目　　次

1. 序　　論 ……… 1

1.1 計算科学とは ……… 1

1.1.1 研究の進め方 ……… 2

1.2 この教科書のねらい ……… 3

1.3 付録と Web 上のプログラムの利用 ……… 4

2. 科学計算ソフトウェアの基礎 ……… 7

2.1 課題 1：コンピューターを動かす ……… 7

2.2 理論：コンピューター言語 ……… 7

2.3 プログラミング：概念 ……… 9

2.4 プログラミング：Fortran, area.f ……… 10

2.5 プログラミング：C, area.c ……… 11

2.6 プログラミング：シェル，エディター，プログラム ……… 11

2.7 理論：プログラムのデザイン ……… 12

2.8 手法：構造化プログラミング ……… 15

2.9 手法：プログラミングのヒント ……… 17

2.10 課題 2：扱える数字の限界 ……… 19

2.11 理論：数の表現 ……… 19

2.12 手法：固定小数点と浮動小数点 ……… 20

2.13 プログラミング：オーバーフローとアンダーフロー，over.f (.c) ……… 22

2.14 モデル：マシン精度 ……… 23

2.15 プログラミング：マシン精度の見極め，limit.f (.c) ……… 24

2.16 課題 3：複素数と逆関数 ……… 25

2.17 理論：複素数 ……… 25

2.18 プログラミング：複素数，complex.c (.f) ……… 26

2.19 進んだ話題：量子論における複素エネルギー ……… 27

2.20 課題 4：級数の和をとる ……… 28

2.21 手法：計算のテクニック ……… 28

2.22 プログラミング：疑似コード ……… 29

2.23 プログラミング：よいアルゴリズム，exp-good.f (.c) ……… 29

2.24　プログラミング：悪いアルゴリズム，exp-bad.f (.c) …… 29
2.25　検　　討 …… 29

3.　数値計算の誤差と不確実さ …… 30
3.1　課題：誤差を減らす …… 30
3.2　理論：誤差の発生パターン …… 30
3.3　モデル：桁落ち …… 32
3.4　検討：桁落ちの実験 …… 33
3.5　モデル：掛け算による丸め誤差 …… 35
3.6　課題 1：球ベッセル関数における誤差 …… 36
3.7　手法：数値計算に適した漸化式 …… 38
3.8　プログラミング：漸化式，bessel.f (.c) …… 39
3.9　検　　討 …… 39
3.10　課題 2：アルゴリズムに起因する誤差 …… 40
3.11　モデル：アルゴリズムに起因する誤差 …… 40
3.11.1　総合的誤差 …… 41
3.12　手法：誤差の振舞いが既知のときの最適化 …… 41
3.13　手法：経験的な誤差解析 …… 42
3.14　検討：実験 …… 43

4.　積　　分 …… 45
4.1　課題：スペクトル曲線の積分 …… 45
4.2　モデル：求積，棒グラフの面積 …… 45
4.3　手法：台形則 …… 48
4.4　手法：シンプソン則 …… 49
4.5　検討：積分誤差の見積もり …… 50
4.6　手法：ガウスの求積法 …… 52
4.6.1　積分法の選択にともなう縮尺の変更 …… 54
4.7　プログラミング：積分，integ.f (.c) …… 55
4.8　検討：経験的な誤差の見積もり …… 56
4.9　検討：実験 …… 57
4.10　手法：ローンバーグの外挿法 …… 57
4.10.1　ニュートン–コーツの公式を用いたその他の方法 …… 57

5. データ解析 ………… 59
5.1 課題：実験で得られたスペクトルの解析 ………… 59
5.2 理論：最適な曲線を決める ………… 59
5.3 手法：ラグランジュの補間法 ………… 61
5.3.1 例 ………… 62
5.4 プログラミング：ラグランジュ補間，lagrange.f ………… 62
5.5 検討：共鳴スペクトルの補間 ………… 63
5.6 検討と展開 ………… 64
5.7 手法：3次のスプライン ………… 64
5.7.1 3次のスプラインにおける境界条件 ………… 66
5.7.2 展開：3次のスプラインを用いた求積 ………… 67
5.8 プログラミング：入手可能なスプライン補間のサブプログラム，spline.f 67
5.9 検討：スプライン補間の共鳴断面積への適用 ………… 67
5.10 課題：指数関数的に減衰するデータの補間 ………… 68
5.11 モデル：指数関数的な減衰 ………… 68
5.12 理論：確率論 ………… 69
5.13 手法：最小2乗法によるフィッティング ………… 72
5.14 理論：フィットのよさ ………… 74
5.15 プログラミング：最小2乗法によるフィット，fit.f (.c) ………… 74
5.16 検討：指数関数的な減衰曲線の解析 ………… 76
5.17 検討：熱流の解析 ………… 77
5.18 プログラミング：2次関数の係数を決める線形回帰 ………… 78
5.19 検討：2次関数のフィット ………… 79
5.20 手法：非線形最小2乗法 ………… 79
5.21 検討：非線形最小2乗法によるフィット ………… 79

6. 決定論的世界のランダム現象 ………… 80
6.1 課題：決定論的世界のランダム現象 ………… 80
6.2 理論：乱数列 ………… 80
6.3 手法：疑似乱数の発生 ………… 81
6.4 検討：乱数列 ………… 83
6.5 プログラミング：単純だが実用的ではない random.f (.c)，
実用に耐える call.f (.c) ………… 84
6.6 検討：ランダムで一様な分布 ………… 84
6.7 検討：ランダム性と一様性のテスト ………… 86

6.8　課題：ランダムウォーク …… 86
6.9　モデル：ランダムウォークのシミュレーション …… 86
6.10　手法：ランダムウォークの数値計算 …… 87
6.11　プログラミング：ランダムウォーク，walk.f (.c) …… 88
6.12　検討：歩幅がいつも「1」のランダムウォーク …… 88

7.　モンテカルロ法の応用 …… 90
7.1　課題：放射性崩壊 …… 90
7.2　理論：自然崩壊 …… 90
7.3　モデル：離散的な崩壊 …… 90
7.4　モデル：連続的な崩壊 …… 92
7.5　手法：放射性崩壊のシミュレーション …… 92
7.6　プログラミング：放射性崩壊，decay.f (.c) …… 94
7.7　検討：崩壊の可視化 …… 94
7.8　課題：石を投げて面積を測る …… 94
7.9　理論：棄却法による積分 …… 94
7.10　プログラミング：石投げ，pond.f (.c) …… 95
7.11　課題：多次元の積分 …… 96
7.12　手法：平均値による積分 …… 96
7.12.1　多次元のモンテカルロ法 …… 98
7.13　検討：多次元の積分における誤差 …… 98
7.14　プログラミング：モンテカルロ法による 10 次元の積分，int_10d.f (.c) 98
7.15　課題：急速に変化する関数の MC 積分* …… 98
7.16　手法：分散の減少* …… 99
7.17　手法：加重サンプリング* …… 99
7.18　プログラミング：一様でない乱数の選択* …… 100
7.18.1　逆変換と変数変換法 …… 100
7.18.2　一様な重み関数 …… 101
7.18.3　指数関数的な重み …… 102
7.18.4　ガウス (正規) 分布 …… 102
7.18.5　中央極限定理にもとづくガウス分布の発生 …… 103
7.19　手法：フォン・ノイマンの棄却法* …… 104
7.20　検　　討* …… 105

8. 微　　分 …… 106
8.1 課題 1：数値計算における極限操作 …… 106
8.2 手法：数値計算の限界 …… 106
8.2.1 手法：前進差分 …… 106
8.2.2 手法：中心差分 …… 107
8.2.3 手法：拡張された中心差分 …… 108
8.3 検討：誤差解析 …… 109
8.4 プログラミング：微分，diff.f(.c) …… 110
8.5 検討：誤差解析 …… 110
8.6 課題 2：2 次導関数 …… 111
8.7 理論：ニュートンの第 2 法則 …… 111
8.8 手法：数値的な 2 次導関数 …… 111
8.9 検討：数値的な 2 次導関数 …… 112

9. 微分方程式と振動 …… 113
9.1 課題：非調和振動子の強制振動 …… 113
9.2 理論，物理：ニュートンの法則 …… 113
9.3 モデル：非調和振動子 …… 114
9.4 理論，数学：微分方程式の種類 …… 115
9.4.1 微分方程式の階数 …… 115
9.4.2 常微分方程式と偏微分方程式 …… 116
9.4.3 線形微分方程式と非線形微分方程式 …… 116
9.4.4 初期条件と境界条件 …… 117
9.5 理論，数学，物理：連立 1 階微分方程式による表現 …… 118
9.5.1 2 階常微分方程式の連立 1 階微分方程式による表現 …… 118
9.6 プログラミング：振動子の運動方程式，連立 1 階微分方程式による表現 119
9.7 数値的：微分方程式を解くためのアルゴリズム …… 120
9.8 手法 (数値的)：オイラーのアルゴリズム …… 120
9.9 手法 (数値的)：2 次のルンゲ-クッタ法 …… 122
9.10 手法 (数値的)：4 次のルンゲ-クッタ法 …… 124
9.11 プログラミング：常微分方程式の数値解法，rk4.f(.c) …… 124
9.12 検討：rk4 と調和振動子 …… 125
9.13 検討：rk4 と非調和振動子 …… 125
9.14 展開：エネルギー保存 …… 126

10. 量子力学の固有値問題：ゼロ点の探索と滑らかに接続する解 ………… 127
10.1 課題：量子力学的な粒子の束縛状態 ………… 127
10.2 理論：量子論的な波動 ………… 127
10.3 モデル：箱のなかの粒子 ………… 128
10.4 解：半古典論 ………… 129
10.5 手法：二分法によるゼロ点の探索 ………… 131
10.6 手法：微分方程式の解と固有値 ………… 132
10.6.1 滑らかに接続する解の探索 ………… 134
10.7 プログラミング：微分方程式の固有値，numerov.c ………… 135
10.8 検討と展開 ………… 137
10.9 展開：方程式の根を求めるニュートンの方法 ………… 138

11. 非調和振動 ………… 139
11.1 課題1：調和振動子に非線形な摂動が加わった場合 ………… 139
11.2 理論：ニュートンの第2法則 ………… 139
11.3 プログラミング：常微分方程式の解，rk4.f (c) ………… 140
11.4 検討：振動振動数の振幅依存性 ………… 140
11.5 課題2：物理振子 ………… 141
11.6 理論：回転運動についてのニュートンの第2法則 ………… 141
11.7 手法 (解析的)：楕円積分 ………… 142
11.8 プログラミング：rk4 による振子運動の解析 ………… 143
11.9 展開：共鳴とうなり ………… 143
11.10 展開：位相空間での描画 ………… 145
11.11 展開：減衰振動 ………… 145

12. 非線形振動のフーリエ解析 ………… 147
12.1 課題1：非線形振動の高調波成分 ………… 147
12.2 理論：フーリエ解析 ………… 148
12.2.1 例1：のこぎり波 ………… 150
12.2.2 例2：半波整流波 ………… 151
12.3 検討：フーリエ級数の和 ………… 151
12.4 理論：フーリエ変換 ………… 152
12.5 手法：離散的フーリエ変換 ………… 153
12.6 方法：フーリエ級数を求めるための DFT ………… 157
12.7 プログラミング：DFT, fourier.f (.c), invfour.c ………… 159

12.8 検討：簡単な解析的関数を使った入力 …… 159
12.9 検討：非線形性の強い振動子 …… 159
12.10 検討：非線形摂動を受けた振動子 …… 160
12.11 展開：非周期的な関数の DFT …… 160
12.12 検討：雑音を含む信号の処理 …… 160
12.13 モデル：自己相関関数 …… 161
12.14 検討：DFT と自己相関関数 …… 162
12.15 課題 2：データ解析のモデル依存性* …… 163
12.16 手法：モデルによらないデータ解析 …… 163
12.17 検　討 …… 165

13. 非線形系の不思議なダイナミクス …… 167
13.1 課題：虫の個体数の変化 …… 167
13.2 理論：非線形ダイナミクス …… 167
13.3 モデル：非線形な成長，ロジスティック写像 …… 168
13.3.1 ロジスティック写像 …… 169
13.4 理論：非線形写像の特徴 …… 170
13.4.1 不 動 点 …… 171
13.4.2 2 重周期，アトラクター …… 171
13.5 プログラミングと検討：ロジスティック写像 …… 172
13.6 検討：2 分岐ダイアグラム …… 173
13.7 プログラミング：2 分岐ダイアグラム，bugs.f (.c) …… 174
13.8 展開：ロジスティック写像を使った乱数 …… 176
13.9 展開：ファイゲンバウム定数 …… 176
13.10 展開：他の写像 …… 176

14. 微分方程式とカオス：位相空間での表現 …… 178
14.1 課題：カオス的な振子 …… 178
14.2 理論とモデル：カオス的な振子 …… 178
14.3 理論：リミットサイクルと同期現象 …… 180
14.4 プログラミング 1：常微分方程式の解，rk4.f (.c) …… 181
14.5 検討と可視化：位相軌道 …… 181
14.6 プログラミング 2：位相空間での自由振動 …… 183
14.7 理論：位相空間でのカオス的運動とランダムな運動 …… 184
14.8 プログラミング 3：カオス的な振子 …… 184

14.9　検討：位相空間でのカオス的な構造 …… 186
14.10　検討：カオス的な振子のフーリエ解析 …… 187
14.11　展開：軸が振動する振子 …… 187
14.11.1　プログラミング：振子の2分岐ダイアグラム …… 188
14.12　さらに進んだ展開 …… 189

15.　行列の数値計算とサブルーチン・ライブラリー …… 192
15.1　課題1：連立1次方程式 …… 192
15.2　課題1(定式化)：1次方程式から行列方程式へ …… 193
15.3　課題2：簡単だが解けない静力学 …… 193
15.4　課題2：理論，静力学 …… 193
15.5　課題2(定式化)：連立非線形方程式 …… 194
15.6　理論：行列問題 …… 196
15.6.1　行列問題の分類 …… 197
15.7　方法：行列計算 …… 199
15.8　プログラミング：科学技術計算ライブラリーの利用，WWW …… 203
15.9　プログラミング：利用可能なライブラリー …… 205
15.9.1　ライブラリーの内容を見極める …… 206
15.9.2　必要なルーチンを選ぶ …… 207
15.9.3　プログラミング：DEC Fortran から LAPACK を呼ぶ，lineq.c　208
15.9.4　C から LAPACK を呼ぶ …… 208
15.9.5　C から LAPACK Fortran を呼ぶ …… 210
15.9.6　Fortran を呼ぶ C のコンパイル …… 211
15.10　拡張：Netlib ライブラリー …… 211
15.10.1　SLATEC の共同利用数学ライブラリー …… 211
15.11　練習：行列演算ルーチンのテスト …… 212
15.12　プログラミング：LAPACK 概要 …… 214
15.13　プログラミング：Netlib 概要 …… 217
15.14　プログラミング：SLATEC 概要 …… 219

16.　束縛状態，運動量空間での表現 …… 230
16.1　課題：非局所ポテンシャルによる束縛状態 …… 230
16.2　理論：k–空間でのシュレーディンガー方程式 …… 231
16.3　手法：積分から1次方程式へ …… 233
16.4　モデル：δ–殻ポテンシャル …… 235

16.5 プログラミング：束縛エネルギー，bound.c (.f) ………… 236
16.6 展開：波動関数 ………… 236

17. 量子力学的散乱：積分方程式の解法* ………… 238
17.1 課題：k–空間での量子力学的散乱 ………… 238
17.2 理論：リップマン–シュウィンガー方程式 ………… 238
17.3 理論 (数学)：特異積分 ………… 240
17.3.1 主値積分の数値計算 ………… 241
17.4 手法：積分から行列方程式へ ………… 242
17.4.1 逆行列あるいは消去法を用いて得られる解法 ………… 244
17.4.2 $i\epsilon$ を含む積分方程式の解法* ………… 244
17.5 プログラミング：δ–殻ポテンシャル, scatt.f ………… 245
17.6 展開：散乱波動関数 ………… 246

付 録
A：Fortran と C の対比 ………… 1
B：プログラム名一覧 ………… 3
C：プログラムのソースコード ………… 6
C のソースコード ………… 7
Fortran のソースコード ………… 21

文 献 ………… 36

参考文献 ………… 38

索 引 ………… 42