情報システム工学実験Ｉ
プログラミング（３／３）　数値計算　実験指導書

「２．基本的事項」の２－１および２－２節については、実験中に必ずこれらの内容に関するプログラムを作成してもらう。２－３節については、検討事項に対応した内容であるため、興味がある、余力がある場合に取り組むこと。

１．目的

今までに高等学校や大学において、積分、微分、微分方程式の解析的な手法（数式の変形で解を求める手法）について学んできているが、自然現象をシミュレーションする際などには、解析的な手法が使用できない場合が多い。それに対しコンピュータによる数値計算では、原理上ある程度の誤差はあるものの汎用的に使用することができる。

本実験では数値計算の原理と手法について学び、その原理を確認しプログラムを作成できるようになることを目的とする。

２．基本的事項

２－１．実数の計算と数値計算における誤差

（１）コンピュータによる実数の計算

コンピュータで実数を扱う場合、浮動小数点数を使用することが多い。浮動小数点数は、仮数、基数および指数でデータを表すが、現在多く使われている手法では基数を固定しており、以下のように表すことが多い。

符号部：１bit
仮数部：符号なし整数
指数部：符号付き整数

浮動小数点数では、表したい数値の絶対値を（仮数部）×（基数）$^{(指数部)}$とする。例えば、0.5 であれば基数を 10（10 進数）とすると 5.0×10^{-1} となる。浮動小数点数にはいくつかの方式（フォーマット）があるが、一般的には IEEE 754 により規定された方式が使用されている。

浮動小数点数をプログラムで使用するには、float 型あるいは double 型を使うことが多い。それぞれの型の変数のサイズは、float 型は 32bit、double 型は 64bit であり、float 型のほうが使用するメモリ容量は少なくて済むが、近年のパソコンでプログラムを実行する場合は、精度の点からメモリ容量を気にせずに double 型を使うことを推奨する。なお、演算速度に

ついては、浮動小数点数は専用のハードウェアで処理されることが多く、どちらの型を使っても大差はない。

（２）数値計算における誤差

数値計算を行う上で、原理上どうしても生じてしまう誤差がある。以下にその例を示す。

・丸め誤差

実数を有限の桁数の 2 進数で表すために生じる誤差である。10 進数の無理数や循環小数をコンピュータで扱うときに、この丸め誤差が生じる。また、10 進数では有限小数であっても、コンピュータで 2 進数として扱うことにより循環小数となって丸め誤差を生じることもある。

例えば、10 進数の 0.1 は 2 進数で表すと、以下のような循環小数となる。

$$(0.1)_{10} = (0.0001100110011\cdots)_2$$

つまり、10 進数による演算では誤差がないような数値であっても、場合によってはコンピュータで 2 進数として演算をすると丸め誤差が生じることがある。

・桁落ち

値のほぼ等しい数値同士を減算する場合、有効数字が失われる可能性がある。この現象を桁落ちと言い、計算誤差につながる。例えば 2 次方程式の解の公式において、b の絶対値が ac の値よりも非常に大きい場合は桁落ちが起きる。 2 次方程式の解の公式を式（１）に示す。

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \tag{1}$$

桁落ちを回避するには、分子の有理化を行なえばよい。具体的には、b>0 のとき式（２）、（３）のようにする。

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

$$x_2 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \times \frac{b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{b + \sqrt{b^2 - 4ac}} = -\frac{2c}{b + \sqrt{b^2 - 4ac}} \tag{3}$$

・情報落ち

絶対値の大きく異なる数値同士の演算において、絶対値の小さな数値が演算結果に反映されない現象がある。これを情報落ちという。例えば、10^{10} のような大きな値に 10^{-8} のような小さい値を繰り返し加えると、プログラムのコーディングの方法によっては情報落ちにより正しい結果が得られない場合がある。具体的には、10^{10} に 10^{-8} を 1000 万回加えると、正しくは $10^{10}+0.1$ となるのに、0.1 が反映されず計算結果が 10^{10} となる。

数値計算を行う場合、上述の計算誤差を十分に考慮する必要がある。これらは一般的なコンピュータで数値を扱う上で避けて通れない点である。また、この他にも数値を扱う変数は、その型によって扱える値の範囲が決まっている。それを超えると、いわゆるオーバフロー（アンダーフロー）を起こし正しい計算結果が得られなくなる。これらの点に留意し数値計算プログラムを作成しなければならない。

２－２．数値計算の具体例：数値計算による積分（区分求積法）

連続関数の不定積分とは、ある関数が与えられているとき、微分すると与えられた関数に一致するような新たな関数（原始関数）を求める操作のことを意味する。すなわち、微分の逆操作が積分（正確には不定積分）であるが、数値計算で積分を扱う場合はいわゆる定積分を計算する。定積分は面積や体積を求める際などに使用される。

数値計算により定積分を求める際に、区分求積法がよく使用される。例えば実数値の連続関数である $f(x)$を区間$[a, b]$で定積分するには、その関数の示す面に微小な長方形を敷き詰め、その面積の合計値を求める。区分求積法の概念を図 1 に示す。なお、各矩形の幅 h を刻み幅という。この手法は、原理的に誤差が生じる。(矩形の幅である h を 0 に出来ないため）

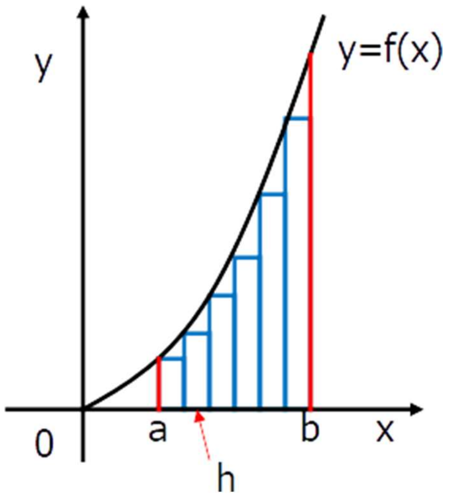

図 1　区分求積法の概念図

以下に、区分求積法のアルゴリズムを説明する。

I. 各変数を初期化する。

刻み幅:h（プログラム上では 0.1 などの具体的数値を代入する）

変数 x=a（定積分の範囲が a〜b のため、初期値は a となる）

定積分値（矩形の面積の合計）：s=0

最初に、図 1 の a から始まる一番左の矩形について面積を求める。

II. y=f(x)について、x を代入し y の値を求める。（初回の計算、すなわち図 1 の一番左の矩形について計算をするときは、x に a を代入したものが y となる。これは、この矩形の高さを意味している）

$$y = f(x)$$

III. 矩形の高さ y と刻み幅 h から矩形の面積 ds を求める。

$$ds = y \times h = f(x) \times h$$

IV. 定積分値を格納する変数 s に ds を加え、s の値を更新する。

$$s = s + ds$$

V. x の値に刻み幅 h を加算する。

$$x = x + h$$

VI. 以後、x=b になるまでⅡ〜Ⅴの処理を繰り返す。繰返しが完了すると、s には y=f(x)を a〜b まで定積分した値（面積）が格納されている。

区分求積法で、関数の示す面に敷き詰める矩形を台形にすると、得られる値の誤差を小さくすることができる。これを台形公式による方法と言う。具体的には f(x)を台形の上底、f(x+h)を台形の下底として計算する。

（以後、検討事項に関する内容）

２－３．数値計算の具体例：微分と常微分方程式の解法（オイラー法）

微分とは、ある関数 f(x)の局所的な変化の情報（変化量）を求めることを意味する。例えば、f(x)が xy 座標平面にグラフとして描画されているなら、この微分は f(x)の接線の傾きを指している。

微分とは微分係数を求めることでもあり、一般的に式（４）のように求められる。ここで、f(x)において上述のように極限が存在する場合、f(x)は a で微分可能といい、この極限を f'(a)と書き x=a における f(x)の微分係数である。その様子を図２に示す。

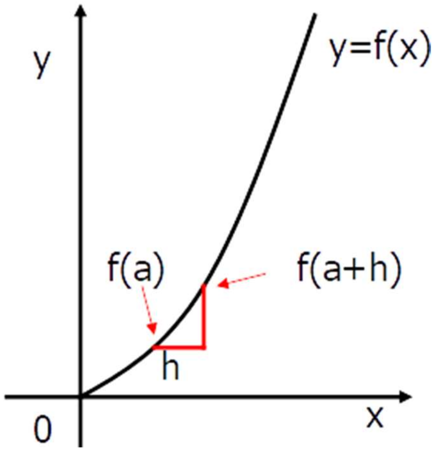

図２　微分の概念図

$$f'(a) = \lim_{x \to a} \frac{f(x) - f(a)}{x - a} = \lim_{h \to 0} \frac{f(a + h) - f(a)}{h}, (x = a + h) \tag{4}$$

数値計算で微分を行うときは、差分を用いる。差分は式（５）のように求められる。式（５）において、h を刻み幅として十分に小さい値をとる必要があるが、０は使用できない。そのため、誤差が生じる。

$$f'(a) = \frac{f(a + h) - f(a)}{h} \tag{5}$$

現実の世界の物理現象をシミュレートする際、微分方程式を用いることが多い。微分方程式を数値計算により解く場合も、微分を差分として取り扱う。微分方程式を数値計算で解く手法は多数があるがオイラー法について説明する。

・オイラー法による数値計算の実例

１次元の運動シミュレーションとして、地面に向かって降下していく物体の運動をシミュレートする。物体の運動は、式（６）に示す運動方程式で求めることができる。

$$F = m\alpha = m\frac{dv}{dt} = m\frac{d^2x}{dt^2} \tag{6}$$

重力以外の力が働かない自由落下運動の場合、地球上では加速度 α は定数 g=9.80665(m/s^2)となる。自由落下の場合、運動方程式は解析的に容易に求めることができる。速度を v、位置を x とし、速度および位置の初期値をそれぞれ v_0 と x_0 にすれば、以下の式（７）を求めることができる。

$$v = v_0 + gt$$
$$x = x_0 + v_0 t + \frac{1}{2} g t^2 \tag{7}$$

このように運動方程式が解析的に解ける場合は、解いた結果の式から値を求めればよい。しかしながら、一般的には運動方程式がいつでも解析的に解けるとは限らない。そこで、式（６）の運動方程式にオイラー法を適用し数値計算により値を求めることにする。

一般に常微分方程式をある初期値のもとで数値計算として解くには、初期値から始めてある刻み幅で次の値を順々に求めて行く。以下、オイラー法により、式（８）に示す一階常微分方程式の一般式について解く方法について説明する。

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \quad \text{ただし、} y(x_0) = y_0 \tag{8}$$

ここで、刻み幅を h、初期値を x_0 および y_0 とし、式（９）のように x_1 と y_1 を近似して求める。これを順次 x_2、y_2、x_3、y_3…として、求めて行けばよい。

$$x_1 = x_0 + h, \quad y_1 = y_0 + f(x_0, y_0)h \tag{9}$$

自由落下の運動方程式をオイラー法で解く場合は､刻み幅 h は時刻の微小変化を意味し、順次この近似を解いていくことで物体の運動について時間的変化の過程を求めることができる。このとき、二階常微分方程式である式（６）を、式（１０）に示すように v と x に関する連立一階常微分方程式とする。

$$\frac{dv}{dt} = g$$
$$\frac{dx}{dt} = v \tag{10}$$

式（１０）に示す通り、自由落下運動では位置 x を時間 t で微分したものが速度 v であり、その速度 v をさらに時間 t で微分すると重力加速度 g となる（自由落下なので、g 以外の加速度成分は 0 である）。オイラー法について、具体的なアルゴリズムを以下に示す。

I. 各変数について、初期値を設定する。
   刻み幅：h（プログラム上では 0.01 などの具体的数値を代入する）
   速度の初期値：v_0（プログラム上では 0 などの具体的数値を代入する）
   位置の初期値：x_0（プログラム上では 100.0 などの具体的数値を代入する）
   （重力加速度: g =9.80665 のようにする。これは定数であり変更されない）

II. オイラー法により、次のステップ（刻み幅 h だけ進んだ時刻）での物体の速度 v_1 を求める。

$$v_1 = v_0 + g \cdot h$$

III. オイラー法により、次のステップでの物体の位置 x_1 を求める。（物体は落下するので、速度の向きをマイナス、すなわち下方向にしている）

$$x_1 = x_0 - v_1 \cdot h$$

IV. 上記のⅡとⅢで求めた v_1、x_1 を用い、同様に v_2、x_2 を求める。

$$v_2 = v_1 + g \cdot h$$
$$x_2 = x_1 - v_2 \cdot h$$

V. 以下同様に、v_i、x_i から v_{i+1}、x_{i+1} を順次求める。

$$v_{i+1} = v_i + g \cdot h$$
$$x_{i+1} = x_i - v_{i+1} \cdot h$$

VI. 適当な終了時刻まで繰り返し演算を行う。