	166
参 考 文 献 .....	167
章末問題解答 .....	168
索 引 .....	194



# 1

## 数値計算法の基礎

工学的な諸問題に対して数値解析を行う前にまず考えておかなければならないことが二つある。一つは問題の定式化であり、もう一つは数値計算の精度である。どんなにすばらしい数値解析法が用意されていても、問題の定式化が間違っているのでは話にならない。また、定式化が正しかったとしても、コンピュータでの計算によりどの程度の精度で解が求まっているかを知らなければ、得られた解から誤った判断をしてしまうことになる。この章では、問題の定式化および数値解析をする際の注意事項について説明する。

### 1.1 問題の記述と解法

工学的な問題を解析する場合には、まず問題を記述し、解法を考え、解析するなどの手順が必要となる。どのようなことを考えていかなければならないかそれぞれの項目について説明する。

#### (1) 問題の定式化と分析法

与えられた問題の本質を理解し、定式化を行う。この時点での定式化によってこの後の結果がすべて変わってくる。同様の問題であっても、時間的な変化を考えられているのか、定常状態の値を求められているのかによって定式化そのものも違ってくる。また、問題の分析方法として、取得した（あるいは与えられた）データのもっている情報を分析する場合と、問題を数式化して解析する場合がある。データの情報を解析する場合の目標としては、特性を表す近似式の誘導、データ点間の補間、データ点列のもつ周波数特性の解析などがある。問題を数式で

記述して解析する場合の目標としては、システムを表す微分方程式の解計算、代数方程式の解計算などがある。

### (2) 解法を検討する

定式化が行われた段階で、解法についてはほぼ決定する。それぞれの問題に対して違った特徴をもついくつかの解析方法が存在するので、各解法の特徴と問題の性質を考慮して、どの解析方法を選ぶかを判断する。例えば、データの近似特性を求める場合には、回帰分析、主成分分析などの方法がある。データそのものもっている性質を考慮して、これらの手法のどれを選ぶかを決定する。最終的に得たい情報によって手法が決まってくる場合もある。また、システムを特徴づける式が微分方程式で記述される場合にはルンゲ・クッタ法などが用いられ、非線形方程式で記述される場合にはニュートン法などが用いられる。

### (3) 計算アルゴリズムを決める

プログラミングを行うためのアルゴリズムを決定する。アルゴリズムについては、解法が決まった段階で必要な精度を考慮して決定する。回帰分析、ルンゲ・クッタ法などの解析法の使用が決まると、その解法の標準的なアルゴリズムがあるので、精度保証などの特殊な処理が必要でなければ標準的なものを用いる。ただし、定式化が複雑で一つの解法では解けない場合には、いくつかを組み合わせて複合的なアルゴリズムを作らなければならない。また、扱っている問題が標準的なアルゴリズムでは解けない場合、その問題に応じた工夫をしなければならない。同じ処理を何回も行って計算効率が落ちないように、アルゴリズムの推敲を行う必要がある。複合的なアルゴリズムを作る場合や問題の定式化そのものが複雑な場合には特に気をつけなければならない。

### (4) 言語を選びプログラムを作成する

アルゴリズムと並行して、数値解析を行うための言語を選ばなければならない。科学技術計算を行うための言語としては、Fortran、C言語、Javaなどいくつか考えられるが、本書ではC言語を用いる。これ以外にも処理の多くが関数化されて、プログラムが簡単になっている言語として、MATLAB、

Mathematica などがある。

### (5) 実行した結果の評価を行う

プログラムが思い通りに実行しているかどうかについて、実行した結果を評価する。数式的に解いた結果などと比較してプログラムの動作確認を行う場合もあるが、問題が解析的に解けるパラメータを与えるなどしてプログラムが所望の結果を出すことを調べる場合が多い。複合的な問題、解析解や答えのはっきりとわからない問題などの場合には、この評価自体が非常に難しくなる。このような場合でも何らかの検討を行うことによって、作ったプログラムの妥当性を示さなければならない。

## 1.2 数値解析における注意事項

### 2 進法の使用による注意点

コンピュータを用いて数値解析を行う場合、内部演算はすべて2進数によって行われている。どうしても考えなければならないものにコンピュータ内部の演算システムに関する誤差 (error) がある。それに関連して2進数の特徴に基づく誤差というものは避けられない。また、数値解析独特の誤差というものもある。ここでは、特に注意を必要とするいくつかについて述べることにする。

#### (1) 整数の桁あふれ

これは、コンピュータの内部システムに依存する。よく32ビットコンピュータなどという言葉を目にすると思うが、これは内部の処理が32ビットで行われているコンピュータである。1ビットというのは2進数1桁で表すことのできる情報量であり、32ビット演算というのは2進数32桁で処理を行うことを意味する。工夫をすることによって64ビットでの処理を行うこともできるが、それでも表すことのできる数値には限界がある。数値解析を行う場合には、コンピュータがどのような範囲の値を処理することができるかをよく調べておかなければならない。

また、扱える数値の範囲は、コンピュータだけでなく、使っている処理系

(ソフトウェア)によっても変わってくるので、解析を行う前に必ず調べる必要がある。本書では、C言語の利用を前提としている。C言語では扱う数値の型(整数、実数など)によって、計算時の2進数の桁数が異なる。例として Visual C++ .net の場合には、整数(int型)は $\pm 2^{31} = \pm 2147483648$ の範囲(最大値は2147483647)で利用することができる。この程度の範囲があれば桁あふれすることは少ないと思われるが、処理系によって整数型は古いC言語にならって $\pm 2^{15} = \pm 32768$ の範囲(最大値は32767)となっていることがある。このような場合には桁あふれしてしまう可能性があるので気をつけよう。

### (2) 小数の2進数表現

10進数を2進数に変換したときに、10進数の桁数とそれほど変わらない桁数で表現できる場合と10進数の桁数に比べて非常に大きくなってしまう場合がある。例を挙げると、10進数の0.75という値は $2^{-1}$ と $2^{-2}$ の和なので、2進数でも少ない桁数で正確に表すことができる。ところが、0.33という値の場合には10進数では少ない桁数で表現できるが、2進数では桁数をかなり多く取らないと表現することができない。このように私たちが日常使っている10進数とコンピュータ内部で使っている値で、数値を表現する難しさが異なるということをまず知っておこう。コンピュータ内における小数の2進数表現には、固定小数点(fixed point)と浮動小数点(floating point)の2種類がある。科学技術計算などの数値解析を行う場合には、浮動小数を用いるのが一般的である。C言語で数値解析する場合には、実数を倍精度(double precision)実数(double型)で扱うのが普通である。倍精度実数の有効桁数を考えれば、実用上は計算誤差の影響は少ないが、研究によっては計算精度を問題にする分野もあるので、浮動小数のことについてはよく理解しておいたほうがよい。コンピュータ内での浮動小数の表現方法としてはIEEE754という国際規格(international standard)があり、この規格についてはあとで説明する。

### (3) 桁落ちの問題

実験などのデータ整理を行っているときのような問題に直面することがある。いま二つの実験値を0.123451 および0.123452 とする。見たとおりそれ

それは有効数字 6 桁である。ところが、データの差を取ると 0.000 001 となり、この場合は有効数字 1 桁ということになる（小数点以下初めて数値が出るまでの 0 の数は有効数字に含めない）。このデータの差を使ってつぎに続く計算を行った場合には、その時点からの計算結果をすべて有効数字 1 桁で考えていかなければならない。このようにデータの差を取ったときに有効数字の減少が起こることを桁落ち (loss of significant digits) と呼んでいる。数値解析の場合に桁落ちの問題は頻繁に出てくる。アルゴリズムを考えるときには、このような桁落ちを避けるための処理というものをつねに考えなければならない。

**例題 1.1** 2 次方程式  $ax^2 + bx + c = 0$  の解は、つぎの公式を用いて計算できることが知られている。

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$$

しかしこの公式を用いるとつぎの条件で桁落ちが起こる。

$$(1) \quad 0 < b \text{ かつ } 4ac \ll b^2$$

$$(2) \quad b < 0 \text{ かつ } 4ac \ll b^2$$

上記の条件で桁落ちを起こさないためにはどのようにすればよいか。

**【解答】** 条件 (1) についてはつぎの公式を用いたときに桁落ちが起こる。

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

桁落ちを防ぐためには、この公式をつぎのように変形して用いればよい。

$$x_1 = \frac{-2c}{b + \sqrt{b^2 - 4ac}}$$

条件 (2) についてはつぎの公式を用いたときに桁落ちが起こる。

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

桁落ちを防ぐためには、この公式をつぎのように変形して用いればよい。

$$x_2 = \frac{2c}{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}$$

# 索引

<p><b>【あ】</b></p> <p>R 行列 49</p> <p>IEEE754 規格 7</p> <p>あたりはずれのモンテカルロ法 163</p> <p>アバースの初期値 115</p> <p><b>【い】</b></p> <p>一様乱数 153</p> <p>因子負荷量 67</p> <p><b>【う】</b></p> <p>上三角行列 18</p> <p><b>【え】</b></p> <p>SOR 法 40</p> <p>M 系列 156</p> <p>M 系列乱数 153,156</p> <p>LR 分解 49</p> <p>LR 分解法 42</p> <p>LR 法 49</p> <p>L 行列 49</p> <p>LU 分解 18,32</p> <p>円柱波 146</p> <p><b>【お】</b></p> <p>オイラー法 95</p> <p><b>【か】</b></p> <p>回帰直線 60</p> <p>ガウス点 136</p> <p>ガウスの消去法 22</p> <p>ガウスの数値積分法 135</p> <p>ガウス・ルジャンドルの公式 136</p>	<p>ガウス・ザイデル法 39</p> <p>ガウス・ジョルダンの消去法 28</p> <p>拡散型方程式 144</p> <p>加速度パラメータ 40</p> <p>間接法 22</p> <p>完全ビボット選択 18</p> <p><b>【き】</b></p> <p>基本演算 16</p> <p>逆行列 29</p> <p>逆反復法 55</p> <p>QR 分解法 42</p> <p>球面波 146</p> <p>共分散 59</p> <p>共役勾配法 124</p> <p>極座標法 155</p> <p>寄与率 67</p> <p><b>【く】</b></p> <p>矩形波 83</p> <p>クラウト法 18,32,37</p> <p><b>【け】</b></p> <p>桁落ち 4</p> <p>ケチ表現 7</p> <p><b>【こ】</b></p> <p>高階の常微分方程式 105</p> <p>降下方向 119</p> <p>高速フーリエ変換 88</p> <p>後退差分 143</p> <p>後代入 22,24,34</p> <p>勾配 119</p> <p>固有多項式 43</p> <p>固有値 42</p>	<p>固有ベクトル 42</p> <p><b>【さ】</b></p> <p>最急降下法 118</p> <p>最小二乗法 60</p> <p>差分法 141</p> <p>三角分解 11,18</p> <p>残差 60</p> <p>残差平方和 60</p> <p><b>【し】</b></p> <p>シェーンバーグ・ホイットニの条件 78</p> <p>時間間引き型 FFT 88</p> <p>四則演算 11</p> <p>下三角行列 18</p> <p>実対象行列 44</p> <p>重回帰分析 64</p> <p>修正オイラー法 96</p> <p>収束判定 39</p> <p>周波数間引き型 FFT 92</p> <p>主成分得点 66</p> <p>主成分分析 65</p> <p>消去法 22</p> <p>情報落ち 6</p> <p>シンプソンの公式 132</p> <p><b>【す】</b></p> <p>酔歩問題 165</p> <p>スパース行列 28</p> <p>スプライン補間 74</p> <p><b>【せ】</b></p> <p>正規乱数 153,155</p> <p>正則行列 30</p> <p>積分点 136</p>
--	---	--

切断べき関数 74  
 節点 75  
 線形合同法 153  
 線形補間 70  
 前進差分 22,141  
 前進消去 22  
 前進代入 33

【そ】

相関係数 59  
 双曲型方程式 145  
 相似変換 43,44

【た】

大規模数値計算 151  
 台形公式 130  
 対称行列 28  
 楕円型方程式 147  
 多重積分 138  
 単回帰分析 64

【ち】

置換行列 16,32  
 逐次2分割法 121  
 中心差分 142  
 直接法 22  
 直線回帰分析 64  
 直交行列 44

【て】

DKA法 114  
 デュラン・カーナーの  
 公式 114

【と】

ドヴァ・コックスの  
 漸化式 76  
 特異行列 30

【に】

入門的モンテカルロ法 162

ニュートン・コーツの  
 公式 134  
 ニュートン法 107,126

【ね】

熱伝導方程式 144

【の】

ノルム 109,110

【は】

掃き出し法 28  
 波動方程式 145  
 パラメトリック B スプ  
 ライン 80  
 パワースペクトル 86

【ひ】

B スプライン 74  
 ビット反転 91  
 ビボット選択 11,16  
 標準偏差 58

【ふ】

浮動小数点 6  
 部分ビボット選択 18  
 不偏推定量 58  
 フーリエ級数 82  
 分散 57

【へ】

ヘアストウ・ヒッチコ  
 ック法 111  
 平均 57  
 平面波 146  
 ヘッセ行列 124  
 偏回帰係数 64  
 変換行列 32  
 偏差 57  
 偏差積和 58  
 偏差平方和 57  
 偏微分方程式 141

【ほ】

放物型方程式 144  
 ボックス・ミューラー法 155

【む】

無限大 9

【め】

メルセンヌ数 159  
 メルセンヌツイスタ  
 153,158

【も】

モンテカルロ法 153

【や】

ヤコビ行列 110  
 ヤコビ法 42,44

【ら】

ラグランジュ多項式 72  
 ラプラシアン 148  
 ラプラス方程式 147  
 乱数 153

【り】

離散時間波形 85  
 離散的フーリエ変換 84

【る】

累乘法 55  
 累積寄与率 67  
 ルジャンドル多項式 135  
 ルンゲ・クッタ・ジル法 102  
 ルンゲ・クッタ法 99  
 ルンゲの現象 73

【れ】

連立1次方程式 22  
 連立微分方程式 103

— 著者略歴 —

- 1982年 慶應義塾大学工学部計測工学科卒業  
1989年 慶應義塾大学大学院博士課程修了（計測工学専攻）  
工学博士（慶應義塾大学）  
1989年 慶應義塾大学助手  
1993年 慶應義塾大学専任講師  
2003年 慶應義塾大学助教授  
2007年 慶應義塾大学准教授  
2009年 慶應義塾大学教授  
現在に至る

## 数値計算法基礎

Fundamentals of Numerical Method

© Toshiyuki Tanaka 2006

2006年4月6日 初版第1刷発行

2020年12月20日 初版第9刷発行

検印省略

著者 田 中 敏 幸  
発行者 株式会社 コロナ社  
代表者 牛来真也  
印刷所 三美印刷株式会社  
製本所 有限会社 愛千製本所

112-0011 東京都文京区千石 4-46-10

発行所 株式会社 コロナ社  
CORONA PUBLISHING CO., LTD.

Tokyo Japan

振替 00140-8-14844・電話(03)3941-3131(代)

ホームページ <https://www.coronasha.co.jp>

ISBN 978-4-339-06078-2 C3041 Printed in Japan

(中原)



JCOPY < 出版者著作権管理機構 委託出版物 >

本書の無断複製は著作権法上での例外を除き禁じられています。複製される場合は、そのつど事前に、出版者著作権管理機構（電話 03-5244-5088, FAX 03-5244-5089, e-mail: info@jcopy.or.jp）の許諾を得てください。

本書のコピー、スキャン、デジタル化等の無断複製・転載は著作権法上での例外を除き禁じられています。購入者以外の第三者による本書の電子データ化及び電子書籍化は、いかなる場合も認めていません。落丁・乱丁はお取替えいたします。