

# 計算物理学B

## 第6回

野垣 康介、藤本 悠輝

# 講義予定

10/07 兩名:四則演算

10/14 野垣:制御文(for, if)

10/21 野垣:関数

10/28 藤本:配列(numpy)

11/04 藤本:可視化(matplotlib)

11/11 野垣:数値微分

11/18 藤本:数値積分

～中間レポート～

12/09 野垣:モンテカルロ1

12/16 野垣:モンテカルロ2

12/23 藤本:微分方程式1

01/13 藤本:微分方程式2

01/20 藤本:微分方程式3

01/27 野垣:最適化

02/03 藤本:機械学習

～期末レポート～

# はじめに

---

授業で用いるリンクをまとめておきます。

Google Colab

<https://colab.research.google.com/?hl=ja>

GitHub

[https://github.com/nogaki/Computational\\_Physics\\_B](https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B)

GitHub(今週の教材)

[https://github.com/nogaki/Computational\\_Physics\\_B/tree/main/week6](https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B/tree/main/week6)

# はじめに

---

GitHubからGoogle Colabへのノートブックの取り込みについて

Colabの画面で  
[ファイル]→[ノートブックを開く]→タブ[GitHub]をクリック

GitHub上のノートブックのurlを打ち込むと、直接取り込めます。

[https://github.com/nogaki/Computational\\_Physics\\_B/tree/main/week6/week6.ipynb](https://github.com/nogaki/Computational_Physics_B/tree/main/week6/week6.ipynb)

**[注意!]**この状態では、GitHub上のファイルを開いただけで、個人のドライブに保存されていません!  
[ファイル]→[ドライブにコピーを保存]を実行すること。

# 数値微分と誤差

---

関数のテイラー展開  $|h| \ll 1$

$$f(x \pm h) = f(x) \pm f'(x)h + \frac{f''(x)}{2!}h^2 + \mathcal{O}(h^3)$$

を用いると数値微分は

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

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

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

とすれば簡単に求まりそうだ?

誤差との闘い!

# 計算機での数値の表現

計算機上のデータは全て0と1の羅列に過ぎない

00101001000111101101011…

0または1を取りうる、データの最小単位をbitと呼ぶ。

現代の計算機では、整数も小数も64bitが標準的。  
(Pythonの整数型は例外)

1 byte = 8bit。

$$\begin{aligned}1 \text{ GB} &= 1024 \text{ MB} = (1024)^2 \text{ KB} \\&= (1024)^3 \text{ B} = 8 \times (1024)^3 \text{ bit}\end{aligned}$$

# 整数の表現

---

人間界の10進数の整数は0と1で表現不能

→2進数表示: 計算機界のスタンダート

$$\begin{array}{r} 13 \rightarrow (0\ 1\ 1\ 0\ 1)_2 \\ 25 \rightarrow (1\ 1\ 0\ 0\ 1)_2 \end{array}$$

$$\begin{array}{ccccc} 2^4 & 2^3 & 2^2 & 2^1 & 2^0 \\ \text{の} & \text{の} & \text{の} & \text{の} & \text{の} \\ \text{桁} & \text{桁} & \text{桁} & \text{桁} & \text{桁} \end{array}$$

8bitの符号付き整数の表現 (64bitでも同じ)

$$\begin{array}{r} 00100101 = 37 \\ \hline \text{↑} \end{array}$$

符号 絶対値

-128から127までを表現できる

# 整数の表現

$M+1$  bitの整数の10進数への変換



符号              絶対値 ( $M$  bit)

符号: 0なら正の数、1なら負の数

絶対値:  $M$  bitの2進数表現。0から $2^M - 1$

負の数の場合は、 $2^M$ から絶対値を引いた数に  
負号をつけた数として解釈する。(2の補数表現)

例) 8bit整数で符号→1 絶対値→32 なら、 $-(128-32) = -96$ を表す

# 浮動小数の表現

小数も2進数表示が可能

$$15.5 \rightarrow (1\ 1\ 1\ 1.1)_2 = (0.1111)_2 \times 2^4$$

$$3.3 \rightarrow (1\ 1.0\ 1\ 1)_2 = (0.11011)_2 \times 2^4$$

2進数表示して、 $2^{-1}$ の位が1になるように適切に指数をつける

$$\pm(0.\cdots)_2 \times 2^E$$

指数部  
符号 仮数部



符号 指数部

1 bit 11 bit

仮数部（小数点以下）

52 bit

# 浮動小数の表現

仮数部の桁数が52であるように、計算機上の浮動小数で表現できる桁数には限りがある。



数学的には実数は稠密

ほとんど全ての実数は計算機上で正確に表現できない!

# 浮動小数の表現

0.1を2進数表示すると…

$$0.1 = (0.00011001100110011\cdots)_2$$

0011が繰り返される循環小数になる。

計算機では、あるところで打ち切られ、それ以降は記憶されない。

```
a = 0.1  
print(f"{a:.55f}")
```

0.100000000000000055511151231257827021181583404541015625

0.1すら正確に表現できない!

# 足し算と打ち切り誤差

桁落ちに注意する必要がある別の場面として、  
(桁違いに) 大きさの異なる数同士の足し算がある。

```
sum = 0.0
for _ in range(10000000):
    sum = sum + 0.01

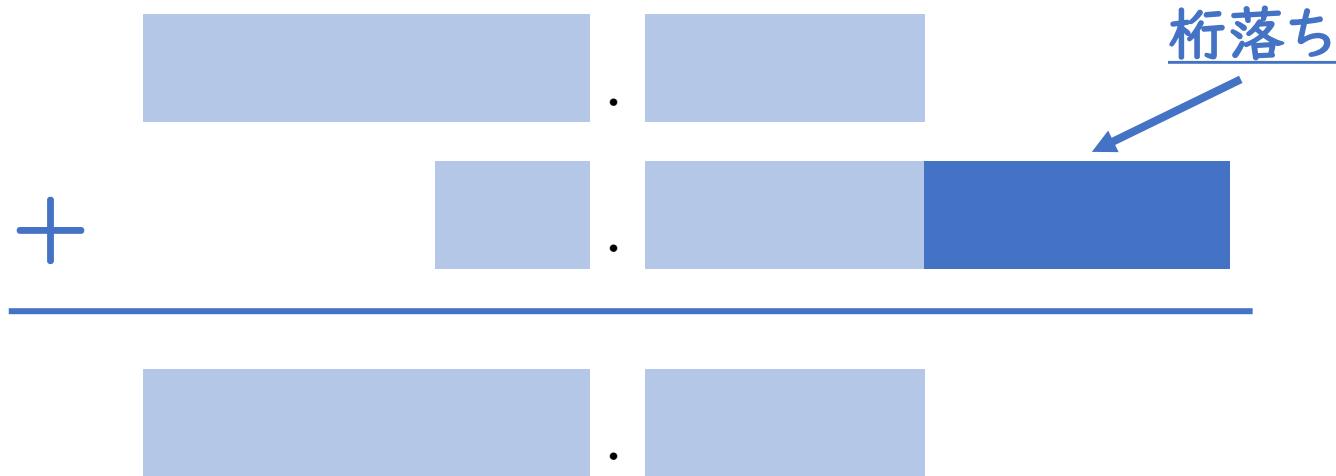
print(sum)
```

99999.99998630969

足されていない成分がある…？

# 足し算と桁落ち

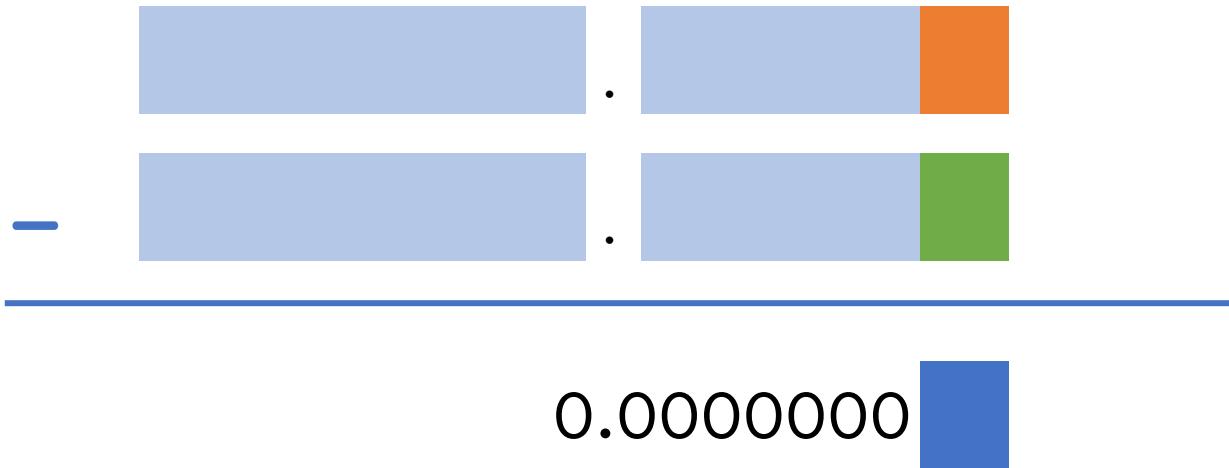
大きな数と小さな数の足し算



大きさの異なる数字の足し算に注意

# 引き算と桁落ち

ほとんど同じ大きさの数同士の引き算



引き算に用いるデータは途中で打ち切られているため、結果の有効数字が著しく低下する。

大きな同じ数字の引き算に注意

# 数値微分と桁落ち

数値微分の公式

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

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

公式の精度を上げる→hを小さく

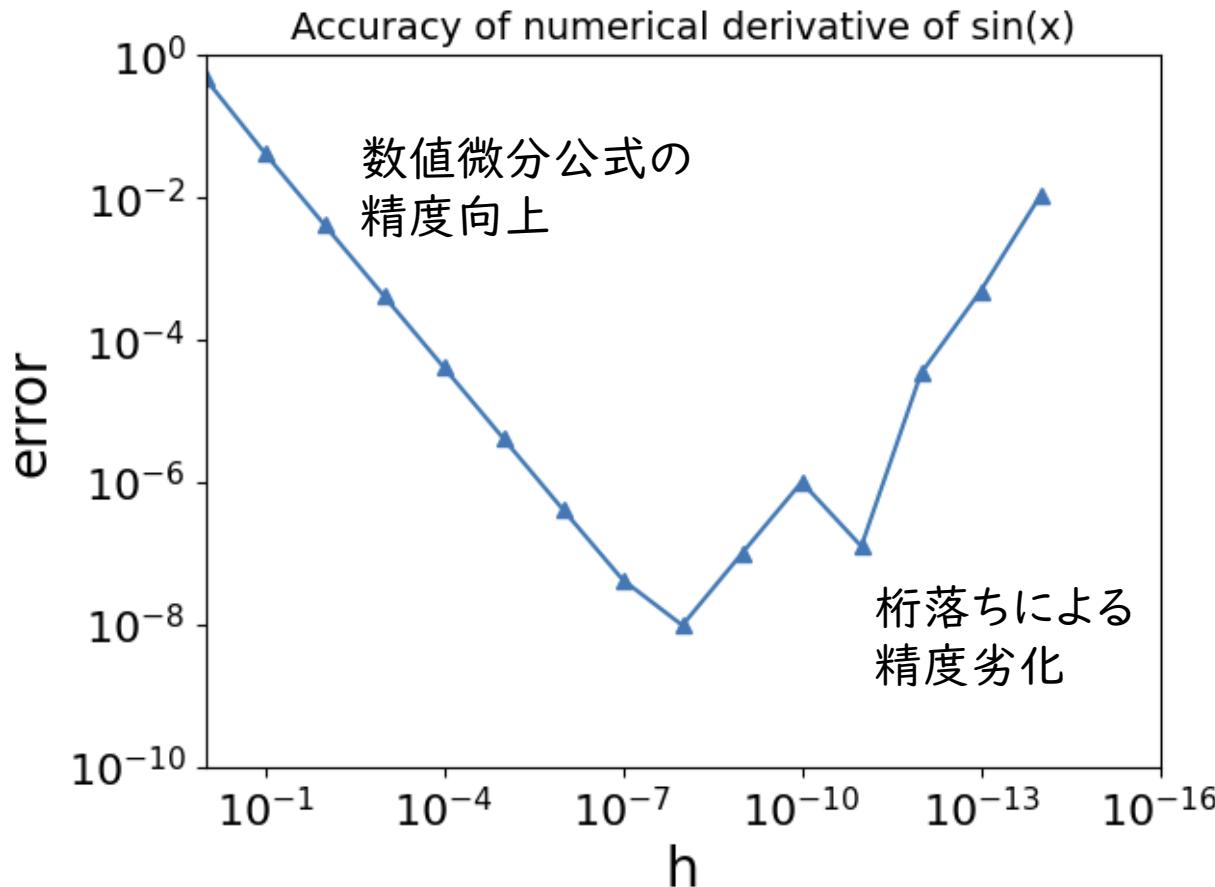
v.s

分子の引き算を安全に行う→hを大きく

丁度よいhを選ぶことが重要

# 数値微分と桁落ち

$\sin(x)$ の  $x=0.3\pi$  における数値微分  
errorは  $\cos(0.3\pi)$  との誤差



# 数値微分と桁落ち

64 bit の浮動小数点では、10進数で  $10^{-16}$  程度の精度を持つ

公式  $f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \mathcal{O}(h)$  を用いる場合は、精度の半分の  $h = 10^{-8}$  と選ぶのが最適であることが多い。

$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + \mathcal{O}(h^2)$  を用いる場合は、精度の  $1/3$  の  $h = 10^{-5}$  と選ぶのが最適であることが多い。

あくまで経験則。過信は禁物

# 実習タイム

## 例題

- 適当な多項式関数を数値微分し、解析解と比較せよ。
- 激しく変化する関数  $\sin(10^{-4}x)$  を数値微分し、最適な  $h$  の値が変わることを確認せよ。
- 以下の3つの公式によって、計算精度が変化するか確認せよ。

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

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

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