



# 目次

<b>第 1 章 数値計算の基礎</b>	<b>1</b>
1.1 数値計算と数式処理	1
1.1.1 数値計算とは	1
1.1.2 数式処理と数値計算の違い	2
1.2 漸化式と再帰式	3
1.2.1 漸化式	3
1.2.2 再帰式	4
1.2.3 加重平均	5
1.3 逐次近似, 周期解, 反復計算	5
1.3.1 逐次近似	5
1.3.2 周期解	7
1.3.3 反復計算	8
1.3.4 2段階法	8
1.4 誤差の取扱いと解の確認	9
1.4.1 2数の四則演算の誤差	9
1.4.2 コンピュータ上の精度と丸め誤差	9
1.4.3 解の確認	10
1.5 記述法	10
1.5.1 数式の記述法	10
1.5.2 手法の記述法とループ	11
1.5.3 FortranとC言語の適用アルゴリズムの違い	12
1.5.4 プログラムの記述様式(書式)	13
1.6 Fortran90/95の新しい機能	13
1.6.1 記述法	13

1.6.2	配列 .....	15
1.6.3	再帰式 .....	15
1.6.4	データ構造 .....	16
1.6.5	サブルーチンの引数と共用変数 .....	16
1.6.6	並列処理 (Fortran95 だけ) .....	17
1.7	計算量と処理量 .....	17
1.7.1	計算量 .....	17
1.7.2	処理量と処理時間 .....	18
1.8	数学ソフトウェア .....	18
1.8.1	書籍 .....	19
1.8.2	コンピュータ・ネットワークの利用 .....	19
1.8.3	市販の数値計算ソフトウェアと図形処理ソフトウェア ..	19
1.8.4	ベクトル計算機や並列処理 .....	20
1.9	考察 .....	20
<b>第 2 章</b>	<b>非線形方程式の解</b> .....	<b>21</b>
2.1	単一方程式の場合 .....	21
2.1.1	逐次 2 分法 .....	21
2.1.2	ニュートン-ラフソン (Newton-Raphson) 法 .....	23
2.1.3	線形逆補間法 .....	25
2.1.4	ベイリー (Bailey) 法 .....	26
2.2	連立非線形方程式 .....	27
2.2.1	ニュートン (Newton) 法 .....	27
2.2.2	修正ニュートン法 .....	29
2.3	カオス型非線形方程式 .....	30
2.4	多項式の解 .....	32
2.4.1	リン-ベアストウ (Lin-Bairstow) 法 .....	32
2.4.2	固有値の利用 .....	35
2.5	考察 .....	36
2.5.1	$m$ 重根のときのニュートン法 (シュレーダ法) .....	36
2.5.2	非線形方程式用のブロイデン法 .....	37

練習問題 .....	37
<b>第 3 章 連立 1 次方程式と逆行列</b> .....	<b>39</b>
3.1 行列演算の基礎 .....	39
3.1.1 ベクトル .....	39
3.1.2 行列の種類 .....	40
3.1.3 ベクトルと行列の積 .....	41
3.1.4 基本行列による演算 .....	42
3.2 3重対角系の解法 .....	43
3.3 ガウス消去法と $LU$ 分解法 .....	45
3.3.1 ガウス消去法 .....	45
3.3.2 軸選択 .....	47
3.3.3 コレスキー分解と改訂コレスキー分解 .....	49
3.3.4 逆行列の計算 .....	50
3.3.5 行列の階数, 条件数, 均衡化 .....	52
3.4 反復法 .....	53
3.4.1 古典的反復法 .....	53
3.4.2 その他の反復法について .....	55
3.5 考察 .....	57
練習問題 .....	57
<b>第 4 章 固有値と固有ベクトル</b> .....	<b>59</b>
4.1 固有値と固有ベクトル .....	59
4.1.1 はじめに .....	59
4.1.2 固有値の応用—2 次形式 .....	61
4.2 古典的方法 .....	63
4.2.1 べき乗法 .....	63
4.2.2 逆反復法 .....	64
4.2.3 ヤコビ法 .....	66
4.3 直交化 .....	68
4.3.1 グラム-シュミットの直交分解 .....	68

4.3.2	ハウスホルダ変換とヘッセンベルク変換 .....	69
4.4	QR法 .....	72
4.5	一般化固有値問題 .....	73
4.6	考察 .....	74
	練習問題 .....	74
<b>第5章</b>	<b>数値微分と数値積分法</b> .....	<b>76</b>
5.1	数値微分 .....	76
5.1.1	数値微分の基礎 .....	76
5.1.2	リチャードソン (Richardson) の外挿 .....	78
5.2	数値積分の概要 .....	78
5.2.1	簡単な積分法 .....	79
5.3	重みを利用した方法 .....	81
5.3.1	ガウス積分法 .....	82
5.3.2	ガウス-ルジャンドル (Legendre) 積分法 .....	84
5.4	ニュートン-コーツ (Newton-Cotes) 求積法 .....	86
5.4.1	台形則 .....	86
5.4.2	シンプソン (Simpson) の 1/3 則 .....	87
5.4.3	ニュートンの 3/8 則 .....	88
5.4.4	4区間のとき .....	89
5.5	ガウス積分法とロンバーグ法 .....	90
5.5.1	ガウス積分法 .....	90
5.5.2	ロンバーグ (Romberg) 積分 .....	91
5.6	2変数関数の数値積分 .....	92
5.6.1	$y$ が区間 $[c, d]$ にあるとき .....	93
5.6.2	$y = (\xi(x), \phi(x))$ のとき .....	93
5.7	考察 .....	96
	練習問題 .....	98
<b>第6章</b>	<b>補間法</b> .....	<b>99</b>
6.1	はじめに .....	99

6.2	線形補間と2次補間 .....	100
6.2.1	線形補間 .....	100
6.2.2	2次補間 .....	102
6.3	ラグランジュ(Lagrange)補間 .....	103
6.3.1	標準のラグランジュ補間 .....	104
6.3.2	区分ラグランジュ補間 .....	105
6.4	エルミート補間 .....	107
6.4.1	標準のエルミート補間 .....	107
6.4.2	区分エルミート多項式 .....	107
6.4.3	基底関数の採用 .....	109
6.5	3次スプライン補間 .....	110
6.6	高速フーリエ変換(FFT) .....	112
	練習問題 .....	115

## 第7章 常微分方程式 116

7.1	常微分方程式の解法 .....	116
7.1.1	固有値を利用した解 .....	117
7.1.2	差分方程式 .....	118
7.1.3	常微分方程式の差分化 .....	121
7.2	ルンゲ-クッタ(Runge-Kutta)法 .....	122
7.2.1	オイラー(Euler)法 .....	122
7.2.2	ルンゲ-クッタ法 .....	124
7.3	予測子-修正子法 .....	127
7.3.1	アダムス法の原理 .....	127
7.3.2	アダムス-バッシフォース-ムールトン法 .....	128
7.3.3	エルミート(Hermite)法 .....	131
7.4	微分方程式モデルの例 .....	131
7.4.1	ファン・デル・ポル(Van der Pol)モデル .....	131
7.4.2	ロトカ-ボルテラ(Lotka-Volterra)補食モデル .....	132
	練習問題 .....	133

<b>第 8 章 最小 2 乗法と関数の最小値</b>	<b>135</b>
8.1 線形の場合	135
8.1.1 2 変数の場合	135
8.1.2 多変数の場合	138
8.2 多項式の場合	139
8.2.1 単純な場合	139
8.2.2 直交多項式による当てはめ	140
8.3 関数の最小値	142
8.3.1 1 変数関数の最小値	143
8.3.2 多変数関数の最小値	145
8.4 非線形最小 2 乗法	147
8.4.1 疑似線形の場合	147
8.4.2 非線形最小 2 乗法	147
練習問題	151
<b>第 9 章 偏微分方程式と有限要素法</b>	<b>152</b>
9.1 残差法による近似解	152
9.1.1 選点法 (collocation method)	153
9.1.2 最小 2 乗法	153
9.1.3 モーメント法	154
9.1.4 ガレルキン (Galerkin) 法	154
9.1.5 2 次元の場合	155
9.2 区分多項式と有限要素法	155
9.2.1 区分多項式による試験関数	155
9.2.2 ガレルキン有限要素法	158
9.2.3 三角要素による有限要素法	159
9.3 1 次元偏微分方程式の解	161
9.3.1 常微分方程式系による解法	161
9.3.2 差分法	162
9.3.3 有限要素法	163
9.4 2 次元移流拡散方程式と有限要素法	165

9.5 考察 .....	172
<b>第 10 章 カオスとフラクタル</b> .....	<b>174</b>
10.1 1次元のカオス .....	174
10.1.1 成長曲線 .....	174
10.1.2 吸引点, 反発点, 周期 .....	177
10.1.3 分岐 .....	178
10.2 2次元のカオス .....	180
10.3 微分方程式のカオス .....	182
10.4 反復関数系によるフラクタル .....	184
10.4.1 自己相似形 .....	184
10.4.2 回転系 .....	186
10.4.3 ニュートンの反復法 .....	188
10.5 ジュリア集合とマンデルブロ集合 .....	189
10.5.1 ジュリア集合 .....	189
10.5.2 マンデルブロ集合 .....	191
<b>第 11 章 統計計算</b> .....	<b>192</b>
11.1 記述統計 .....	192
11.1.1 基本統計量 .....	192
11.1.2 度数分布表の統計量 .....	193
11.1.3 層別データの平均値と分散 .....	194
11.1.4 平均値の平均と分散 .....	196
11.2 分布関数 .....	196
11.2.1 2項分布 .....	196
11.2.2 ポアソン分布 .....	197
11.2.3 正規分布 .....	198
11.2.4 $t$ 分布と $\chi^2$ 分布 .....	198
11.3 回帰分析 .....	200
11.3.1 共分散と相関 .....	200
11.3.2 正規化(標準得点) .....	200



11.3.3	拡大行列による残差の計算 .....	201
11.3.4	回帰係数の分散 .....	202
11.4	多変量分析 (主成分分析) .....	202
11.5	予測 .....	203
11.5.1	移動平均法 .....	204
11.5.2	移動平均と多項式回帰の関係 .....	205
11.5.3	指数平滑法 .....	206
11.6	区間推定 .....	207
11.6.1	平均値の信頼区間 .....	208
11.6.2	分散の信頼区間 .....	209
11.7	考察 .....	209
	練習問題 .....	210

## 第 12 章 乱数とモンテカルロ・シミュレーション 211

12.1	乱数の発生法 .....	212
12.1.1	一様乱数 .....	212
12.1.2	正規乱数 .....	213
12.1.3	指数乱数 .....	214
12.1.4	一様乱数の検定 .....	214
12.2	乱数の基礎的利用 .....	215
12.3	フラクタルとの関係 .....	218
12.3.1	パターンの作成 .....	218
12.3.2	フラクタル島 .....	218
12.3.3	山の作成 .....	220
12.4	多重数値積分 .....	220
12.4.1	疑似乱数使用の原理 .....	220
12.4.2	多次元の場合 .....	222
12.4.3	準乱数の使用 .....	223
12.5	離散型シミュレーションと分布系 .....	225
12.6	考察 .....	225

<b>付録 プログラム</b>	<b>226</b>
A.1 Fortran .....	226
A.1.1 非線形方程式の解 .....	226
A.1.2 連立1次方程式と逆行列 .....	234
A.1.3 固有値と固有ベクトル .....	244
A.1.4 数値積分法 .....	252
A.1.5 補間法 .....	258
A.1.6 常微分方程式 .....	262
A.1.7 最小2乗法と関数の最小値 .....	268
A.1.8 カオスとフラクタル .....	274
A.2 C言語 .....	275
A.2.1 非線形方程式 .....	275
A.2.2 数値微分と数値積分 .....	277
A.3 Java .....	280
A.3.1 非線形方程式 .....	280
A.3.2 数値積分 .....	281
A.3.3 カオスとフラクタル .....	283
<b>問題の解答</b>	<b>293</b>
<b>参考文献</b>	<b>301</b>
<b>索引</b>	<b>303</b>