

数値解析

第一回 数値計算と誤差

舟木 剛

平成25年10月2日2限

2013/10/02

数値解析-1

1

シラバス

- 授業の目的
 - 工学分野でよく用いられる数値計算の算法ならびにそれらの数値的な特性について理解させる。
- 授業計画
 - 数値計算と誤差(1回)
 - 数値計算の必要性ならびに誤差の種類について説明するとともに、行列式とその性質、行及び列の交換などの基本演算、逆行列の定義と求め方について説明する。
 - 代数方程式(2回)
 - 2分法, Newton-Raphson 法, Bailey 法について解説する。また、多変数に対するNewton-Raphson 法と収束に関する留意点について述べる。
 - 連立方程式(3回)
 - Gauss の消去法, Gauss-Jordan の掃き出し法, LU 分解法の手順ならびに計算複雑度について解説する。また, Jacobi 法, Gauss-Seidel 法, SOR 法などの反復法について手順並びに収束条件について解説する。
 - 行列の固有値(3回)
 - 固有値の性質, べき乗法, Householder 法, QR 法について述べる。QR 法の収束定理について解説する。
 - 補間法(2回)
 - 線形補間, Lagrange 補間, Newton 補間, スプライン補間について述べる。多項式補間については算出方法をスプライン補間については3次のスプライン関数の導出方法を説明する。また, 自然なスプライン関数とその特徴について解説する。
 - 関数近似(1回)
 - 最小2乗法による関数の近似について解説する。
 - 数値積分(1回)
 - 台形公式, シンプソンの公式による数値積分について解説する。
 - 常微分方程式(1回)
 - 単区分法である Euler 法, 修正 Euler 法, Runge-Kutta 法ならびに複区分法である Adams-Moulton の予測子・修正子法について解説する。また, 数値不安定性についても解説する。
- 教科書 佐藤・中村共著「よくわかる数値計算」日刊工業新聞社

2013/10/02

数値解析-1

2

数値解析について

- 数値解析とは
 - 計算機(コンピュータ)をもちいて計算問題(微分方程式, 代数方程式)を数値的に解く \leftrightarrow 解析解
- 数の表し方
 - 整数 \rightarrow 金, 人数
 - 実数 \rightarrow 計量単位等
- 数の数え方
 - 10進法, 60進法 \rightarrow 生活で使用
 - 2進法 \rightarrow 計算機で使用(見やすくするため8,16進表記)
 - 0, 1で数表現
 - bit \rightarrow binary digitの略
- 今回の授業
 - 整数・実数と10,2進数の関係

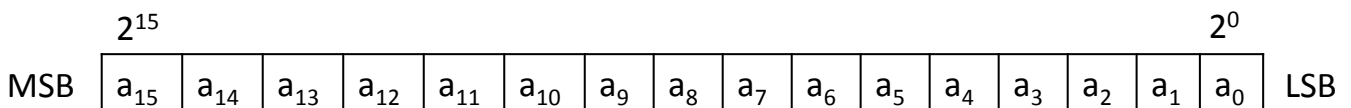
2013/10/02

数値解析-1

3

整数型の数値表現

- 計算機のビット数(桁数)
 - 計算に用いる0,1のセットの数
 - 16bit



- 0,1がa_iに入る
- MSB: Most Significant Bit 最上位ビット
- LSB: Least Significant Bit 最下位ビット
- 16bit符号なし(>0)整数の表す範囲
 - 0~65535(=2¹⁶-1)
- 10進数への変換
 - $a = a_0 \times 2^0 + a_1 \times 2^1 \dots a_{15} \times 2^{15}$
- 2進数からの10進数変換 \rightarrow 割り算の余りと商

2013/10/02

数値解析-1

4

整数型の数値表現

- 符号付整数(正負の数を表す)

- MSBを符号ビット(0:正, 1:負)として使用

- 16bit
 2^{14}

 2^0

| | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|-----|---|----------|----------|----------|----------|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-----|
| MSB | ± | a_{14} | a_{13} | a_{12} | a_{11} | a_{10} | a_9 | a_8 | a_7 | a_6 | a_5 | a_4 | a_3 | a_2 | a_1 | a_0 | LSB |
|-----|---|----------|----------|----------|----------|----------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-----|

- 計算に利用しやすい負数の表し方

- 負の数 a を表すための補数表現(n ビット)

- 1の補数表現 $2^{n-1} - 1 - |a|$

- » $|a|$ を2進数で表し, 各0,1を反転したもの

- 2の補数表現 $2^n - |a|$

- » $|a|$ を2進数で表し, 各0,1を反転し, LSBに1足したもの

2の補数表現

- 16bitの負の数 a

- 2の補数表現 $2^{16} - |a|$ (2^{16} は17bit目の数)

- 正の数 $|a|$ の和

- $2^{16} - |a| + |a| = 2^{16} = 0$

- 足したら0になる

- 減算は2の補数の加算と等価になる

小数の表し方

- 整数(nビット)

- $a_{n-1}a_{n-2} \cdots a_2a_1a_0$

- $a = a_{n-1} \times 2^{n-1} + \cdots + a_1 \times 2^1 + a_0 \times 2^0$

- 小数

- $0.a_{n-1}a_{n-2} \cdots a_2a_1a_0$

- $a = a_{n-1} \times 2^{-1} + \cdots + a_1 \times 2^{n-1} + a_0 \times 2^{-n}$

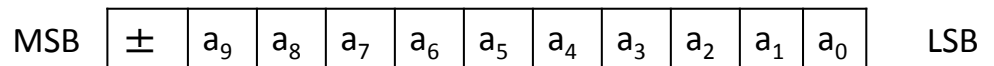
- 2^{-n} の倍数しか誤差無しに表すことはできない

固定小数点計算

- 整数型と同様の考え方

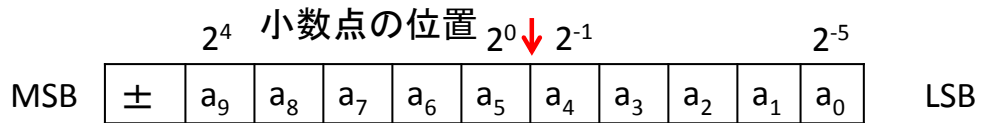
小数点の位置 ↓
 2^9 2^0

- 整数型

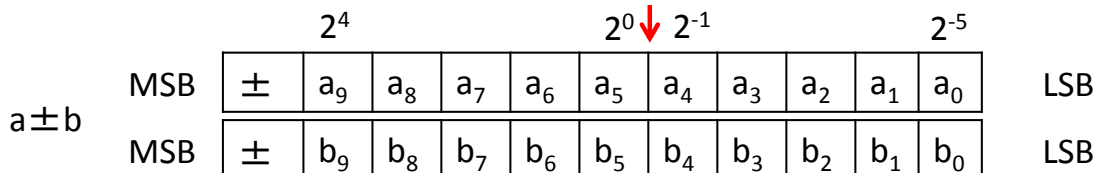


- 固定小数点型

- 整数型と同様だが、小数点の位置を考える



- 加減算には小数点の位置を合わせる必要有

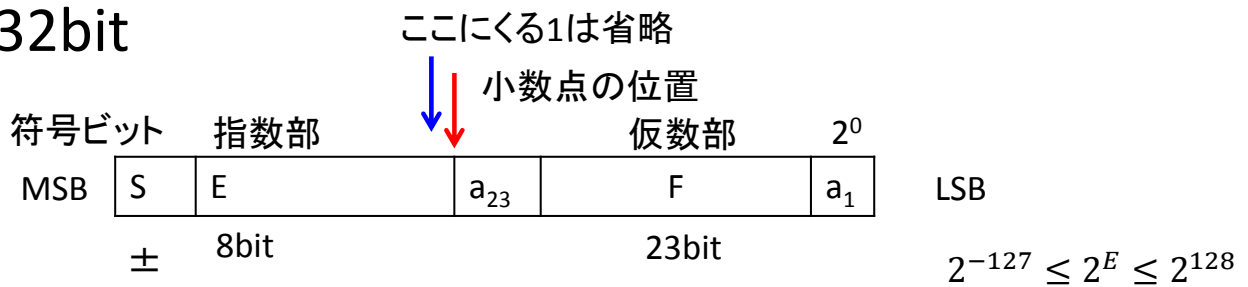


浮動小数点計算

- 実数型。より広い範囲の数を実用的に表す
 - 学生実験での有効桁数を思いだそう
 - 数値の表現 $x = F \times b^E$
ただし, F :仮数部, E :指数部, b :基数
 - 10進数 $123.456 = 1.23456 \times 10^2$
 $x = (-1)^s (f_1 \cdot f_2 f_3 \cdots f_i \cdots)_{10} \times 10^E$
ただし, 最上位: $f_1 \neq 0$ (桁下がりするのを防ぐ),
- 正規化:仮数部と指数部を上の方に合うようにする
 - 2進数($b = 2$), 最上位: $f_1 \neq 0$ は $f_1 = 1$ しかない
- IEEE形式では省略してビット数を節約

2進数での浮動小数点表現 (IEEE形式)

- 32bit



- 仮数部 $-1 \leq F < 1$
- $x = (-1)^s \times \left(1 + \sum_{i=1}^{23} \frac{a_i}{2^i}\right) \times 2^{E-127}$
- 指数の範囲外になると指数部オーバーフロー, アンダーフローとなる → 正しい結果とならない

浮動小数点形式

- 単精度(32bit, float)
 - 符号部1ビット, 指数部8ビット, 仮数部23ビット
 - 表現範囲
 - $1.2E-38 \sim 3.4E+38$
 - 0
 - $-1.2E-38 \sim -3.4E+38$
- 倍精度(64bit, double)
 - 符号部1ビット, 指数部11ビット, 仮数部52ビット
 - $2.2E-308 \sim 1.8E+308$
 - 0
 - $-2.2E-308 \sim -1.8E+308$

実数表現の精度

- 仮数部に依存
 - 仮数部23bit $\log_{10} 2^{23} \cong 7.22 \rightarrow 10$ 進数で7桁の精度
- 10進数の実数が必ずしも有限ビット数の浮動小数点で表されるわけではない
 - 小数点以下nビットの仮数部 $\rightarrow 1/2^n$ 毎の値しか表現できない
 - 10進数0.1の2進数変換
 $0.1_{10} = (0.000110011001100 \dots)_2 \rightarrow$ 循環小数
 - 10進数の有理数は2進数において無理数となることがある

数値表現における誤差

- 真値: a , 計算機での数値表現(計算結果): x
 - 誤差: $E = x - a$
 - 絶対誤差: $E_A = |E| = |x - a|$
 - 相対誤差: $E_R = \frac{E}{a} = \frac{x-a}{a}$
 - 誤差の限界: $\varepsilon (> 0) \rightarrow x - \varepsilon < a < x + \varepsilon$
 - ε が小さいほど良い
- 誤差解析
 - 真値が不明の場合, 誤差も不明
 - 計算した値の誤差の範囲(限界) \rightarrow 有効桁数
 - 計算の順序で変わる

数値表現における誤差

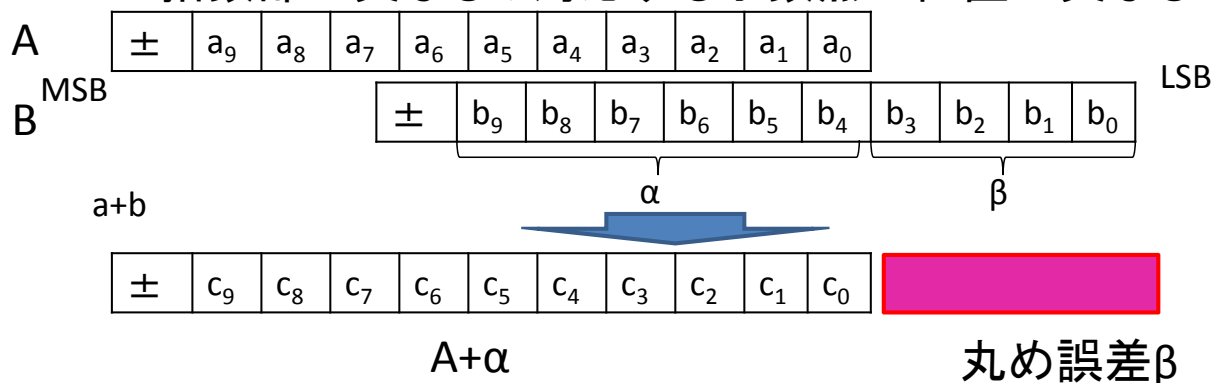
- 誤差の種類
 - 入力誤差
 - 人為ミス
 - 変換誤差 (10進数 \rightarrow 2進数)
 - 打ち切り誤差
 - 無理数の有限桁数での近似
 - 関数のテイラー展開
 - 丸め誤差(桁落ち)
 - 計算機の有限のビット数に対する有効桁数の調整。四捨五入で発生
 - 打ち切り誤差と類似

数値表現における誤差

- 丸め誤差の例

- 浮動小数点数AとBの和 ($A > B$)

- A, Bの桁数は同じ。
 - 指数部が異なる → 対応する小数点の位置が異なる



誤差の伝搬と累積

- 真値 x_a, y_a , 近似値 x, y , 誤差 $E_x = x - x_a$, $E_y = y - y_a$

- 加減算 $x \pm y = (x_a + E_x) \pm (y_a + E_y)$
 $= (x_a \pm y_a) + (E_x \pm E_y)$

- 誤差は和または差 $E_x \pm E_y$

- 乗算 $xy = (x_a + E_x)(y_a + E_y) = x_a y_a + x_a E_y + y_a E_x + E_x E_y \cong x_a y_a + x_a E_y + y_a E_x$

- 相対誤差はxとyの相対誤差の和 $\frac{x_a E_y + y_a E_x}{x_a y_a} = \frac{E_x}{x_a} + \frac{E_y}{y_a}$

誤差の伝搬と累積

$$\begin{aligned}
 - \text{除算} \quad \frac{x}{y} &= \frac{x_a + E_x}{y_a + E_y} = \frac{x_a}{y_a} \times \frac{y_a}{x_a} \times \frac{x_a + E_x}{y_a + E_y} \\
 &= \frac{x_a}{y_a} \left(1 + \frac{E_x}{x_a} \right) \frac{y_a}{y_a + E_y} = \frac{x_a}{y_a} \left(1 + \frac{E_x}{x_a} \right) \left(1 - \frac{E_y}{y_a + E_y} \right) \\
 &= \frac{x_a}{y_a} \left(1 + \frac{E_x}{x_a} \right) \left\{ 1 - \frac{E_y}{y_a} + \left(\frac{E_y}{y_a} \right)^2 - \dots \right\} \\
 &\cong \frac{x_a}{y_a} \left(1 + \frac{E_x}{x_a} - \frac{E_y}{y_a} \right)
 \end{aligned}$$

- 相対誤差はxとyの相対誤差の差 $\frac{x_a E_y + y_a E_x}{x_a y_a} = \frac{E_x}{x_a} - \frac{E_y}{y_a}$
- ただし $\frac{x}{1+x} = x - x^2 + x^3 \dots$
 $\Leftrightarrow (1+x)(x - x^2 + x^3 \dots) = (x - x^2 + x^3 \dots) + x(x - x^2 + x^3 \dots)$
 $= (x - x^2 + x^3 \dots) + (x^2 - x^3 + x^4 \dots) = x$