

筑波大学 応用理工学類

応用物理主専攻・電子量子工学主専攻 3年次

「計算機実習」

筑波大学大学院 電子・物理工学専攻
佐野 伸行
Office: 3M 405
e-mail: sano@esys.tsukuba.ac.jp

Memorandum

はじめに

本講義は、応用物理主専攻および電子・量子工学主専攻を対象とした専門科目（選択）である。尚、他専攻の学生も、許容人数内であれば受講を認めるので、希望者は講義担当者まで事前に連絡をすること。

講義の概要

数値計算における数値誤差の基礎を学んだ上で、基本的な数値計算手法について、実際にプログラミングを行いながら実習形式で学ぶ。

講義で使うテキストおよびサンプルプログラムは、以下のアドレスにポストしておく。テキストは必ず**講義前にダウンロード**して、内容を予習しておくこと。

<http://hermes.esys.tsukuba.ac.jp/~sano/NumCompEx/>

受講するうえでの注意

- ・ 講義の形態は、はじめの 15 分程度で内容を計算機室（3D207）で講義し、後半 60 分はテキストにある課題を実習する。
- ・ はじめに行う講義の部分（ブリーフィング）は重要なので必ず出席すること。
- ・ 課題が講義時間内に終わらなかった場合は、**次回の講義開始時刻までの宿題**とする。
- ・ 課題レポートおよびプロジェクトレポートは、全て Word と Excel（或いは LaTeX と Gnuplot 等）で作成して、pdf ファイルに変換してメールに添付して提出すること。
- ・ 課題レポートは、**各課題番号ごとに** 電子メールで以下のアドレスに送ること。

numcompex@hermes.esys.tsukuba.ac.jp

Subject の記載例： s2015xxxxx_1 ← 学籍番号_講義番号

成績の評価

成績評価は、実習課題（80%）と出席点（20%）で行う。

課題を行う手順

実習課題を行うにあたって最低限必要となる具体的手順を、ここにまとめておく。まずは、この手順で操作し、プログラムを実行することができることを確かめよ。

1. Windows にログインして、/ドキュメント/cygwinHome/に新しいフォルダー cprog を作成する。
2. 講義用ホームページにポストされているサンプルプログラムを、作成したフォルダー cprog にダウンロードする。

cygwin を起動してプログラムを実行する

- ・ `pwd` と打って、自分がいるディレクトリ（フォルダー）を確認する。
- ・ `cd cprog` と打って、cprog というディレクトリに移動する。
- ・ `ls` と打って、cprog の中に存在するファイルを見る。
- ・ `gcc overflow.c -lm` と打って、サンプルプログラム limit.c をコンパイルする。
- ・ `ls` と打って、cprog の中に新たに a.exe という実行ファイルができていることを確認する。
- ・ `./a.exe` と打って、実行ファイル a.exe を実行する。

terapad でプログラムを修正する

- ・ Windows のスタート/すべてのプログラムから、**terapad** を起動する。
- ・ サンプルプログラム limit.c を **terapad** で開き、**別名の limit2.c で保存**する。
- ・ 保存したプログラム limit2.c のパラメータ N の数字を変えて、再度、保存する。
- ・ cygwin でプログラム limit2.c をコンパイルして、実行する。

目次

1	計算機上の数の表現	7
1.1	計算機上の数の表現、オーバーフローとアンダーフロー	7
1.2	計算機イプシロン	9
2	数値計算における誤差 I	11
2.1	丸め誤差	11
2.2	桁落ち	12
3	数値計算における誤差 II	13
3.1	公式誤差（打ち切り誤差）	13
4	数値微分 I	15
4.1	数値微分（1階微分）の差分公式	15
4.2	高次の差分公式	17
5	数値微分 II	19
5.1	数値誤差のせめぎ合い	19
5.2	差分公式の幾何学的意味とその導出	21
6	数値積分 I	23
6.1	数値積分の基礎：リーマン近似	23
6.2	台形公式とシンプソン公式	24
7	数値積分 II	27
7.1	無限区間の積分	27
7.2	特異性のある積分	29
8	非線形方程式の解法 I	31
8.1	二分法	31
9	非線形方程式の解法 II	33
9.1	ニュートン法（Newton-Raphson method）	33
10	微分方程式の解法 I	35
10.1	常微分方程式の解法：陽解法	35
10.2	2階の線形微分方程式	36
11	微分方程式の解法 II	39
11.1	数値解の収束性と誤差	39
11.2	2階微分方程式：自明ではない境界条件と数値誤差	40
12	モンテカルロ法 I	43
12.1	モンテカルロ法の基礎	43

目 次	6
13 モンテカルロ法 II	45
13.1 重み関数を用いたモンテカルロ法	45
13.2 特定の分布をもつ乱数の生成	46
14 PROJECT (物理からの応用問題)	49
14.1 物理的背景：2 原子分子の振動運動	49
14.2 数値解析の基本アルゴリズム	50

1 計算機上の数の表現

コンピュータで扱う数は常に有限である。デジタルな情報を蓄えるデバイスの数は有限であるから、無限桁数の数値を扱うことはできない。従って、数値計算の精度を考察するうえで、コンピュータ上に実際に記憶される数の表現方法を理解することは非常に重要である。

また、コンピュータの（有限桁数しか扱えないという）技術的な問題に伴った、数値計算上の誤差についての知識をもつことは、次章で扱う（技術的ではなくて数学に起因する）数式上の誤差（公式誤差あるいは打ち切り誤差）との関係から、計算結果の有効性を判断するうえで致命的に重要になる。

そこで本章と次章では、コンピュータにおける数の表現とそれに伴ったさまざまな技術的な数値誤差について学習する。

1.1 計算機上の数の表現、オーバーフローとアンダーフロー

コンピュータ内部で数を表す方法はいろいろとあるが、ここでは最も一般的な **IEEE 754 規格** と呼ばれている規格に沿った表現方法を（講義で）紹介しよう。

計算機のメモリの記憶単位は、0 と 1 という 2 個の数字だけ（二進数）で表現する。この単位をビット (bit) と呼ぶ。また、ひとつの数を記憶するのにかつて使われていたビットの数をワード数といい、バイト (byte) 単位で表現する。このとき、

$$1 \text{ byte} = 1 \text{ B} = 8 \text{ bits} \quad (1)$$

である。古いコンピュータでは、かつて 8 ビットのワード数を用いており、その場合、表現できる整数の最大値は、 $2^7 = 128$ であった（1 ビットは符号に割り当てる）。現在では、4 バイト = 32 ビットを用いて数表現することから、整数に関しては $2^{31} = 2147483648$ とおりの数を表すことができる。また、浮動小数点の形で単精度（32 ビット）で実数を表現した場合は、指数部 8 ビットと仮数部 24 ビットを用いて実数を表現することになる。

いずれにしても、コンピュータでは有限のビット数で数表現することから、計算機上で扱える数には有限の範囲、つまり上限と下限が存在する。この範囲を超えた数をコンピュータが扱おうとすると、オーバーフローあるいはアンダーフローが起きる。

使用しているコンピュータがどのような限界を持っているか、サンプルプログラム (overflow.c) を用いて、オーバーフローおよびアンダーフローについて調べてみよう。

サンプルプログラム (overflow.c) を実行するには、プログラムをコンパイル（機械語に翻訳）して、実行可能なファイルを作成する必要がある。具体的には、

```
gcc overflow.c -lm -o overflow
```

と打つことで、実行ファイル (overflow あるいは、overflow.exe) が生成される。ここで、-lm は数学ライブラリとのリンクを意味し、コンパイラに用意されている様々な数学関数を利用することが可能になる（今後、数学ライブラリを用いることが多いため、常にリンクするようにすること）。また、-o は実行ファイル名を指定するためのオプションであり、この場合では、実行ファイルは overflow あるいは overflow.exe となる。ファイル名を指定しない場合（-o 以下を省いた場合）は、実行ファイルは a.exe となる。次に、

```
./overflow
```

とすれば、プログラム (overflow.c) を実行することができる。

Problem 1-1

まずは、サンプルプログラム (overflow.c) の内容を理解せよ (不明なところがある場合は、TA に積極的に質問すること)。

(1) サンプルプログラム (overflow.c) の内容 (何をどのようにやっているか) を簡単に説明せよ。

(2) 繰り返し数を表すパラメータ N の値をいろいろと変えて、単精度の浮動小数点を用いた場合のオーバーフローおよびアンダーフローが起きるときの N の値を求めよ。コンピュータからの出力結果もレポートに添付すること。

プログラムを修正して、倍精度の浮動小数点を用いて計算できるようにしよう (修正方法がわからない場合は TA に聞くこと)。

(3) 倍精度の浮動小数点を用いて、オーバーフローおよびアンダーフローが起きるときの N の値を求めよ。コンピュータからの出力は (膨大になってしまうので) レポートに添付する必要はない。

Note: N の値が小さいときは、オーバーフローおよびアンダーフローが起きないし、むやみに大きくするとデータファイルのサイズが膨大になり、計算 (出力) が遅くなることに注意せよ。

1.2 計算機イプシロン

コンピュータで扱える数には有限の範囲があることから、コンピュータでの数値計算の精度は必ず有限になってしまう。実際、1ワードが32ビットのマシンで単精度で計算した場合の有効桁数は7~8桁であるし、倍精度を用いた場合ならば15~16桁が有効な精度になる。このような精度をマシン精度 (machine precision) という。

そこで、コンピュータに1として記憶させた数にある小さい数 ε を加算しても、この1の値が変化しないような最大値 ε_m を計算機イプシロンとして、使用しているコンピュータのマシン精度と定義しよう。つまり、 1_c をコンピュータに記憶される1という数字としたとき、

$$1_c + \varepsilon_m = 1_c \quad (2)$$

を満たす最大の ε_m を計算機イプシロンとするわけである。

以下の問題でサンプルプログラム (limit.c) を用いて、使用しているコンピュータの計算機イプシロンを実際に求めてみよう。

Problem 1-2

サンプルプログラム (limit.c) の内容を理解せよ。

- (1) サンプルプログラム (limit.c) の内容 (何をどのようにやっているか) を簡単に説明せよ。
- (2) 単精度の浮動小数点を用いた場合の計算機イプシロン ε_m を求めよ。計算出力をレポートに添付すること。
- (3) 倍精度の浮動小数点を用いて計算するようにサンプルプログラム (limit.c) を修正せよ。修正したプログラムをレポートに添付すること。
- (4) 倍精度の浮動小数点を用いた場合の計算機イプシロン ε_m を求めよ。計算出力をレポートに添付すること (ただし、紙の無駄になるので、あまり大きな N を用いないこと)。

Note: 繰り返し数を表すパラメータ N の値をいろいろと調整する必要があることに注意せよ。

Memorandum

2 数値計算における誤差 I

2.1 丸め誤差

コンピュータのもつ有限の計算機イプシロンのせいで、数値計算上で避けられない誤差が生じてしまう。その代表的なものが丸め誤差 (round-off error) と桁落ち (cancelling) と呼ばれるものである。

Napier 数 e の定義を用いて、丸め誤差 (round-off error) を考察しよう。

Napier 数 e の定義

$$e = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n \quad (3)$$

に従って、 e の値をコンピュータを用いて計算する。

計算機イプシロンを考慮したとき、十分に大きなある n に対する計算機内での式 (3) の値は、

$$e \approx \left(1 + \frac{1}{n} + \epsilon_m\right)^n \quad (4)$$

と表されるであろう。ここで、 ϵ_m は計算機の持つ有効桁数に伴った誤差 (計算機イプシロン) を表す。二項定理を用いて展開すれば、

$$\left(1 + \frac{1}{n} + \epsilon_m\right)^n = \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n + n\epsilon_m \left(1 + \frac{1}{n}\right)^{n-1} + \dots \quad (5)$$

となる。もし n が十分に大きければ、第二項の $\left(1 + \frac{1}{n}\right)^{n-1}$ は $\left(1 + \frac{1}{n}\right)^n$ に近くなるので、

$$\left(1 + \frac{1}{n} + \epsilon_m\right)^n \approx \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n (1 + n\epsilon_m) \quad (6)$$

と書ける。従って、計算機イプシロンに伴った相対誤差は $n\epsilon_m$ の程度となる。

倍精度浮動小数で e を計算した場合、有効桁数は 15~16 桁であるから、 $\epsilon_m = 10^{-17}$, $n = 10^9$ とすれば、相対誤差は $n\epsilon_m \sim 10^{-8}$ の程度と見積もられる。つまり、倍精度で計算を実行したとしても、場合によっては、**有効桁数の半分程度の精度しか期待できない (!)** ことになるのである。

以下の課題で、実際に Napier 数 e をサンプルプログラム (roundoff.c) を用いて数値計算し、丸め誤差を実感してみよう。

Problem 2-1

サンプルプログラム (roundoff.c) の内容を理解せよ。

(1) サンプルプログラム (roundoff.c) の内容 (何をどのようにやっているか) を簡単に説明せよ。

(2) Napier 数 e の定義式 (3) を用いて、以下の 8 通りの n の値、

$$n = 10, 100, 1,000, 10,000, 100,000, 1,000,000, 10,000,000, 100,000,000$$

の場合について、サンプルプログラム (roundoff.c) を用いて Napier 数 e を計算せよ。尚、サンプルプログラムは単精度の浮動小数点を用いていることに注意せよ。

(3) 本文中の議論で見積もった相対誤差と計算結果の整合性について考察せよ。その際、前回の実習で求めた計算機イプシロンの値を用いて考察すること。

2.2 桁落ち

非常に近い二つの数の差を計算するような場合、丸め誤差 (round-off error) に伴って有効桁数が大幅に小さくなってしまう場合がある。

例えば、 $h = 0.123456789 \times 10^{-3}$ として、二つの非常に近い値 $x_1 = a + h$ と $x_2 = a$ との差 $x_1 - x_2$ を考えてみよう。単精度浮動小数で計算する場合、 a および h の有効桁数は 7~8 桁である (ここでは、この桁数を少し上回る桁数まで h の値を与えておく)。 a を 1 のオーダーの数であったとすれば、 $x_1 - x_2$ をコンピュータで実際に計算すると、丸め誤差により、

$$h = x_1 - x_2 = 0.123 \times 10^{-3} \quad (7)$$

程度となる。つまり、 h の有効桁数が僅か 3 桁となり、5 桁程度も失われてしまう。これが桁落ち (cancelling) と呼ばれる誤差である。

以下の課題で、実際に単精度の浮動小数点を用いたサンプルプログラム (cancelling.c) を用いて数値計算し、桁落ちを実感してみよう。

Problem 2-2

サンプルプログラム (cancelling.c) の内容を理解せよ。

- (1) サンプルプログラム (cancelling.c) の内容 (何をどのようにやっているか) を簡単に説明せよ。
- (2) 反復数のパラメータ N の値を適当に設定して、プログラム (cancelling.c) を実行せよ。出力結果をレポートに添付せよ。そのうえで、どのように桁落ちが起きているかを考察せよ。
- (3) 同様の計算を倍精度の浮動小数点を用いて実行できるようにプログラムを修正せよ。修正したプログラムをレポートに添付すること。
- (4) 反復数のパラメータ N の値を適当に設定して、修正したプログラムを実行せよ。出力結果をレポートに添付せよ。

Note: このサンプルプログラム (cancelling.c) は、関数 $f(x) = x$ の点 $x = a$ における微係数を、次章で学習する微分の差分公式により求めることに対応している。

3 数値計算における誤差 II

3.1 公式誤差（打ち切り誤差）

これまで見てきた数値計算上の誤差は、全てコンピュータのもつ技術的な制限（つまり、計算機のもつ有限の有効桁数）から来る誤差に関わったものであった。一方、数学自体と密接に関係した誤差もある。例えば、無限に続く級数の和を取るときや極限をとる場合、実際の計算上で有限の和や値で打ち切ったことによって生じる誤差などである。これが、公式誤差あるいは打ち切り誤差（truncation error）と呼ばれるものである。

例題として、以下の（有名な）級数を考えよう。

$$\zeta(2) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} \quad (8)$$

ここで、 $\zeta(2)$ は Riemann の zeta 関数と呼ばれるもので、その真の値は、 $\zeta(2) = \pi^2/6$ となることが知られている。今、級数における和を有限の数 N で打ち切った場合の絶対誤差を ε_t とすれば、

$$\varepsilon_t = \left| \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} - \sum_{k=1}^N \frac{1}{k^2} \right| = \sum_{k=N+1}^{\infty} \frac{1}{k^2} \quad (9)$$

で与えられる。一方、

$$\frac{1}{k} - \frac{1}{k+1} = \frac{1}{k(k+1)} < \frac{1}{k^2} < \frac{1}{k(k-1)} = \frac{1}{k-1} - \frac{1}{k} \quad (10)$$

を用いれば、

$$\frac{1}{N+1} < \varepsilon_t < \frac{1}{N} \quad (11)$$

となる。つまり、この例題の場合の打ち切り誤差は、 $\varepsilon_t \sim 1/N$ の程度で与えられることがわかる。

一方、計算機イプシロンを ε_m とすれば、 N 項までの和を式 (8) に従って取った場合、第 N 項の絶対値が計算機イプシロン ε_m に等しくなったときに桁落ちが生じる。つまり、 $1/N^2 = \varepsilon_m$ のときである。従って、 $N < 1/\sqrt{\varepsilon_m}$ の領域では、桁落ちよりも打ち切りによる誤差が支配的になる。一方、 $N > 1/\sqrt{\varepsilon_m}$ では桁落ちによる誤差が支配的となり、 N 以上の項の和を取ることは、（桁落ちによって）計算機では表現できない数を足し上げていくことを意味する。

このように、無限にわたる和をコンピュータで扱う場合には、計算機独自の桁落ち、あるいは、丸め誤差と数式上の打ち切り誤差との兼ね合いを十分に考慮することが重要になってくる。

単精度の浮動小数点を用いたサンプルプログラム（truncation.c）を用いて、以下の課題で打ち切り誤差と桁落ちによる誤差の関係を考察しよう。

Problem 3-3

サンプルプログラム (truncation.c) を読んで、プログラムの内容を理解せよ。

- (1) 反復数のパラメータ N の値を適当に設定して、プログラム (truncation.c) を実行せよ (N が大き過ぎると計算は終了しないことに注意)。計算結果の出力をレポートに添付せよ。
- (2) 本文の解説を参考にして、打ち切り誤差と桁落ちによる誤差の関係に基づいて、計算結果を考察せよ。

横軸を N 、縦軸を誤差としてグラフに表すとよい。

- (3) プログラム (truncation.c) を倍精度浮動小数を用いた計算プログラムに修正せよ。修正したプログラムをレポートに添付せよ。
- (4) 修正したプログラムを実行せよ。計算結果の出力をレポートに添付すること。数値計算がどのように改善されたか、明確にすること。

4 数値微分 I

数値微分、数値積分、方程式の数値解法の3つは、物理的問題を計算機で取り扱うときに欠かせない基本的な演算である。

このような基本的な演算によって数値解を求めるということは、殆どの場合、近似解を求めることと等価である。つまり、連続の x について定義される関数 $f(x)$ を離散的な値 x_i での関数値 $f(x_i)$ で近似し、方程式を差分方程式に置き換えることになる。勿論、離散的な値 x_i の間隔が狭まれば、厳密な連続的な関数 $f(x)$ に近づく。しかしながら、計算機からくる制約によって、この間隔を任意に狭くすることはできない。従って、単純に数値計算の値を鵜呑みにすることなく、その適用限界を常に意識することが重要になる。

このような数値解析の制約が顕著に見えてくるのが、本章と次章で扱う数値微分である。本章では、関数の微分係数を数値的に計算する方法を学ぶ。

4.1 数値微分（1階微分）の差分公式

関数 $f(x)$ が与えられたとき、 $x = 0$ における導関数 $f'(0)$ を求めたいとしよう。

導関数 $f'(0)$ に対するさまざまな差分公式は、関数 $f(x)$ を原点近傍 $x \approx 0$ で Taylor 展開することにより導くことができる。

いま、 x 軸上での等間隔ごとの関数 $f(x)$ の値がわかっているものとしよう。つまり、

$$f_n = f(x_n); \quad x_n = nh \quad (n = \dots, -2, -1, 0, +1, +2, \dots)$$

の値が既知とする（図1参照）。そこで、 $x = 0$ における導関数 $f'(0)$ を f_n を用いて表わすことを考える。 $f(x)$ を $x = 0$ の近傍で Taylor 展開すれば、

$$f(x) = f(0) + x f'(0) + \frac{x^2}{2!} f''(0) + \frac{x^3}{3!} f'''(0) + \dots \quad (12)$$

うえの式において、 $x = \pm h$ とすれば、

$$f_{\pm 1} \equiv f(\pm h) = f(0) \pm h f'(0) + \frac{h^2}{2} f''(0) \pm \frac{h^3}{6} f'''(0) + O(h^4)$$

ここで、 $O(h^4)$ は h^4 以上の高次の項を表わす記号で、ビッグオーと読む。

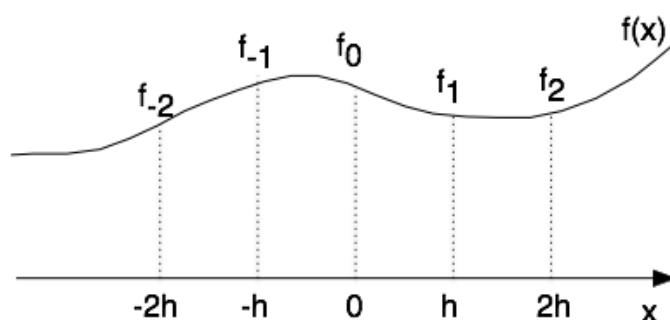
2点公式

うえの式から、 f_0 および $f_{\pm 1}$ の2点を用いることにより、導関数 $f'(0)$ を近似することを考える。この場合の2点公式（2-point formula）は、 h について2次以上の項を無視することにより、以下のように定義される。

$$f'(0) = \frac{f_1 - f_0}{h} + O(h) \quad (\text{前進2点公式}) \quad (13)$$

$$f'(0) = \frac{f_0 - f_{-1}}{h} + O(h) \quad (\text{後退2点公式}) \quad (14)$$

これらの2点公式は、 $f(x)$ を区間 $[0, \pm h]$ において線形で近似することに対応している。

図 1: 関数 $f(x)$ の離散化

2点公式用いた場合の誤差は $O(h)$ のオーダーであり、刻み幅の減少とともに、それに比例して減少することを意味している。

任意の位置における差分公式

任意の位置 $x = a$ における導関数 $f'(a)$ を求めるには、うえの議論における x を a だけ平行移動すれば良い。

$f(x)$ を $x = a$ の近傍で Taylor 展開すれば、

$$f(x) = f(a) + (x - a) f'(a) + \frac{(x - a)^2}{2!} f''(a) + \frac{(x - a)^3}{3!} f'''(a) + \dots$$

ここで、新しい座標 x' を $x' = x - a$ とすれば、うえの展開式は $f(x)$ の $x = 0$ の近傍での Taylor 展開式と一致する。従って、任意の場所 $x = a$ における導関数 $f'(a)$ を求めるためには、うえで求めたすべての公式において、

$$f_0 \rightarrow f(a), \quad f_{\pm 1} \rightarrow f(a \pm h), \quad \dots$$

と読み代えてやれば良い。

2点公式を用いて微分を計算するサンプルプログラム (diff.c) を用いて、刻み幅 h の減少とともに誤差がそれに比例して減少することを確認しよう。

Problem 4-1

サンプルプログラム (diff.c) の内容を理解せよ。

(1) つぎの関数

$$f(x) = \tan x$$

に対して、 $f'(x = 1.0)$ の値を 2 点公式 (前進および後退) を用いて評価せよ。刻み幅 h は、

$$h = 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001, 0.00001, 0.000001, 0.0000001, \\ 0.00000001, 0.000000001, 0.0000000001$$

の 10 通りの値に設定せよ。

(2) 刻み幅 h の減少とともに絶対誤差がそれに比例して減少することを確認せよ。

(3) $f'(x = 1.0)$ に対する厳密値との絶対誤差から、計算精度が $O(h)$ に応じて減少せずに崩れてくるときの刻み幅 h の値を求めよ。

(4) x の値を変えて、絶対誤差がどのように変化するか調べよ ($x = \pi/2$ で発散してしまうことに注意せよ)。いくつかの計算結果とともに考察を与えること。

4.2 高次の差分公式**3 点公式 (中心差分公式)**

導関数 $f'(0)$ を f_1 と f_{-1} を使って表わすと、

$$f_1 - f_{-1} = 2hf'(0) + \frac{h^3}{3}f'''(0) + O(h^4)$$

である。従って、

$$f'(0) = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} - \frac{h^2}{6}f'''(0) + O(h^3)$$

となる。2 次の項はキャンセルしていることに注意せよ。もし間隔 h が十分に小さいならば、上式の第 2 項以降は無視できるであろう。結局、 $x = 0$ における導関数 $f'(0)$ は、以下の公式で与えられることになる。

$$f'(0) = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} + O(h^2) \quad (15)$$

これを 3 点公式 (3-point formula) あるいは、中心差分公式という。

一般に、間隔 h を小さくすればするほど精度は (原理的には!) 高くなる。もし関数 $f(x)$ が二次までの多項式で与えられるならば 3 点公式は厳密になる。言い換えれば、3 点公式は、3 点 $x = \pm h, 0$ の関数値をもとにした 2 次多項式で関数 $f(x)$ を近似することを意味する。

3 点公式よりもさらに精度を上げるためには、 $x = 0$ からさらに離れた点における関数値 (例えば、 $f_{\pm 2}$) を用いて、導関数 $f'(0)$ を近似すれば良い。

5 点公式

Taylor 展開の式 (12) において、 $x = \pm 2h$ とすれば、以下の式を得る。

$$f_{\pm 2} \equiv f(\pm 2h) = f(0) \pm 2hf'(0) + 2h^2f''(0) \pm \frac{4h^3}{3}f'''(0) + O(h^4)$$

3点公式を求めたときと全く同様の手順をふめば、

$$f_{-2} - f_2 = -4hf'(0) - \frac{8h^3}{3}f'''(0) + O(h^5)$$

$$8(f_1 - f_{-1}) = 16hf'(0) + \frac{8h^3}{3}f'''(0) + O(h^5)$$

であるから、以下のような5点公式 (5-point formula) を得る。

$$f'(0) = \frac{f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2}{12h} + O(h^4) \quad (16)$$

3次および4次の項がキャンセルしていることに注意せよ。

5点公式は、5点区間 $[-2h, 2h]$ における f の4次多項式の近似に基づいており、 h に関して3次のオーダーまで有効である。ただし、場合によって、5点公式は、3点公式に比べて各項の打ち消し合いの起きることが多いために、幅 h が大きいときにその精度に注意が特に必要になる。

Problem 4-2

- (1) サンプルプログラム (diff.c) を修正して、3点公式および5点公式を用いて、関数

$$f(x) = \tan x$$

に対しての $f'(x = 1.0)$ の値を評価せよ。修正したプログラム名を diff2.c とせよ。刻み幅 h は、

$$h = 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001, 0.00001, 0.000001, 0.0000001, \\ 0.00000001, 0.000000001, 0.0000000001$$

の10通りの値に設定せよ。

プログラムと出力結果をレポートに添付すること。

- (2) 刻み幅 h の減少とともに絶対誤差が $O(h^2)$ あるいは $O(h^4)$ に応じて減少することを確認せよ。

- (3) $f'(x = 1.0)$ に対する厳密値との絶対誤差から、計算精度が崩れてくるときの刻み幅 h の値を、3点公式および5点公式に対して求めよ。

- (4) x の値を変えて、絶対誤差がどのように変化するか調べよ ($x = \pi/2$ で発散してしまうことに注意せよ)。いくつかの計算結果とともに考察を与えること。

5 数値微分 II

本章では、前章で扱ったさまざまな差分公式での数値誤差について考察する。特に、数値微分で見えてくる打ち切り誤差と丸め誤差のせめぎあいを体験しよう。

5.1 数値誤差のせめぎあい

差分公式で数値解析する際には、常に計算機に内在する丸め誤差が含まれる。

2点差分公式を例として、丸め誤差を含めたかたちで差分公式を書き表すと、

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x) + \varepsilon}{h} + O(h) \quad (17)$$

となる。ここで、 ε は計算機イプシロンに伴った丸め誤差である。 ε による誤差のオーダーをあからさまに書けば、

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O\left(\frac{\varepsilon}{h}\right) + O(h) \quad (18)$$

となる。従って、刻み幅 h による誤差と丸め誤差 ε/h のせめぎあいによって、全体の誤差が決まることになる。つまり、刻み幅 h が $h \approx \varepsilon/h$ のところで、両者の誤差が同程度となり、それよりも小さい刻み幅 h を用いると、丸め誤差によって数値誤差は増大することになる。

倍精度で計算した場合、 ε は $\varepsilon \approx 10^{-16}$ の程度であるから、刻み幅 h が

$$h \approx \varepsilon^{1/2} = 10^{-8}$$

あたりのところで計算精度は最高になる。ただし、 $f(x)$ が 1 の程度の場合であり、 $f(x)$ の値によって誤差が異なる。

Problem 5-1

(1) 指数関数

$$f(x) = e^x$$

に対して、 $f'(x=1.0)$ の値を 2 点公式（前進および後退）、3 点公式、5 点公式を用いて評価するプログラムを作成せよ。刻み幅 h は、

$$h = 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001, 0.00001, 0.000001, 0.0000001, \\ 0.00000001, 0.000000001, 0.0000000001$$

の 10 通りの値に設定せよ（前回作成した 2 種類のプログラム diff.c および diff2.c を修正して用いてよい）。

(2) $f'(x=1.0)$ に対する厳密値との絶対誤差から、計算精度が崩れてくるときの刻み幅 h の値を、2 点公式（前進および後退）、3 点公式および 5 点公式に対して、それぞれ求めよ。

(3) 本文で示したように、刻み幅 h による誤差と丸め誤差のせめぎあいによって見積もられる h の値を、2 点公式（前進および後退）、3 点公式および 5 点公式に対して、それぞれ求めよ。

そのうえで、(2) で求めた値と整合性が取れていることを示せ。

(4) x の値を変えて、絶対誤差がどのように変化するか調べよ（あまり大きい x では発散してしまうことに注意せよ）。いくつかの計算結果を添付するとともに、本文で述べた“相対誤差”についての考察を与えよ。

高次微分の差分公式

高次の微分に対する公式も、これまでの 1 階微分の場合と同様にして求めることができる。

テイラー展開の式 (12) を用いれば、

$$f_1 - 2f_0 + f_{-1} = h^2 f''(0) + O(h^4)$$

であるから、 $x = 0$ における二次の導関数 $f''(0)$ は、以下の公式で与えられる。

$$f''(0) = \frac{f_{-1} - 2f_0 + f_1}{h^2} + O(h^2) \quad (19)$$

計算機に伴った丸め誤差も含めたかたちで表せば、

$$f''(0) = \frac{f_{-1} - 2f_0 + f_1}{h^2} + O\left(\frac{\varepsilon}{h^2}\right) + O(h^2)$$

となるから、 $f(0) \approx 1$ とすれば、 $h^2 = \varepsilon/h^2$ のところで両者の誤差が同程度になる。つまり、 $h \approx \varepsilon^{1/4}$ で精度が最も良くなる。

一方、うえの公式は、一次の導関数に対する 3 点公式を用いて二次の導関数 $f''(0)$ を表したものと等価である。すなわち、メッシュ間隔を半分 $h/2$ に想定したうえで、3 点公式を 2 回用いることにより、二次の導関数 $f''(0)$ を得たものと同じになる。

$$\begin{aligned} f''(0) &= \frac{1}{h} \left\{ \frac{f_1 - f_0}{h} - \frac{f_0 - f_{-1}}{h} \right\} \\ &= \frac{f'_{1/2} - f'_{-1/2}}{h} \end{aligned}$$

このようなトリックは、メッシュを用いて高階の（偏あるいは常）微分方程式を解くことが必要な理工学の各分野で用いられる場合が多い。

Problem 5-2

(1) 関数

$$f(x) = \sin(x)$$

に対して、 $f''(x = 1.0)$ の値を 3 点公式、5 点公式を用いて評価するプログラムを作成せよ。刻み幅 h は、

$$h = 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001, 0.00001, 0.000001, 0.0000001, \\ 0.00000001, 0.000000001, 0.0000000001$$

の 10 通りの値に設定せよ（前回作成した 2 種類のプログラム `diff.c` および `diff2.c` を修正して用いてよい）。

(2) $f''(x=1.0)$ に対する厳密値との絶対誤差から、計算精度が崩れてくるときの刻み幅 h の値を、3 点公式および 5 点公式に対して、それぞれ求めよ。

(3) 本文で示したように、刻み幅 h による誤差と丸め誤差のせめぎあいによって見積もられる h の値を、3 点公式および 5 点公式に対して、それぞれ求めよ。そのうえで、(2) で求めた値と整合性が取れていることを示せ。

5.2 差分公式の幾何学的意味とその導出

これまでのセクションで求めた微分に対する差分公式は、かなり天下りの印象を受ける。そこで、より系統的に差分公式を導出することで、これらの差分公式の意味を理解しよう。

3 点公式の導出

関数 $f(x)$ が、 $x=0$ 近傍では、 x についての 2 次の多項式で近似できたと仮定する。

$$f(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2$$

ここで、 c_0, c_1, c_2 は定数である。 $x = \pm h, 0$ の 3 点での関数値がそれぞれ $f_{\pm 1}, f_0$ であるとすれば、これら既知の関数値を用いて、定数 c_0, c_1, c_2 を決めることができる。

$$\begin{aligned} f_0 &= f(x=0) = c_0 \\ f_1 &= f(x=h) = c_0 + c_1h + c_2h^2 \\ f_{-1} &= f(x=-h) = c_0 - c_1h + c_2h^2 \end{aligned}$$

これらを解くと、

$$c_0 = f_0, \quad c_1 = \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}, \quad c_2 = \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{2h^2}$$

となる。従って、関数 $f(x)$ は、 $x=0$ 近傍で以下のように近似される。

$$f(x) = f_0 + \frac{f_1 - f_{-1}}{2h}x + \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{2h^2}x^2$$

x について微分をすることで、以下のような 1 階微分と 2 階微分の 3 点公式を得る。

$$\begin{aligned} f'(0) &= \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} \\ f''(0) &= \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} \end{aligned}$$

即ち、3 点公式は、2 次曲線で $f(x)$ を近似することに対応していると言える。

5 点公式の導出

全く同様に、高次の微分公式も導くことができる。

例えば、5 点公式は、 $f(x)$ を 4 次曲線で近似することと等価である。そこで、

$$f(x) = c_0 + c_1x + c_2x^2 + c_3x^3 + c_4x^4$$

とおいて、この曲線が $f(x=0) = f_0$, $f(x=\pm h) = f_{\pm 1}$, $f(x=\pm 2h) = f_{\pm 2}$ を通ることから、

$$\begin{bmatrix} 2h & 4h^2 & 8h^3 & 16h^4 \\ h & h^2 & h^3 & h^4 \\ -h & h^2 & -h^3 & h^4 \\ -2h & 4h^2 & -8h^3 & 16h^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_2 - f_0 \\ f_1 - f_0 \\ f_{-1} - f_0 \\ f_{-2} - f_0 \end{bmatrix}$$

と表される。これを解いて、

$$\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ c_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{f_{-2}-8f_{-1}+8f_1-f_2}{12h} \\ -\frac{f_{-2}-16f_{-1}+30f_0-16f_1+f_2}{24h^2} \\ -\frac{f_{-2}-2f_{-1}+2f_1-2f_2}{12h^3} \\ \frac{f_{-2}-4f_{-1}+6f_0-4f_1+f_2}{24h^4} \end{bmatrix}$$

従って、 x について順次微分すれば、5 点公式を得ることができる。

例えば、1 階微分の 5 点公式はまえに導出したものと一致する。

$$f'(0) = c_1 = \frac{f_{-2} - 8f_{-1} + 8f_1 - f_2}{12h}$$

その他の高階微分の 5 点公式は以下のようになる。

$$f''(0) = 2c_2 = -\frac{f_{-2} - 16f_{-1} + 30f_0 - 16f_1 + f_2}{12h^2}$$

$$f'''(0) = 6c_3 = -\frac{f_{-2} - 2f_{-1} + 2f_1 - 2f_2}{2h^3}$$

$$f^{(4)}(0) = 24c_4 = \frac{f_{-2} - 4f_{-1} + 6f_0 - 4f_1 + f_2}{h^4}$$

Problem 5-3

$x = 0$ 近傍における関数 $f(x)$ を 3 次曲線で近似することにより、 $f_{\mp 1}, f_0, f_{\pm 1}, f_{\pm 2}$ を使って $f'''(0)$ の 4 点公式を導け。

Note: うえの複合記号の一方をもちいることにより、公式は 2 通り存在する。

6 数値積分 I

本章では、定積分を計算機で数値的に求める方法を学ぶ。多くの積分は解析的に求めることが困難であるから、数値積分がさまざまな場面で威力を発揮する。その意味からも、含まれる数値誤差を踏まえたうえで積分手法を理解しておくことは、実用上からも重要である。

6.1 数値積分の基礎：リーマン近似

ある関数 $f(x)$ の $a < x < b$ における定積分を求めるとしよう。

a, b のあいだを偶数個 N の等間隔の格子に分割したとする。つまり、

$$N = \frac{b-a}{h}$$

であり、 N は偶数である。そのうえで、求めたい定積分を以下のように変形する。

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^{a+2h} f(x)dx + \int_{a+2h}^{a+4h} f(x)dx + \cdots + \int_{b-2h}^b f(x)dx \quad (20)$$

ここで、各項の積分を被積分関数の中間値を高さとする長方形で近似（3点公式を使っていることに対応）すれば、

$$\int_{-h}^h f(x)dx = 2h \{f(0) + O(h^2)\} \quad (21)$$

と書けるから、式 (20) は、以下のように求めることができる。

$$\int_a^b f(x)dx = 2h \{f(a+h) + f(a+3h) + \cdots + f(b-3h) + f(b-h)\} + N \times O(h^3) \quad (22)$$

この公式は、積分の定義に基づいたリーマン近似和に基づいた方法であり、リーマン近似による積分公式と呼ばれる。

公式 (22) の各項に含まれる丸め誤差を ε とすれば、積分領域を $N/2 = (b-a)/2h$ 個に分割しているから、式 (22) の中括弧に含まれる丸め誤差は、

$$\frac{N}{2}\varepsilon = \frac{b-a}{2h}\varepsilon \sim O\left(\frac{\varepsilon}{h}\right)$$

と書ける。従って、テイラー展開による誤差 $N \times O(h^3) \approx O(h^2)$ と丸め誤差 $hO(\varepsilon/h) \approx O(\varepsilon)$ が同程度であるとすれば、 $h^2 \approx \varepsilon$ となつて、刻み幅 h の最適値は、おおよそ $h \sim \varepsilon^{1/2}$ 程度と見積もられる。

以下の課題で、期待される誤差と刻み幅 h の最適値を確かめてみよう。

Problem 6-1

以下の積分をリーマン近似公式を用いて評価しよう。

$$I = \int_0^1 dx \frac{1}{1+x^2}$$

- (1) 解析的に積分を計算して、厳密解を求めよ。
- (2) リーマン近似公式で I を単精度で求めるサンプルプログラム (riemann.c) の内容を理解したうえで、倍精度で I を求めるプログラムを riemann_double.c を作成せよ。そのうえで、単精度および倍精度で積分 I の値を求めよ。

- ・ 積分領域の刻み数 N は、 $N = 10, 100, 1,000, \dots, 100,000,000$ とすること。
- ・ 数値積分の値と厳密解との絶対誤差も同時に出力すること。
- ・ 倍精度のプログラムと全ての出力結果を実習レポートに添付すること。

Hint: 第2回で使用した打ち切り (公式) 誤差のサンプルプログラムを参考にするとよい。

- (3) 本文で示したように、積分領域の刻み幅 h による誤差と丸め誤差 ε のせめぎあいによって見積もられる最適な h の値と、数値積分に含まれる絶対誤差について、(2) で得られた数値計算の結果に基づいて考察を与えよ。

6.2 台形公式とシンプソン公式

リーマン近似による積分公式は、式 (20) に含まれる各積分項の近似をあげることで、より高精度な積分公式に容易に拡張することができる。

ここでは、そのなかで最も一般的な台形公式とシンプソン公式について学ぶ。

台形公式 (Trapezoidal formula)

式 (20) に含まれる以下の定積分

$$\int_{-h}^h f(x) dx$$

において、区間 $[-h, 0]$ と区間 $[0, h]$ での関数 $f(x)$ を、数値微分のところで求めた 2 点差分公式でおきかえてみる。区間 $[-h, 0]$ においては、

$$f(x) \approx f(0) + f'(0)x \approx f_0 + \frac{f_0 - f_{-1}}{h}x$$

となる。従って、

$$\int_{-h}^0 f(x) dx \approx \int_{-h}^0 dx \left[f_0 + \frac{f_0 - f_{-1}}{h}x \right] = \frac{h}{2} (f_{-1} + f_0)$$

区間 $[0, h]$ においても同様にして、

$$\int_0^h f(x) dx \approx \int_0^h dx \left[f_0 + \frac{f_1 - f_0}{h}x \right] = \frac{h}{2} (f_1 + f_0)$$

従って、区間 $[-h, h]$ に対しては、

$$\int_{-h}^h f(x) dx = \frac{h}{2} (f_{-1} + 2f_0 + f_1) + O(h^3) \quad (23)$$

を得る。この公式は台形公式 (trapezoidal formula) と呼ばれる。この公式の幾何学的意味を考えてみれば、何故、台形公式と呼ばれるのか、容易に理解できるであろう。

うえの公式で原点を順々にずらせば、式 (20) に対する積分公式が導かれる。具体的には、台形公式を用いた場合の式 (20) は、

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= \frac{h}{2} [f(a) + 2f(a+h) + f(a+2h)] + \frac{h}{2} [f(a+2h) + 2f(a+3h) + f(a+4h)] \\ &+ \cdots + \frac{h}{2} [f(b-2h) + 2f(b-h) + f(b)] + O(h^2) \\ &= \frac{h}{2} [f(a) + 2f(a+h) + 2f(a+2h) + \cdots + 2f(b-h) + f(b)] + O(h^2) \quad (24)\end{aligned}$$

で与えられることになる。項の係数が、他の項の係数 2 と異なっていることに注意せよ。

台形公式の精度のオーダーはリーマン近似の場合と同程度 ($O(h^2)$) であるが、 $f(x)$ を評価するサンプル点の数の違いで、若干精度が良くなっている。

シンプソン公式 (Simpson formula)

台形公式よりもさらに精度を上げるためには、 $f(x)$ に対する 1 階微分 f' と 2 階微分 f'' の差分式を用いることによって達成することのできる。1 階微分 f' と 2 階微分 f'' の差分式を用いると、

$$f(x) \approx f(0) + xf'(0) + \frac{x^2}{2!} f''(0) \approx f_0 + \frac{f_1 - f_{-1}}{2h} x + \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} x^2$$

と書ける。1 階微分 f' に対しては、台形公式の場合と異なり、3 点公式を用いていることに注意せよ。その結果、差分式は原点に対して対称になり、以下のように、奇数次の項はキャンセルしてしまう。

$$\begin{aligned}\int_{-h}^h f(x)dx &= \int_{-h}^h dx \left[f(0) + xf'(0) + \frac{x^2}{2!} f''(0) + \frac{x^3}{3!} f'''(0) + \cdots \right] \\ &= \int_{-h}^h dx \left[f(0) + \frac{x^2}{2!} f''(0) + \cdots \right] \\ &\approx \int_{-h}^h dx \left[f(0) + \frac{x^2}{2} \frac{f_1 - 2f_0 + f_{-1}}{h^2} \right]\end{aligned}$$

この式を区間 $[-h, h]$ において実際に積分すると、以下のようなシンプソン公式を得る。

$$\int_{-h}^h f(x)dx = \frac{h}{3} (f_{-1} + 4f_0 + f_1) + O(h^5) \quad (25)$$

この公式は、台形公式と殆ど変わらないように見えるが、台形公式に比べて、 h についてさらに 2 次も高精度になっている。

式 (20) の各積分項をシンプソン公式を用いて計算すれば、最終的に以下のような積分公式が得られる。

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3} [f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+2h) + 4f(a+3h) + \cdots + 4f(b-h) + f(b)] + O(h^4) \quad (26)$$

台形公式に比べて、各項の係数が若干複雑になっていることに注意せよ。

一般的注意

台形公式およびシンプソン公式に含まれる f の符号はすべて同符号である。その結果、これらの公式は、数値計算上、極めて安定になる。精度をさらにあげるためには高次の微分係数を用いれば良いと思われるが、その場合、公式に含まれる f の符号が正にも負にもなってしまう。その結果、各項の打ち消し合いがおきて桁落ち誤差が大きくなる。従って、差分公式の次数を上げて精度をあげるよりも、むしろ、丸め誤差に注意を払いつつ、刻み幅 h を小さくするほうが得策の場合が多い。

Problem 6-2

台形公式およびシンプソン公式を用いて、前回と同じ積分 I を評価しよう。

$$I = \int_0^1 dx \frac{1}{1+x^2}$$

(1) リーマン近似式のところで示したように、台形公式とシンプソン公式の両方に対して、積分領域の刻み幅 h による誤差と丸め誤差 ε のせめぎあいによって見積もられる最適な h の値を求めよ。

(2) リーマン近似式のプログラムを修正して、倍精度で I を台形公式およびシンプソン公式で求めるプログラムを作成せよ。その際、台形公式のプログラムを `trapezoidal.c`、シンプソン公式のプログラムを `simpson.c` とせよ。

- ・ 積分領域の刻み数 N は、 $N = 10, 100, 1,000, \dots, 100,000,000$ とすること。
- ・ 数値積分の値と厳密解との絶対誤差も同時に出力すること。
- ・ プログラムと出力結果を実習レポートに添付すること。

(3) (1) で見積もった最適な h の値と、数値積分に含まれる絶対誤差について、(2) で得られた数値計算の結果に基づいて考察を与えよ。

(4) 積分区間の上限の値をいろいろと変えて、数値計算の結果の誤差について考察を与えよ。(例えば、上限値を 10, 100, 1,000 としよ。)

7 数値積分 II

これまでの学習した積分公式は、積分区間が有限区間であったり、被積分関数が積分範囲において正則で被積分関数の発散の問題が起こらないことを暗に仮定していた。実際には、積分区間が無限、あるいは半無限にわたる場合も少なくない。このような場合は、ある適当な有限区間で積分区間を近似をする必要が出てくる。また、被積分関数に特異点が存在していても、有限の積分値を与えるものも少なくないことから、発散する積分領域を何らかの方法で対処する必要が出てくる。

そこで本章と次章では、積分区間が無限にわたる場合や被積分関数に特異性がある積分のいくつかの技術的対処方法について考察しよう。

7.1 無限区間の積分

例として、前回の実習課題の積分を無限領域に広げた、ガウス積分

$$I_G = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-x^2} dx \quad (27)$$

を考えよう（数値誤差が見やすくなるように積分値を規格化している）。

数値積分を実行するために、積分区間の上限を R で打ち切ったとする。このときの絶対誤差は

$$I_{err} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_R^{\infty} e^{-x^2} dx \quad (28)$$

で与えられるであろう。そこで、

$$x \geq R \Rightarrow x/R \geq 1$$

を用いて、誤差を示す積分値 I_{err} を、以下のように近似する。

$$I_{err} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_R^{\infty} e^{-x^2} dx \leq \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_R^{\infty} \frac{x}{R} e^{-x^2} dx = \frac{e^{-R^2}}{\sqrt{\pi} R} \quad (29)$$

絶対誤差を 10^{-6} 以内に収めようとすれば、積分区間の上限を $R \approx 3.5$ とすれば良い。実際、 $R = 3.5$ のとき、 $I_{err} \approx 0.7713467 \times 10^{-6}$ となる。

ガウス積分の場合には、被積分関数の減衰が速いため、積分区間の上限として、あまり大きな R を設定する必要はなかった。しかしながら、被積分関数がべきで減衰するような場合は、積分の収束が非常に遅いことから、正確な積分値を求めることが困難になる。このような場合は、積分変数を適当に選んで、より収束の速い積分に変換することで状況を改善できる場合がある。

例えば、以下のような実習課題で扱った広義積分

$$I_0 = \int_0^{\infty} \frac{dx}{1+x^2} \quad (30)$$

を考えよう。この積分の絶対誤差は、

$$I_R = \int_R^{\infty} \frac{dx}{1+x^2} \leq \int_R^{\infty} \frac{dx}{x^2} = \frac{1}{R} \quad (31)$$

と見積もることができる。従って、絶対誤差を 10^{-6} 以内で収めようとするれば、積分区間の上限は $R = 10^6$ となって、かなりの計算量が必要となる。

そこで、より収束の速い広義積分に変換するために、 $x = e^z$ として積分変数を変換しよう。このとき、式 (30) は、

$$I_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dz}{e^z + e^{-z}} = 2 \int_0^{\infty} \frac{dz}{e^z + e^{-z}} \quad (32)$$

と書ける。絶対誤差を見積もるために、

$$I_R = 2 \int_R^{\infty} \frac{dz}{e^z + e^{-z}} \leq 2 \int_R^{\infty} \frac{dz}{e^z} = 2e^{-R} \quad (33)$$

と近似する。 I_0 の絶対誤差を 10^{-6} 以下に抑えようと思った場合、積分の上限値 R は

$$R = \ln(2 \times 10^6) \approx 14.5$$

とすればよい。式 (31) から見積もられる式 (30) の単純な数値積分に比して、圧倒的に収束が速いことがわかる。

つぎの実習課題で、数値積分の収束性の違いを実際に体験しよう。

Problem 7-1 つぎの定積分に関して、以下の問いに答えよ。

$$I_0 = \int_0^{\infty} \frac{dx}{1+x^2}$$

- (1) 解析的に積分を計算して、厳密解を求めよ（積分領域に注意）。
- (2) 積分 I_0 をテキストで説明したように、つぎの二つの積分 I_{01} と I_{02} で近似しよう。

$$I_{01} = \int_0^R \frac{dx}{1+x^2},$$

$$I_{02} = 2 \int_0^R \frac{dz}{e^z + e^{-z}}$$

Problem 6-2 で作成したシンプソン公式のプログラムを修正して、積分 I_{01} と I_{02} を求めるプログラムをそれぞれ作成せよ。

- ・ 積分区間の刻み数 N は、 $N = 100,000$ に固定せよ。
 - ・ 積分区間の上限値 R は、 $R = 10, 100, 1,000, 10,000, 100,000, 1,000,000$ とせよ。
 - ・ 数値積分の値と厳密解との絶対誤差も同時に出力すること。
 - ・ 出力結果をプログラムとともに実習レポートに添付すること。
- (3) 上限値 R をいろいろと変化させて、積分値の精度がどのように振る舞うかを調べよ（この結果は実習レポートに添付する必要はない）。
 - (4) 数値積分に含まれる絶対誤差を調べると、上限値 R が増大するにつれて精度は高くなるが、ある値を超えると精度は急速に悪化することがわかる。前回のシンプソン公式についての誤差の考察を考慮して、この振る舞いについての説明を与えよ。

7.2 特異性のある積分

積分区間において、被積分関数に特異点が存在する場合は、これまでの積分公式をそのまま使うことはできない。このような場合は、発散する積分領域を何らかの方法で避ける必要が出てくる。

積分変数の変換

例として、積分変数を適当に変換することで、積分区間での被積分関数の発散を避けることができる場合もある。

以下のような広義積分を考えよう。

$$I_1 = \int_0^1 g(x)(1-x^2)^{-1/2} dx = \int_0^1 f(x) dx \quad (34)$$

ここで、 $g(x)$ は $x \in [0, 1]$ で正則であるとする。 $f(x=1) = \infty$ となることから、これまでの積分公式を使うことができない。そこで、 $t = (1-x)^{1/2}$ として、変数変換をすると、

$$I_1 = \int_0^1 g(1-t^2)2(2-t^2)^{-1/2} dt \quad (35)$$

となり、 $t \in [0, 1]$ において被積分関数は正則になり、これまでの積分公式を使うことができる。

積分区間の分割

つぎの積分

$$I_2 = \int_0^1 f(x) dx \quad (36)$$

において、 $x=0$ 近傍で被積分関数が $f(x) \rightarrow Cx^{-1/2}$ であったとする。このとき、 $f(x=0) = \infty$ となることから、やはり積分公式を使うことができない。そこで、以下のように積分区間を分割する。

$$I_2 = \int_0^h f(x) dx + \int_h^1 f(x) dx \quad (37)$$

ここで、 h は積分区間に比べて十分に小さいとする。第1項は、 $f(x)$ の $x=0$ 近傍での漸近形から、以下のように評価することができる。

$$\int_0^h f(x) dx \approx \int_0^h Cx^{-1/2} dx = \left[2Cx^{1/2} \right]_0^h = 2Ch^{1/2} \quad (38)$$

第2項は正則な被積分関数であるので、これまでの積分公式を用いて評価することができる。ただし、第2項は $h^{1/2}$ で刻み幅とともにゆっくりと減少することから、積分項に比べて、圧倒的に収束が遅い。従って、高精度な計算結果を得るのは難しい。

例題

以下に具体例をあげて、被積分関数に積分区域で特異性が存在する広義積分を実行してみよう。

$$I = \int_0^1 dx f(x) = \int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} \quad (39)$$

を考える。この厳密解は、

$$\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = [\arcsin x]_0^1 = \frac{\pi}{2} \quad (40)$$

である。

$x = 1$ で $f(x)$ は発散するから、 $x = 1$ 近傍で積分範囲を分割する。

$$I = \int_0^1 dx f(x) = \int_0^{1-h} dx f(x) + \int_{1-h}^1 dx f(x) \quad (41)$$

第1項は被積分関数が有限だから、これまでの積分公式を用いて求めることができる。シンプソン公式を用いれば、

$$\int_0^{1-h} dx f(x) = \frac{h}{3} [f(0) + 4f(h) + 2f(2h) + \cdots + 4f(1-2h) + f(1-h)] \quad (42)$$

第2項を評価するために、 $x = 1^-$ 近傍での $f(x)$ の漸近形を求める。

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{1+x} + \frac{1}{1-x} \right)^{1/2} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1-x}} \quad (43)$$

従って、 $t = 1 - x$ と変数変換して、

$$\int_{1-h}^1 dx f(x) \approx \int_0^h dt \frac{1}{\sqrt{2}} t^{-1/2} = \sqrt{2} h^{1/2} \quad (44)$$

最終的に、求める積分は、

$$I = \frac{h}{3} [f(0) + 4f(h) + 2f(2h) + \cdots + 4f(1-2h) + f(1-h)] + \sqrt{2} h^{1/2} \quad (45)$$

で与えられる。刻み幅 h が小さくなるにつれて、最後の被積分関数の発散に対応する項の寄与が緩やかに小さくなる（つまり、積分値へのこの項の寄与がなかなか小さくならない）ことに注意せよ。

Problem 7-2 発散する積分区間を分割することで、つぎの広義積分の積分値を求めよう。

$$I_3 = \int_0^1 dx f(x) = \int_0^1 dx x^{-2/3} (1-x)^{-1/3}$$

(1) 積分 I_3 は、ベータ関数 $B(x, y)$ を用いて表される。厳密解を求めよ。

(2) 被積分関数の発散を避けるために、積分 I_3 を次のように分割する。

$$\int_0^1 dx f(x) = \int_0^h dx f(x) + \int_h^{1-h} dx f(x) + \int_{1-h}^1 dx f(x)$$

積分区間の両端での積分値を解析的に求めるために、 $x = 0$ および $x = 1$ 近傍での被積分関数 $f(x)$ の近似式をそれぞれ求めよ。

そのうえで、積分区間の両端（右辺第1項と第3項）の積分値を求めよ。

(3) (2) の結果と、これまで作成したプログラムを参考にして、積分 I_3 をシンプソン公式を用いて求めるプログラムを作成せよ。

- ・積分領域の刻み数 N は、 $N = 10, 100, 1,000, \dots, 100,000,000$ とすること（計算時間は結構かかる！）。

- ・数値積分の値と厳密解との絶対誤差も同時に出力すること。

- ・出力結果を実習レポートに添付すること（プログラムを添付する必要はない）。

(4) 得られた計算結果の誤差について考察を与えよ。

8 非線形方程式の解法 I

関数 $f(x)$ が x についての複雑な関数であるときは、方程式 $f(x) = 0$ の解析的な解を求めることは一般には不可能である。そこで、本章では、関数 $f(x)$ が任意の x に対して評価が可能であると仮定したうえで、非線形方程式 $f(x_0) = 0$ の満たす数値解 x_0 を求めるための最も基本的な方法について紹介する。

8.1 二分法

方程式の数値解を求めるためのもっとも確実かつ単純な方法は、二分法（はさみうち法）と呼ばれるものである。

二分法のアルゴリズムは、以下のように簡単に纏めることができる。

1. 解の最初の試行値が、正確な解 x_0 よりも小さかったとする。この場合、次の試行値を少し大きい方へ進める。
2. もし f の符号が変われば、次の歩幅を半分にして x を逆方向に進める。
3. 最初に設定した精度に歩幅が到達するまでうえのステップを繰り返すことで、近似解を求める。

うえのアルゴリズムから明らかなように、歩幅が求める数値解の精度に対応する。最初の試行値が大きすぎた場合、解が存在せずに求める事ができない場合もある。この場合は、ある程度の探索の後に（例えば、 $f(x) = 0$ をグラフ化して解の値をだいたい想定しておく）、探索の方向を（うえの場合は、 x が小さい方向に）変えることにより、必ず解を求めることができる。

二分法のアルゴリズムは単純で、しかも、かなり高い確率で解を求めることができることから、最初に近似解を求める際に多用される。ただし、歩幅の大きさと解近傍での関数の変化の激しさによってはいくつかの解を見のがしてしまうこともあり、注意が必要である。

Problem 8-1 二分法を用いて、次の方程式を解くサンプルプログラム（nibun.c）を解読し、数値解を求めよう。

$$f(x) = x^4 + 3x - 5 = 0$$

- (1) $y = f(x)$ をプロットして、解のある領域を推定せよ。
- (2) 二分法を用いて、方程式 $f(x) = 0$ を解くプログラム（nibun.c）を理解したうえで、実数の数値解を求めよ（解が一つとは限らないことに注意せよ）。
 - ・ (1) の結果を用いて、初期値と刻み幅を決めよ。
 - ・ 反復数 n ごとに得られる数値解を書き出すこと。最大の反復数を 100 と設定せよ。
 - ・ 解の精度は 10^{-10} とせよ。
- (3) 初期値をいろいろと変えて、二分法により解を求めることができることを試せ（この結果をレポートに添付する必要はない）。

Memorandum

9 非線形方程式の解法 II

9.1 ニュートン法 (Newton-Raphson method)

ニュートン法

二分法よりも解を求める効率性を高めたものがニュートン法である。ただし、関数 f の導関数 $f'(x)$ が任意の x について解析的に計算できることが必要になる。

いま、方程式 $f(x_0) = 0$ の解 x_0 の近くで、関数 f が線形であると仮定する。そのうえで、 $x = x^i$ での導関数 $f'(x^i)$ が解析的に計算することができると仮定する。一方、差分近似を用いれば、この導関数 $f'(x^i)$ は、

$$f'(x^i) \approx \frac{f(x^{i+1}) - f(x^i)}{x^{i+1} - x^i}$$

と近似できる。常に、 $f(x^{i+1}) = 0$ と仮定すれば (図 2 参照)、即ち、導関数の差分式に用いられる x 座標の一方 (ここでは、 x^{i+1}) が常に $y = 0$ との交点であると仮定すれば、求めるニュートン法による公式は以下のように与えられる。

$$x^{i+1} = x^i - \frac{f(x^i)}{f'(x^i)} \quad (46)$$

具体的には、解の最初の試行 (推定) 値を x^0 として、うへの公式を用いて x^1 を求める。これを順次くり返すことにより、 $f(x) = 0$ の数値解を速い収束性のもとで求めることができる。通常、

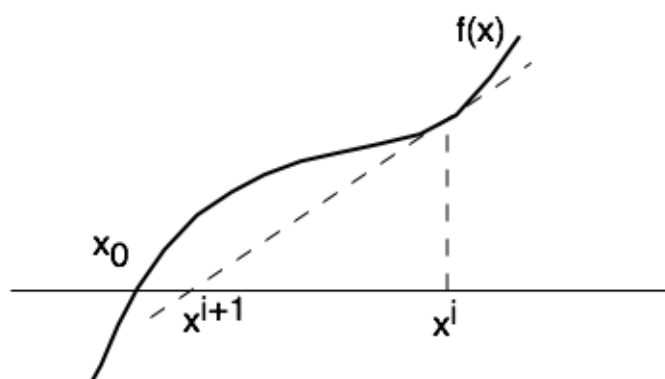


図 2: ニュートン法の幾何学的な意味。

計算機の平方根に対する組み込み演算は、このアルゴリズムを用いている。

ただし、解近傍で導関数がゼロに近づく場合、つまり解近傍で関数 $f(x)$ が極値をもつ場合は、公式からわかるように発散してしまい、解を求めることが困難になる。

セカント法 (Secant method)

ニュートン法では、導関数 $f'(x)$ が解析的に計算できることが前提であった。そこで、ニュートン法に含まれる導関数を、差分近似

$$f'(x^i) \approx \frac{f(x^i) - f(x^{i-1})}{x^i - x^{i-1}}$$

でおきかえたものをセカント (Secant) 法という。

うえの差分近似をニュートン法に対する公式に用いれば、

$$x^{i+1} = x^i - f(x^i) \frac{x^i - x^{i-1}}{f(x^i) - f(x^{i-1})} \quad (47)$$

となる。ただし、この公式を用いるためには、2点 x^i, x^{i-1} での関数値が必要になる。従って、最初の試行値としては x^0 および x^1 を設定する必要がある。

一般に、最初の試行 (推定) 値の設定が真の解に十分近くない場合は、ニュートン法と同様にセカント法は収束性がかなり悪い。導関数を2点間で線形近似しているのであるから、この2点が十分に近い必要があるのは、容易に推測できる。つまり、この2点で関数が複雑な形状 (導関数が符号も含めて大きく変わる性質) をもっていれば、殆ど収束させるのは不可能であろう。そこで、まず二分法を使って近似解を求め、つぎに、ニュートン法やセカント法によって精度をあげていくという方法が一般的である。

Problem 9-1 ニュートン法およびセカント法を用いて、次の方程式を解くプログラムを作成し、数値解を求めよう。

$$f(x) = x^4 + 3x - 5 = 0$$

(1) ニュートン法を用いて、方程式 $f(x) = 0$ を解くサンプルプログラム (newton.c) を理解したうえで、実数の数値解を**すべて**求めてみよ。

- ・前問の $y = f(x)$ のグラフを参考にして、初期値を決めよ。
- ・反復数 n ごとに得られる数値解を書き出すこと。最大の反復数を 100 と設定せよ。
- ・解の精度は 10^{-10} とせよ。
- ・二分法に比べて、圧倒的に収束が早い (二乗収束する) ことを実感せよ。

(2) ニュートン法のプログラムを修正して、セカント法により実数解を求めるプログラム (secant.c) を各自作成し、数値解を求めよ。

10 微分方程式の解法 I

10.1 常微分方程式の解法：陽解法

物理学における基本法則の多くは、微分方程式で定式化される場合が多い。従って、物理的現象をモデル化するためには、微分方程式の数値解を求める作業が重要になる。本章では常微分方程式の数値解を求める代表的な方法について学習する。

常微分方程式は、数個の 1 階の常微分方程式を連立させることにより解くことができる場合が多い。例えば、質量 m の粒子に力 $F(z)$ が働いている場合の 1 次元運動に対するニュートンの運動方程式は、以下のような 2 階の常微分方程式で与えられる。

$$m \frac{d^2 z}{dt^2} = F(z)$$

いま、運動量 $p(t)$ を

$$p(t) = m \frac{dz}{dt}$$

と定義すれば、ニュートンの運動方程式は次の 2 元の連立 1 階微分方程式に帰する。

$$\frac{dz}{dt} = \frac{p}{m}$$

$$\frac{dp}{dt} = F(z)$$

つまり、多くの微分方程式が連立した 1 階の微分方程式に変形することができることから、適当な初期条件（例えば、 $y(x=0) = y_0$ ）のもとで以下のような 1 階微分方程式の数値解を求めることができれば良い。

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

基本的なアルゴリズム

一般に、1 階微分方程式の数値解を求める基本的なアルゴリズムは簡単である。

初期条件 $y(x=0) = y_0$ に対して、以下の微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{48}$$

を数値的に求めることを考えよう。つまり、ある x （例えば、 $x=1$ ）における解 $y(x)$ を求めることを考える。

1. 区間 $[0, 1]$ を長さ $h = 1/N$ の区間に等分割する。
2. 与えられた微分方程式を差分化して y_n と y_{n+1} 等に関係づける漸化式を作る。
3. $x=0$ から 1 段階ずつ積分する。

このときの漸化式に含まれる $y_n, y_{n+1}, y_{n+1}, \dots$ の数や y_{n+1} に対する次数によって、計算精度が変わる。

オイラー法 (Euler method)

最低次のオイラー法は、 y_n, y_{n+1} の漸化式に基づく。

式 (48) における左辺を、1 章で導いた前進差分でおきかえると

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = f(x_n, y_n)$$

これを变形すれば、

$$y_{n+1} = y_n + h f(x_n, y_n) + O(h^2) \quad (49)$$

のような漸化式となる。これが、与えられた微分方程式に対する最低次数でのオイラー法による漸化式である。与えられた初期条件から、うへの漸化式を用いて順々に y_{n+1} を求めることにより、求めたい $y(x)$ での値を得ることができる。

漸化式によって積分する各段階での誤差は $O(h^2)$ であるが、区間全域にわたってこの誤差が積算されることから、全体としての誤差は $NO(h^2) \approx O(h)$ となる。従って、誤差を抑えるためには、刻み幅 h を小さくする必要がある（ただし、それに応じて計算時間は長くなる）。しかし、計算精度が低いことから、積分区間が大きくなるとすぐにこの方法は破たんする。

ここで用いたオイラー法は最も原始的な方法であり、一般的にはより精度の高い方法としてルンゲ・クッタ法などが多用される。ただし、背景にある基本的原理は、ここで説明した陽解法をベースにしたものである。

Problem 10-1

(1) 境界条件 $y(0) = 1$ のもとで、微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = -xy$$

を、刻み幅 h でオイラー法を用いて解くプログラムを作成せよ。

(2) $y(1)$ および $y(3)$ を求めよ。刻み幅としては、 $h = 0.5, 0.2, 0.1, 0.05, 0.02, 0.01, 0.005, 0.002, 0.001$ とせよ。

・ (1) と (2) ではプログラムと出力結果を添付すること。

(3) 微分方程式の厳密解を求めて、うえで求めた数値解の精度を調べよ。

10.2 2階の線形微分方程式

本章では、物理の重要な微分方程式として頻繁に顔を出す2階の線形微分方程式について考察する。ここで考察する微分方程式は以下のようなものである。

$$\frac{d^2y}{dx^2} + k(x)y = S(x) \quad (50)$$

このようなかたちで表されるものとしては、静電ポテンシャルに対するポアソン方程式

$$\nabla^2 \Phi = -4\pi\rho$$

がある。（たびたびそうであるように）ポテンシャル Φ と電荷密度 ρ が球対称（つまり r のみの関数）であるならば、ポアソン方程式は、

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left[r^2 \frac{d\Phi}{dr} \right] = -4\pi\rho(r)$$

と書くことができる。そこで、

$$\Phi(r) = \frac{\phi(r)}{r}$$

とすれば、ポアソン方程式は、式 (50) と同様な 2 階の線形微分方程式になる。

$$\frac{d^2\phi(r)}{dr^2} = -4\pi r\rho(r) \quad (51)$$

また、中心力ポテンシャル $V(r)$ のもとで運動する粒子に対する Schrödinger 方程式は、粒子の波動関数を

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{R(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi)$$

のように表したとすると、

$$\frac{d^2 R(r)}{dr^2} + k(r)^2 R(r) = 0 \quad (52)$$

のようになり、やはり、式 (50) と同様な 2 階の線形微分方程式になる。ここで、 $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$ は球面調和関数、 E は粒子のエネルギー、 m は粒子の質量である。 $k^2(r)$ は、

$$k(r)^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{l(l+1)}{2mr^2} - V(r) \right]$$

で与えられる。

これらの微分方程式は、前章の微分方程式と基本的に同じものである。前章では初期条件のみ与えられた条件のもとで微分方程式を解いたが、本章では離れた 2 点での変数の値が拘束条件として与えられているところが異なっている。このような問題を (2 点) 境界値問題という。

ヌメロフの方法 (Numerov method)

2 階の線形微分方程式

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = -k(x)^2 y + S(x)$$

を解くもっとも簡単で効率的な方法としてヌメロフの方法と呼ばれるものがある。この方法では、左辺の 2 階微分を 3 点差分公式でおきかえて近似する。つまり、

$$y_{n\pm 1} = y_n \pm h y'_n + \frac{h^2}{2} y''_n \pm \frac{h^3}{6} y'''_n + \frac{h^4}{24} y^{(4)}_n + O(h^5)$$

を用いて、2 階微分の 3 点差分公式を書くと、

$$\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} = y''_n + \frac{h^2}{12} y^{(4)}_n + O(h^4)$$

となる。従って、

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = \frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12} y^{(4)}_n + O(h^4)$$

y_n の 4 階微分は、もとの微分方程式を用いることにより、

$$\begin{aligned} y_n^{(4)} &= \frac{d^2}{dx^2} (-k^2 y + S) \Big|_{x=x_n} \\ &\approx -\frac{(k^2 y)_{n+1} - 2(k^2 y)_n + (k^2 y)_{n-1}}{h^2} + \frac{S_{n+1} - 2S_n + S_{n-1}}{h^2} + O(h^2) \end{aligned}$$

となるから、最終的に、微分方程式 (50) は以下のように変形される。

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{h^2}{12}k_{n+1}^2\right)y_{n+1} - 2\left(1 - \frac{5h^2}{12}k_n^2\right)y_n + \left(1 + \frac{h^2}{12}k_{n-1}^2\right)y_{n-1} \\ = \frac{h^2}{12}(S_{n+1} + 10S_n + S_{n-1}) + O(h^6) \end{aligned} \quad (53)$$

微分方程式が与えられていれば、各格子点での k_n^2 と S_n は解析的に簡単に評価できるから、ヌメロフの方法は簡単で効率の良い方法である。式 (53) は、 y_{n+1} と y_{n-1} に関する線形方程式になっているから、初期条件として、 y_0, y_1 が与えられれば、順々に y_n を評価することができる。この公式は、4 次のルンゲクッタ法よりも精度が良い。

Problem 10-2

(1) 次のような境界条件のもとで微分方程式

$$\frac{d^2y}{dx^2} = -4\pi y, \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = 0$$

を、ヌメロフの方法を用いて刻み幅 h で解くプログラムを作成せよ。

(2) $y(1), y(3)$ および $y(5)$ を求めよ。最初の漸化式を評価するためには、 y_1 を知る必要があるが、 $y_1 = y(x=h)$ を $x=0$ のまわりでテイラー展開して、与えられている境界条件を用いることにより y_1 を求めよ。刻み幅としては、 $h = 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001$ とせよ。

・ (1) と (2) ではプログラムと出力結果を添付すること。

(3) 微分方程式の厳密解を求めて、うえで求めた数値解の精度を調べよ。

11 微分方程式の解法 II

11.1 数値解の収束性と誤差

つぎのような微分方程式を単純なオイラー法を用いて解くことを考えよう。

$$\frac{dy}{dx} = -y$$

ここで、初期条件は $y(x=0) = 1$ とする。明らかに、厳密解は $y = e^{-x}$ で与えられる。うえの式の左辺を 3 点公式を用いて差分化すると、

$$\frac{y_{n+1} - y_{n-1}}{2h} = -y_n$$

となるから、次のような漸化式を解くことになる。

$$y_{n+1} = y_{n-1} - 2hy_n \quad (54)$$

ここで、初期条件は以下のようなものを用いればよい。

$$y_0 = y(x=0) = 1$$

$$y_1 = y(h) = y(0) + h \frac{dy(0)}{dx} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2y(0)}{dx^2} + \dots \approx 1 - h + \frac{h^2}{2}$$

実際にうえの初期条件のもとで漸化式を評価すると、大きい x で $y(x)$ が振動してその絶対値は発散することがわかる。つまり、十分大きい x で数値解は収束しない。

そこで、漸化式 (54) を解析的に解いてみよう。いま、 $y_n = Ar^n$ (A, n は定数) とすると、特性方程式は以下ようになる。

$$Ar^{n+1} = Ar^{n-1} - 2hAr^n$$

これを解くと、

$$r = -h \pm (1 + h^2)^{\frac{1}{2}}$$

そこで、

$$r_+ = -h + (1 + h^2)^{\frac{1}{2}} \approx 1 - h, \quad r_- = -h - (1 + h^2)^{\frac{1}{2}} \approx -(1 + h)$$

とおけば、漸化式 (54) の一般解は、

$$y_n = y_n^+ + y_n^- = Ar_+^n + Br_-^n \approx A(1 - h)^n + B(-1)^n(1 + h)^n$$

と書ける。

十分大きな $x = nh$ では、

$$y^+(x) = y_n^+ = A \left(1 - \frac{x}{n}\right)^n \rightarrow Ae^{-x}$$

$$y^-(x) = y_n^- = B(-1)^n \left(1 + \frac{x}{n}\right)^n \rightarrow (-1)^n Be^x$$

となる。1 番目の解が与えられた微分方程式の一般解に対応する。また、2 番目の解 $y^-(x)$ は発散解であり、 $B \neq 0$ である限り、常に発散する。計算機上では確実に $B = 0$ とすることは困難であり、計算機イプシロンにより、 $B \neq 0$ の解が必ず含まれてしまう。その結果、大きい x では数値解が発散してしまい、解が不安定になる。

Problem 11-1

(1) 境界条件 $y(0) = 1$ のもとで、微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = -y$$

を、刻み幅 h でオイラー法を用いて解くプログラムを作成せよ。差分化した漸化式を解くときの初期条件は本文の記述を参考にせよ。

(2) 微分方程式の厳密解を求めて、うえで求めた数値解の精度を調べよ。十分に大きい x で、数値解が発散することを確認せよ。その理由を説明せよ。

・ (1) と (2) ではプログラムと出力結果を添付すること。

11.2 2階微分方程式：自明ではない境界条件と数値誤差

境界値問題を解く際、その境界条件が解析的に解くときは自明であっても、数値的に解く場合は自明でない場合も多い。そのような例について説明しよう。

つぎのようなポアソン方程式を極座標系で考える。

$$\begin{aligned}\nabla^2\Phi &= \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\Phi}{dr} \right) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\Phi) \\ &= -4\pi\rho(r)\end{aligned}$$

ここで、 $\Phi(r) = \varphi(r)/r$ とすれば、

$$\frac{d^2\varphi(r)}{dr^2} = -4\pi r\rho(r)$$

となり、ヌメロフ法を使うことができる。電荷密度 $\rho(r)$ が以下のように与えられたとする。

$$\rho(r) = \frac{1}{8\pi} e^{-r}$$

このとき全空間での総電荷 Q は、

$$Q = \int d^3r \rho(r) = \int_0^\infty dr 4\pi r^2 \frac{1}{8\pi} e^{-r} = 1$$

となる。そして、うへのポアソン方程式はこの電荷分布に対して解析に解くことができ、その解は、

$$\varphi(r) = 1 - \frac{1}{2} (r+2) e^{-r}$$

で与えられる。ここで、境界条件としては、

$$\varphi(r=0) = 0, \quad \varphi(r=\infty) = 1$$

とした。これらの物理的意味について考えてみよ。

さて、ヌメロフ法を使ってこのポアソン方程式を漸化式に書きかえると、

$$\varphi_{n+1} - 2\varphi_n + \varphi_{n-1} = \frac{h^2}{12} (S_{n+1} + 10S_n + S_{n-1})$$

ここで、

$$S_n = -4\pi r_n \rho(r_n) = -\frac{1}{2} r_n e^{-r_n}$$

従って、 φ_0 と φ_1 が必要になる。解析解を求める際に用いた φ_∞ は、この場合、自明ではないことに注意せよ。うへの境界条件の一つは、

$$\varphi_0 = \varphi(r=0) = 0$$

ところが、 φ_1 は解が求まらなければわからない。これが、自明ではない境界条件の例である。

そこで、物理的な考察から φ_1 を求める。与えられた電荷分布のもとでクーロンの法則を用いると

$$\Phi(\mathbf{r}') = \int d^3r \frac{\rho(r)}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|}$$

$\mathbf{r}' = 0$ として、変数変換をすれば、

$$\Phi(0) = \int d^3r \frac{\rho(r)}{r} = 4\pi \int_0^\infty dr r \rho(r) = \int_0^\infty dr \frac{re^{-r}}{2} = \frac{1}{2}$$

つまり、 $r \approx 0$ 近傍で、 $\Phi(r \approx 0) = 1/2$ となる。従って、

$$\varphi_1 \approx +h\Phi(0) \approx +\frac{h}{2}$$

となる。

うえで与えられたポアソン方程式においては、実際に数値解を求めるとその解の誤差が線形で増大する。これは、計算機に含まれる丸め誤差により、 φ_0, φ_1 の境界条件に必ず誤差が含まれるためである。そして、この誤差が n が増大すると伴に線形に増大する。これは、ポアソン方程式に特有の性質である。

例えば、

$$\frac{d^2\varphi(r)}{dr^2} = -4\pi r \rho(r)$$

の一般解は、右辺をゼロとおいて解いたものであり、

$$\varphi(r) = c_0 + c_1 r$$

となる。つまり、このポアソン方程式における解は、

$$\varphi(r) = [c_0 + c_1 r] + \varphi_{sp}(r) \quad (55)$$

ここで、 $\varphi_{sp}(r)$ は、うえで求めた右辺がゼロでない時の特殊解である。勿論、境界条件から $c_0 = c_1 = 0$ でなくてはならない。しかしながら、いわゆる計算機イプシロンによって、数値解は常に式 (55) で与えられる。その結果、厳密解 $\varphi_{sp}(r)$ のうえに線形で増加する誤差項 $c_0 + c_1 r$ が上乘せされる。

しかしながら、このときの誤差は線形で増加することがわかっているから、誤差を取り除くのは簡単である。最初の数ステップ（例えば、10 ステップ）から誤差項の定数 c_1 を以下のように見積もることができる。

$$c_1 = \frac{\varphi_{11} - \varphi_1}{10h}$$

従って、正しい数値解は

$$\varphi_n \rightarrow \varphi_n - c_1 \cdot (nh)$$

とすれば良い。

あるいは以下のように、誤差を取り除くこともできる。この問題の場合、 $r \rightarrow \infty$ の境界条件 $\Phi(r) \rightarrow 1/r$ から、 $\varphi(r = \infty) = 1$ となる。従って、十分に大きい r (つまり n) で

$$\varphi(r = \infty) = \varphi_n = 1$$

として、 n が減る方向にヌメロフの漸化式を用いれば良い。そうすれば、線形の誤差項は n が減少するにつれて小さくなるから問題はない。

Problem 11-2

(1) 電荷分布

$$\rho(r) = \frac{1}{8\pi} e^{-r}$$

に対して、つぎのポアソン方程式を、ヌメロフの方法を用いて $r = 0$ から $r = 50$ まで解け。

$$\frac{d^2\varphi(r)}{dr^2} = -4\pi r \rho(r)$$

ここで、境界条件は、

$$\varphi_0 = 0, \quad \varphi_1 = \frac{h}{2}$$

とし、刻み幅は $h = 0.1$ とせよ。

(2) 解析的に厳密解を求めたうえで、うえで求めた数値解の精度を調べよ。

(3) 境界条件に、5%の誤差を含ませたとき、

$$\varphi_0 = 0, \quad \varphi_1 = \frac{h}{2} \cdot 0.95$$

数値解の誤差が線形に増大することを確認せよ。

・プログラムと出力結果を添付すること。

12 モンテカルロ法 I

12.1 モンテカルロ法の基礎

近年、計算機の高速化に伴って、大規模な数値シミュレーションがさまざまな科学工学分野で行われている。なかでも、モンテカルロ法 (Monte Carlo method) と分子動力学法 (Molecular Dynamics method) は、大規模シミュレーションで使われる手法のなかでも、従来の差分方程式を用いたものと共に双璧をなすと言っても過言ではない。そこで、このセクションでは、モンテカルロ法 (Monte Carlo method) のごく基礎的な考え方と手法について説明する。

モンテカルロ法は、一般に、多重積分においてその威力を発揮する。例えば、統計力学などでは系の自由度に応じた多重積分の実行が必要になる。例えば、自由度が 10 という非常に小さな系について、30 重積分を台形公式等を用いて実行することは殆ど不可能である。各次元に対して、積分区間を 10 点に差分化して台形公式あるいはシンプソン公式を用いた場合、全部で 10^{30} 個の点について計算を行う必要がある。1 秒間に 10^8 回の演算が可能な計算機を用いたとしても、計算時間は 10^{22} 秒もかかる。宇宙の年齢が約 10^{10} 秒程度であることを考えれば、この計算がどれほど困難なものであるかは容易に想像できるであろう。しかし、モンテカルロ法を用いることにより、簡単に解を見つけることができる場合も多い。

モンテカルロ法の基礎概念

モンテカルロ法の基本的な考え方は非常に単純である。つぎのような 1 次元積分をモンテカルロ法で求めるには、 N 個の乱数 $x_i \in [0, 1]$ を発生させ、そのときの被積分関数の値 $f(x_i)$ から平均値を求める。

$$I = \int_0^1 dx f(x) \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \equiv \langle f(x) \rangle \quad (56)$$

後述するように、この平均値 $\langle f(x) \rangle$ は、 N が大きくなるにつれて、求めたい積分値 I に近づく。

積分区間が任意の場合

積分区間が任意の場合は、積分変数 x を適当に変数変換してやればよい。 $x' = (x - a)/(b - a)$ とすれば、

$$\begin{aligned} I = \int_a^b dx f(x) &= (b - a) \int_0^1 dx' f(x') \\ &\approx (b - a) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x'_i) \\ &\equiv (b - a) \langle f(x') \rangle \end{aligned}$$

ここで、新たなランダム変数 x' は、区間 $[a, b]$ でランダムに選ばれることに注意せよ。

多重積分の場合

多重積分に対するモンテカルロ法も 1 次元の場合と全く同様である。

つぎのような 2 重積分の場合は、2 つの変数 x_1, x_2 をランダムに選び、そのときの被積分関数値から平均を求めて積分値とする。

$$I = \int_0^1 dx_1 \int_0^1 dx_2 f(x_1, x_2) \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_1^i, x_2^i) \equiv \langle f(x_1, x_2) \rangle$$

モンテカルロ法における誤差

モンテカルロ法の積分値の誤差は、統計論の中心極限定理から以下のように考察できる。

積分値を N 倍したものを ξ とすれば、 $f_i \equiv f(x_i)$ をランダム変数とし、

$$\xi = N \cdot I = \sum_{i=1}^N f_i = f_1 + f_2 + \cdots + f_N$$

従って、 ξ の平均値は

$$\langle \xi \rangle = N \langle I \rangle = \langle f_1 + f_2 + \cdots + f_N \rangle = N \langle f \rangle$$

中心極限定理によれば、 ξ の分散 σ_ξ は

$$\sigma_\xi^2 = \langle \Delta \xi^2 \rangle = \langle (\Delta f_1 + \cdots + \Delta f_N)^2 \rangle = N \langle \Delta f^2 \rangle \equiv N \sigma_f^2$$

となる。一方、 N は固定された定数であるから、

$$\sigma_\xi^2 = N^2 \sigma_I^2$$

従って、積分値 I の誤差は、

$$\frac{\sigma_I}{\langle I \rangle} = \frac{\sigma_\xi}{\langle \xi \rangle} = \frac{1}{\sqrt{N}} \frac{\sigma_f}{\langle f \rangle}$$

つまり、積分値 I の誤差は、

1. 乱数の発生回数 N に対して、 $1/\sqrt{N}$ に比例して減少する。
2. 被積分関数 $f(x)$ の標準偏差（変化の大きさ）に比例する。

従って、精度を高めるためには、試行回数（乱数のサンプル数）を増やすという当然のことともに、被積分関数の変化をできるだけ少なくする必要がある。この後者を行うために用いられる方法が、重み関数を用いたモンテカルロ法（importance sampling）である。

Problem 12-1

つぎの多重積分を単純なモンテカルロ法により求めよ。

$$I = \int_0^{\frac{\pi}{8}} dx_1 \int_0^{\frac{\pi}{8}} dx_2 \int_0^{\frac{\pi}{8}} dx_3 \int_0^{\frac{\pi}{8}} dx_4 \int_0^{\frac{\pi}{8}} dx_5 \int_0^{\frac{\pi}{8}} dx_6 \int_0^{\frac{\pi}{8}} dx_7 \int_0^{\frac{\pi}{8}} dx_8 \\ \times \sin(x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 + x_7 + x_8)$$

サンプル数は、 $N = 10^1, 10^2, 10^3, 10^4, 10^5$ とせよ。

この積分の厳密解は

$$I_{\text{exact}} = 70 - 16 \sin \frac{\pi}{8} + 56 \sin \frac{\pi}{4} - 112 \sin \frac{3\pi}{8} \\ \approx 5.371873 \times 10^{-4}$$

である。

13 モンテカルロ法 II

13.1 重み関数を用いたモンテカルロ法

重み関数を用いたモンテカルロ法の基本的な考え方は、積分変数を適当に変換して、被積分関数の変化をできるだけ小さく抑えるということにある。そこで、重み関数 $w(x)$ を用いて式 (56) を評価することを考えよう。ここで、重い関数は、つぎのように規格化されているとする。

$$\int_0^1 dx w(x) = 1$$

式 (56) をつぎのように変形する。

$$I = \int_0^1 dx f(x) = \int_0^1 dx w(x) \frac{f(x)}{w(x)}$$

$dy/dx = w(x)$ として変数変換を行うと、

$$y(x) = \int_0^x dx w(x)$$

となり、 $w(x)$ の規格化条件から、

$$y(x=0) = 0, \quad y(x=1) = 1$$

である。従って、

$$I = \int_0^1 dy \frac{f(x(y))}{w(x(y))} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x(y_i))}{w(x(y_i))} = \left\langle \frac{f(x(y))}{w(x(y))} \right\rangle$$

つまり、ランダム変数を x から y に変換し、乱数により $y \in [0, 1]$ を選んだうえで、 $x(y)$ を評価し、 $\langle f(x(y))/w(x(y)) \rangle$ を求めればよい。積分区間で被積分関数 $\langle f(x(y))/w(x(y)) \rangle$ が滑らかに変化するように重み関数 $w(x)$ を選ぶことにより、効率良く積分値を求めることができる。

重み関数を用いたモンテカルロ法とは、一様ランダムなもとの変数 x 用いる方法（単純なモンテカルロ法）から、ある特定な分布（重み関数）をもった乱数を用いて評価することを意味する。

Problem 13-1

つぎの積分を、単純なモンテカルロ法と重み関数を用いたモンテカルロ法により求めよ。

$$I = \int_0^1 \frac{dx}{1+x^2} = \frac{\pi}{4}$$

重み関数として、

$$w(x) = \frac{1}{3}(4-2x)$$

とせよ。サンプル数を $N = 10, 50, 100, 500, 1000, 5000, 10000, 50000$ とせよ。

うえの重み関数が何故うえの計算において有効なのか説明せよ。

13.2 特定の分布をもつ乱数の生成

重み関数を用いたモンテカルロ法の鍵は、適当な重み関数に応じた乱数を生成することにある。つまり、重み関数が、以下に示すように、 $w(x)dx$ がランダム変数 x が $x - x + dx$ に含まれる確率になる。そこで、ある特定の分布をもつ乱数を如何にして生成するか、ということが問題になる。

変換法 (Transformation method)

これまでの例題と同様に、ある特定の分布をもつ乱数が解析的に求めることができる場合を変換法 (Transformation method) という。

例として、被積分関数に減衰する項が含まれている場合を考えよう。このとき、減衰項を重み関数 $w(x)$ として選ぶ。

$$\begin{aligned} I &= \int_0^\infty dx f(x) = \int_0^\infty dx e^{-x} g(x) \\ &= \int_0^1 dy g(y) \end{aligned}$$

ここで、

$$\frac{dy}{dx} = c_1 e^{-x}$$

定数 c_1 は、重み関数に対する規格化条件

$$y(x=0) = 0, \quad y(x=\infty) = 1$$

により決めることができる。従って、 $c_1 = 1$ となり、

$$y(x) = 1 - e^{-x}$$

つまり、確率密度が $P(x) = e^{-x}$ の分布をもつ乱数 x は、

$$x(y) = -\log(1 - y)$$

によって生成される。ここで、 y は $[0, 1]$ の乱数である。

別の例として、極座標系における多重積分を考えよう。

$$I = \iiint d^3\mathbf{r} f(x, y, z) = \int_0^\infty dr r^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi f(r, \theta, \phi)$$

この場合、角度に関する積分は、つぎのような重み関数を用いた乱数を生成して評価する。

$$\frac{dy_\theta}{d\theta} = c_1 \sin \theta$$

$$\frac{dy_\phi}{d\phi} = c_2$$

勿論、定数 c_1, c_2 は、 y_θ, y_ϕ に対する規格化条件から決まる。これらを解いて、

$$y_\theta = \frac{1}{2} (1 - \cos \theta) \quad \Rightarrow \quad \theta = \cos^{-1} (1 - 2y_\theta)$$

$$y_\phi = \frac{\phi}{2\pi} \quad \Rightarrow \quad \phi = 2\pi y_\phi$$

となる。ここで、 y_θ, y_ϕ は、 $[0, 1]$ の一様乱数である。

棄却法 (Rejection method)

解析的にある確率密に従った乱数が求まらないことも多い。例えば、**演習問題 13-1** における重み関数として、

$$w(x) = \frac{6}{5} \left(1 - \frac{x^2}{2} \right)$$

とすると、

$$y(x) = \frac{6}{5} x \left(x - \frac{x^2}{6} \right)$$

となり、 x についての 3 次関数になる。この場合、 $x = x(y)$ というかたちに変形することができない。このようなときは、以下のようなノイマンの棄却法 (Rejection method) を用いる。

重み関数 (確率密度) $w(x)$ が与えられたとする。この関数の $x \in [0, 1]$ での最大値を w_{max} とする。

1. $[0, 1]$ の 2 つの乱数 x_i, η_i を発生させる。
2. $w(x_i)/w_{max}$ と η_i を比較する。
3. $w(x_i)/w_{max} > \eta_i$ のときは、この x_i をランダム変数として採用する。
4. $w(x_i)/w_{max} < \eta_i$ のときは、この x_i をランダム変数として棄却する。

このようにして、重み関数 (確率密度) $w(x)$ に対応したランダム変数を生成することができる。

正規分布をした乱数の生成

平均がゼロで、分散が $\sigma = 1$ であるような正規 (Gauss) 分布は

$$w(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

で与えられる。このような確率密度をもつランダム変数 x を生成することは、理工学分野での数値解析において非常に多い。しかしながら、この確率密度について変換法を用いて新たなランダム変数 y の関数として、 $x = x(y)$ を解析的に求めることはできない (誤差関数の逆関数が必要になる)。勿論、うえの棄却法を用いれば正規 (Gauss) 分布に対応する乱数を生成することは可能である。しかしながら、幸いにも、正規 (Gauss) 分布になるランダム変数の生成には、いくつか簡単なアルゴリズムが考え出されている。

中心極限定理を用いた以下の方法は、特に簡単で有効である。 $s_i \in [0, 1]$ をランダム変数として、

$$\xi = s_1 + s_2 + \cdots + s_N$$

とする。まえと同様の議論により、新たなランダム変数 ξ の平均値 $\langle \xi \rangle$ と分散 $\sigma_\xi^2 = \langle \Delta \xi^2 \rangle$ は、それぞれつぎのように与えられる。

$$\langle \xi \rangle = N \langle s \rangle$$

$$\sigma_\xi^2 = N \langle \Delta s^2 \rangle$$

中心極限定理によれば、 N が大きい場合、ランダム変数 ξ に対する確率密度 $P_\xi(\xi)$ は、つぎの正規分布に近づく。

$$P_\xi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_\xi^2}} e^{-\frac{(\xi - \langle \xi \rangle)^2}{2\sigma_\xi^2}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi N\sigma_s^2}} e^{-\frac{(\xi - N\langle s \rangle)^2}{2N\sigma_s^2}} \quad (57)$$

ランダム変数 s は、 $[0, 1]$ の一様乱数であるから、 s に対する確率密度 $P_s(s)$ は

$$P_s(s) = 1$$

で与えられる。従って、

$$\begin{aligned} \langle s \rangle &= \int_0^1 ds s P_s(s) = \frac{1}{2} \\ \sigma_s^2 &= \langle \Delta s^2 \rangle = \langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2 = \int_0^1 ds s^2 P_s(s) - \langle s \rangle^2 = \frac{1}{12} \end{aligned}$$

そこで、 $N = 12$ とすれば、式 (57) から、ランダム変数 ξ に対する確率密度 $P_\xi(\xi)$ はつぎのような正規分布になる。

$$P_\xi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\xi - 6)^2}{2}}$$

つまり、12 個の乱数を生成し、その和 ξ から 6 を引いたものが、平均がゼロで分散が 1 の正規分布に対応する乱数になる。

具体的なアルゴリズム（プログラム）は以下のようになる。

```
xi = 0
for i = 1, 12
  xi = xi + rand(i)
next i
xi = xi - 6
```

平均が $\langle \xi \rangle$ で分散が σ の正規分布

$$P_\xi(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{(\xi - \langle \xi \rangle)^2}{2\sigma^2}}$$

に対応する乱数にするには、うえのアルゴリズムで求めた ξ に、 σ をかけたうえで、 $\langle \xi \rangle$ を加えればよい。

他にもいくつかアルゴリズムが存在するが、それらについてはモンテカルロ法の文献を参照してもらいたい。

Problem 13-2

うえで説明した正規分布をした乱数を生成するアルゴリズムを用いて、ランダム変数 x を 100000 個生成し、横軸を x 、縦軸をそれぞれの x に対する頻度とするヒストグラムを作成せよ。

求めたヒストグラムのうえに正規分布をプロットすることにより、正しくランダム変数 x が生成されていることを検証せよ。

14 PROJECT (物理からの応用問題)

本章では、これまで学習した数値計算の手法を具体的な物理の問題に適用することによって、実際に、数値計算がどのように応用されるかを体験する。

まず、研究課題についての物理的な背景と意味を説明したうえで、プログラミングを行うためのアルゴリズムを詳細に示す。そのアルゴリズムに従って各自が作成したプログラムを用いて、いくつかの具体的問題に適用し、研究課題の物理的内容のより深い理解を試みよう。

14.1 物理的背景：2原子分子の振動運動

本プロジェクトでは、量子力学の創設期において大きな役割を果たしたボーアの半古典的量子化条件を用いて、解析的に解くことが不可能なポテンシャルのもとでの量子化されたエネルギー準位を求める。

具体的な問題設定としては、2個の原子核が電子によって結合された H_2 のような2原子分子の振動運動を考察する。2原子分子の振動を引き起こすポテンシャル場は、原子核および電子の存在する場所によって主にクーロン力によって確定される。しかし、電子は原子核に比べてずっと軽いために原子核の変位に対して即座に応答することができる（このような仮定をボルン近似あるいは断熱近似という）。従って、ある静的なポテンシャル場のもとでの原子核の相対距離の振動と近似できる（つまり、電子の運動はポテンシャルのなかに既に繰り込まれていると考える）。

一般に、このような状況のもとでのポテンシャル $V(r)$ は、原子核の相対距離が非常に小さいときは原子核間のクーロン力とパウリの排他律による強い斥力が働き、長距離においては分極に伴った弱い引力になる。このようなポテンシャルとして良く用いられるものとしては、以下のようなレナード・ジョーンズ型あるいは6-12型ポテンシャルと呼ばれるものがある。

$$V(r) = 4V_0 \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right] \quad (58)$$

図3に示してあるように、このポテンシャルは、 $r_{min} = 2^{1/6}a \approx 1.12a$ において極小値をもつ。

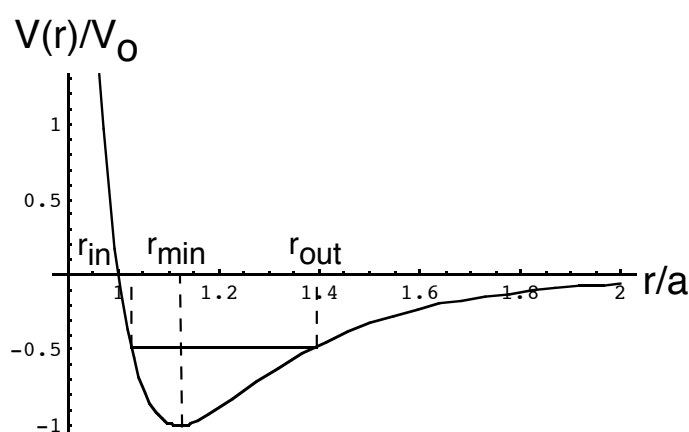


図 3: レナード・ジョーンズ型ポテンシャル

いま（相対）振動のエネルギー E を $-V_0 < E < 0$ とすれば、原子核は距離 r が $r_{in} < r < r_{out}$ の間の相対的な振動運動となる（図3参照）。つまり、原子核の相対距離の運動は、内側と外側の

転回点 r_{min}, r_{max} の間を振動する。ただし、ポテンシャルは放物線型ではないため、調和振動とは限らないことに注意せよ。

エネルギーの保存則より、相対運動の運動エネルギーとポテンシャル・エネルギーの和

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r)$$

は一定に保たれる。その結果、位相空間（座標 r と運動量 p の空間）で相対運動は閉じた軌道を描く。この軌道の式は、

$$p = \pm \sqrt{2m(E - V(r))}$$

で与えられる。

この軌道に対して、ボーアの量子化条件を用いる。いま、与えられたエネルギー E に対する作用 S を考える。

$$S(E) = \oint p(r) dr$$

つまり、作用 S は位相空間における閉じた軌道の面積に等しい。ボーアの量子化条件によれば、この作用 S が

$$S = (n + \frac{1}{2})h$$

の条件を満たす場合にのみ運動が許される。ここで、 h はプランク定数であり、 n は自然数、 $n = 1, 2, \dots$ 。上式の $1/2$ は、通常、ボーアの量子化条件において省かれるが、量子力学による結果（不確定性原理から生じる）と一致させるためにつけ加えた。

よって、運動の許されるエネルギーはとびとびの離散化されたエネルギー E_n になり、つぎの式で決めることができる。

$$S(E_n) = 2 \int_{r_{in}}^{r_{out}} \sqrt{2m(E_n - V(r))} dr = \left(n + \frac{1}{2}\right) h \quad (59)$$

これは積分方程式であり、積分に対しては台形公式やシンプソン公式、解 E_n を求めるためには2分法やニュートン法を用いて数値的に解くことができる。

これが、ボーアの量子化条件を用いて離散化されたエネルギー E_n を求める方法である。

参考までに、量子力学的には、この相対距離の振動運動は以下のような1次元 Schrödinger 方程式で表される。

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) \right] \psi_n = E_n \psi_n$$

ここで、 m は2個の原子核の換算質量である ($m = M/2$)。振動エネルギー E が $-V_0 < E < 0$ のときは、運動は束縛状態の波動関数 ψ_n で規定され、エネルギーは離散的になる。この Schrödinger 方程式は、ヌメロフの方法等を用いて解くことができる。

14.2 数値解析の基本アルゴリズム

式 (59) を数値的に解くアルゴリズムについて具体的に考察しよう。

式 (59) に含まれるポテンシャルとしてレナード・ジョーンズ型を仮定する。計算を簡単にするためにすべての量を無次元化する。そこで、以下のように無次元化したエネルギー、距離等を定義すれば、

$$\varepsilon = \frac{E}{V_0}, \quad x = \frac{r}{a}, \quad \gamma = \left(\frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

無次元化したレナード・ジョーンズ・ポテンシャル $v(x)$ は、

$$v(x) = 4 \left(\frac{1}{x^{12}} - \frac{1}{x^6} \right) \quad (60)$$

と表される。図3は、このポテンシャルをプロットしたものである。

量子化されたエネルギー ε_n を求める式 (59) は、

$$s(\varepsilon_n) = 2\gamma \int_{x_{in}}^{x_{out}} \sqrt{\varepsilon_n - v(x)} dx = \left(n + \frac{1}{2} \right) 2\pi \quad (61)$$

となる。

パラメータ γ は、系を特徴付けている物質パラメータに対応する。 γ が大きい場合、つまり $\hbar$ が小さい場合は、古典系に近い系を表す。 γ に含まれる a, V_0 は、それぞれ、分子の回転エネルギーに対する慣性モーメントと分子をばらばらにするのに必要な解離エネルギーから実験的に求めることができる。 H_2 分子は $\gamma = 21.7$ である。また、重い原子核からなる酸素分子 O_2 分子の場合は $\gamma = 150$ である。

— ステップ1 —

無次元化されたレナード・ジョーンズ・ポテンシャル $v(x)$ において、あるエネルギー ($\varepsilon_n = -0.75$ とする) に対する転回点 x_{in}, x_{out} (図3参照) を2分法により求めるプログラムを作成せよ。

無次元化したエネルギーは $\varepsilon_n = -0.75$ 、精度は $\delta x = 10^{-8}$ 、座標の刻み幅 $\delta x = x_{min}/10$ 、転回点を探すための x の初期値としては極小点 $x = x_{min}$ とせよ。

— ステップ2 —

うえで求めた転回点 x_{in}, x_{out} およびシンプソン公式を用いて、無次元化した作用 $s(\varepsilon_n)$ を求めるための式 (61) の積分を計算するプログラムを作成し、ステップ1で作成したプログラムと結合せよ。

物質パラメータは $\gamma = 100$ とし、積分を行うための分割数は $N = 100$ とせよ。

この時点において、各自の作成したプログラムは、無次元化したエネルギー ε_n を与えれば、式 (61) の作用 $s(\varepsilon_n)$ を評価することができるようになっているはずである。この作用 $s(\varepsilon_n)$ を用いれば、式 (61) からエネルギー ε_n の量子準位 n を求めることができる。即ち、

$$n = \frac{s(\varepsilon_n)}{2\pi} - 0.5$$

により、量子数 n が求まる。

— ステップ3 —

物質パラメータを $\gamma = 100$ とし、エネルギーが $\varepsilon_n = -0.0005$ に対して、エネルギー準位 n を求めよ。

これは、振動エネルギーが連続的になる領域までの量子化されたエネルギー準位の最大数 (ただし、この数値計算で仮定されている精度、つまり、 $\delta\varepsilon = 0.0005$ の範囲以内で求めることができる準位数) に対応する。

次に、ステップ3で求めた量子準位の最大数 n までのエネルギー準位 ε_n をセカント法を用いて順々に求めよう。

そのためには、未知数 ε_n に対する以下の方程式

$$f(\varepsilon_n) = s(\varepsilon_n) - 2\pi(n + 0.5) = 0$$

を解いて、エネルギー準位 ε_n をセカント法により求めればよい。

例えば、基底状態 $n = 1$ のエネルギー準位は、方程式

$$f(\varepsilon_1) = s(\varepsilon_1) - 2\pi(1 + 0.5) = 0$$

の解であることから、エネルギー準位 ε_1 が決まる。同様に、 $n = 2, 3, \dots, n$ に対するエネルギー準位 ε_n を求めることができる。

作成したプログラムが正しく動作するかどうか検証するためには、解析的に解くことができるポテンシャルが解析できるように、作成したプログラムを修正し、数値解と解析解を比較することが良く行われる。例えば、レナード・ジョーンズ・ポテンシャルをポテンシャルの極小点 (x_{min}) の近傍でテイラー展開し、放物線型ポテンシャルで近似することが良く行われる。また、この研究課題では、半古典的手法により量子化された束縛エネルギー準位を求めた。Schrödinger 方程式を射撃法等の方法を用いて、直接、解くことも勿論可能である。

Problem 14 うえで解説したアルゴリズムに従って、最大量子準位数 n までのエネルギー準位 ε_n を求めるプログラムを完成させ、それぞれの量子準位におけるエネルギー準位を求めよ。尚、それぞれの準位における転回点 (x_{min}, x_{max})、エネルギーが収束するためのセカント法での反復数も同時に示すこと。

物質パラメータをいろいろと変化させることで、量子効果の重要性を認識することができる。 $\gamma = 20 - 150$ において、エネルギー準位の変化を調べ、量子効果の重要性と関連づけて議論せよ。

ヒント

基底状態のエネルギー ε_1 を求めるためのエネルギーの初期値は

$$\varepsilon_1^1 = -1 + 0.001, \quad \varepsilon_1^2 = \varepsilon_1^1 + 0.001$$

とし、そのときの関数値は

$$f(\varepsilon_1^1) = 0 - 2\pi \cdot 0.5 = -\pi$$

とせよ。また、セカント法でのエネルギーの刻み幅は、 $\delta\varepsilon = 0.001$ とせよ。

つぎのエネルギー ε_2 を求めるには、初期値を

$$\varepsilon_2^1 = \varepsilon_1, \quad \varepsilon_2^2 = \varepsilon_2^1 + \delta\varepsilon$$

としたうえで、

$$f(\varepsilon_2^1) = f(\varepsilon_1) - 2\pi$$

とすれば良い。

参考資料

数値解析関連分野で定評ある参考書を以下に挙げておく。

1. R. L. Press, *et. al*, *Numerical Recipes*, 2-nd ed. (Cambridge, New York, 1992).

数値解析用プログラムが簡単な説明とともに多数載っており、世界的に評価の高い数値解析の教科書（というよりも辞典）。

2. S. E. Koonin, *Computational Physics* (Addison-Wesley, New York, 1986).

原子核物理の理論研究者として著名な著者が、CalTech (California Institute of Technology) で行った講義に基づいた定評ある物理の例題を用いた数値解析の教科書。

3. 金子 晃, 数値解析講義 (サイエンス社).

4. G. Arfken and H. J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists*, 4-th ed. (Academic, New York, 1995).

上級学部生・大学院生向けの物理数学の世界標準の教科書。

5. M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1964).

特殊関数に関する代表的ガイドブック（辞典）。