数値計算の基礎

本章では、導入としていくつかの簡単な例をとおして、数値計算とはどのようなものか、そして数値計算を行う上でどのような点に注意すべきかを述べることにします.

1.1 アルゴリズム

数学的には同じ答が得られる計算であっても計算の方法を工夫することにより計算量を減らせることがあります. 例を2つほどあげます.

Example 1.1.1

 x^{32} の計算の乗算回数を求めなさい.

[Answer]

ふつうに計算すれば,

$$x \times x \times \cdots \times x \tag{1.1.1}$$

というようにxに対して31回掛け算することになります。しかし、

$$a = x^2 \tag{1.1.2}$$

とおき, 同様に

$$b = a^{2} (= x^{4})$$

 $c = b^{2} (= x^{8})$
 $d = c^{2} (= x^{16})$

$$e = d^2 \ (= x^{32}) \tag{1.1.3}$$

と計算すれば掛け算は5回ですみます.

Example 1.1.2

4次式の計算の乗算回数を求めなさい.

[Answer]

$$y_4 = a_0 x^4 + a_1 x^3 + a_2 x^2 + a_3 x + a_4 (1.1.4)$$

の右辺を計算することを考えます.このまま計算すると,第1項に対しては x^4 の計算に3回の掛け算が必要で,それに a_0 を掛けるので合計4回の掛け算が必要です.同様に2, 3, 4項の計算にはそれぞれ3, 2, 1回の掛け算が必要なので全体では掛け算は

$$4 + 3 + 2 + 1 = 10 \, \Box \tag{1.1.5}$$

必要になります。また足し算は4回となります。ただし、 x^4 を計算する場合には、すでに x^2 と x^3 の計算は済んでいるのでそれを利用することにすれば、掛け算の回数は

$$4 + 1 + 1 + 1 = 7 \, \Box \tag{1.1.6}$$

に減ります.

一方,上式は

$$y_1 = a_0 x + a_1$$

$$y_2 = y_1 x + a_2$$

$$y_3 = y_2 x + a_3$$

$$y_4 = y_3 x + a_4$$

という計算に分解できます.このことは上から順に代入することにより確かめられます.ここで,それぞれの式では1回の掛け算と1回の足し算を行っているため,合計4回の掛け算と4回の足し算で計算できます.

これらの例ではある数値を計算するために2つの計算法を比較しました. 一般に、目的となる数値を得るために行う一連の計算方法をアルゴリズムとよんでいますが、上の例のように、同一の結果を得るアルゴリズムはひとつではありません. 計算量の観点からいえば、上の2つの例ではあとに述べたものの方が優れています.

1.2 漸化式と反復法

Example 1.1.2 を一般化して, n 次多項式

$$y = a_0 x^n + a_1 x^{n-1} + a_2 x^{n-2} + \dots + a_{n-1} x + a_n$$
 (1.2.1)

の値を求める問題を考えます. この場合も

$$y_1 = a_0 x + a_1$$

 $y_2 = y_1 x + a_2$
 \vdots
 $y_n = y_{n-1} x + a_n$ (1.2.2)

とおき、上から順に y_1 , y_2 , … y_n を計算します。この手続きは、以下のようにまとめられます:

Point

多項式の値

 $y_0=a_0$ とおく $i=1,\;2,\;\cdots,\;n\; の順に次式を計算する: \eqno(1.2.3)$

$$y_i = y_{i-1}x + a_i$$

これが多項式の値を求めるひとつのアルゴリズムです.

 y_i を数列と考えたとき、式(1.2.3)のように数列の近接した項の間に関係式が与えられた場合、その関係式を**漸化式**といいます。漸化式は数値計算ではいたるところに現れます。

漸化式の応用例として,2次方程式

$$x^2 - x - 1 = 0 ag{1.2.4}$$

を考えます. この方程式は

$$x = 1 + \frac{1}{x} \tag{1.2.5}$$

と変形できます. そこで, この式から漸化式

$$x_{i+1} = 1 + \frac{1}{x_i} \tag{1.2.6}$$

をつくり, $x_0 = 1$ からはじめて, x_1 , x_2 , x_3 , … を計算すると

 $1, 2, 1.5, 1.6667, 1.6250, 1.6154, 1.6190, 1.6176, \cdots$

となります.

この数列から、上の漸化式の値はある一定の数に近づくことが予想できます。 この一定値はもとの2次方程式のひとつの根

$$\alpha = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} = 1.6181 \dots \tag{1.2.7}$$

です。なぜなら、一定値 α に落ち着いたとすれば、漸化式の右辺の x_i も左辺の x_{i+1} も共に α となるので、 α は方程式

$$\alpha = 1 + \frac{1}{\alpha} \tag{1.2.8}$$

を満足するからです. 逆にいえば、漸化式(1.2.6)は2次方程式(1.2.4)の根を 求めるひとつの方法になっています. このように漸化式を利用して方程式の根 を求める方法を**反復法**とよびます. また反復法に利用される漸化式を特に**反復** 式とよんでいます.

方程式(1.2.4)を解く反復式は一通りではありません。たとえば、式(1.2.4)から

$$x = \sqrt{x+1} \tag{1.2.9}$$

という式も得られ、少し変わったものとしては

$$x = \frac{x^2 + 1}{2x - 1} \tag{1.2.10}$$

という式にも変形できます. なぜ後者の式を選んだかは次章で明らかになります. そこで, これらの式からそれぞれ次の反復式

$$x_{i+1} = \sqrt{x_i + 1} \tag{1.2.11}$$

$$x_{i+1} = \frac{x_i^2 + 1}{2x_i - 1} \tag{1.2.12}$$

が得られます。 共に $x_0=1$ からはじめて順次計算を進めれば、式(1.2.11)では

 $1,\ 1.4142,\ 1.5538,\ 1.5981,\ 1.6118,\ 1.6161,\ 1.6174,\ \cdots$

となり、式(1.2.12)では

 $1, 2, 1.6667, 1.6190, 1.6180, \cdots$

となります。式(1.2.11)では数列は単調増加しながら正解に近づきます。一方,式(1.2.12)では他の2つの反復式より速く正解に近づくことがわかります。

1.3 誤差

コンピュータでは最終的には電圧の高低でふたつの状態を区別します。そこで例えば電圧の高い場合を 1、低い場合を 0 とすれば、内部の状態は 2 進数で表されます。したがって、数値も最終的には 2 進数で表現されます。その場合、コンピュータでは無限桁の計算ができないので、数値は 16 桁とか 32 桁といった有限の桁数で表されます。一方、実数を小数で表したとき無限桁になることがふつうであり、またたとえば 0.1 のように、たとえ 10 進数では有限桁の数であっても 2 進数では無限桁になってしまうこともあります。このような場合には、表現しきれない桁に対して切り捨てや四捨五入が行われます。したがって、コンピュータには必然的に誤差が入ることになります。このように、本来無限桁の数を有限桁で表現するために生じる誤差を丸め誤差とよんでいます。

別の種類の誤差もあります.このことを理解するために,三角関数や指数関数の値など、本来は四則演算では計算できない値を求めることを考えてみます. 実はコンピュータで三角関数や指数関数の値を計算する場合には,これらの関数を四則演算で計算可能な近似式で代用しています.具体的には多項式を用いることが多いのですが,その場合,数学的には無限の項をもった多項式を用いないと正確には一致しません.一方,コンピュータでは無限項の計算はできないため、有限項で打ち切ってしまいます.このとき必然的に誤差が生じますが,このような誤差を打ち切り誤差とよんでいます.

誤差はコンピュータでは避けられないものなので、それが計算結果に悪影響を及ぼさないようにアルゴリズムの側で注意する必要があります。以下にアルゴリズムの選択が特に重要な場合を $x(\sqrt{x^2+1}-x)$ の計算を例にとって説明します。

仮にあるコンピュータの有効数字が 8 桁であったとします。たとえば $x=10^4$ のときの関数値を計算する場合(正確な値は $0.49999999875\cdots$), 根号内は下確には 10^8+1 となりますが、有効数字が 8 桁なので 1 は無視され、 10^8 と

Example 1.3.1

係数の絶対値が極端に異なる2次方程式

[Answer]

2次方程式

$$ax^2 + bx + c = 0 ag{1.3.5}$$

の根は、ふつう根の公式

$$x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \tag{1.3.6}$$

で求めます. しかし, b^2 が 4ac よりずっと大きい場合には問題がおきます. なぜなら, そのようなときには

$$\sqrt{b^2 - 4ac} \sim |b| \tag{1.3.7}$$

なので、上式の分子の計算において、+または-の計算のどちらかで桁落ちが起きるからです。この場合、桁落ちを防ぐには以下のようにします。まず、b>0のときは

$$x_1 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \tag{1.3.8}$$

に対しては桁落ちが起きないため、この式を用いてひとつの根を求めます. も うひとつの根は、公式を用いずに根と係数の関係

$$x_1 x_2 = -\frac{c}{a} (1.3.9)$$

から求れば桁落ちは起きません。b < 0の場合も同様にして、ひとつの根を

$$x_2 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \tag{1.3.10}$$

から求め、もうひとつの根を根と係数の関係から求めます.

Problems Chapter 1

- 1. n 次の行列式を展開して計算する場合の乗算回数を求めなさい.
- 2. e^x の近似値 s を n を適当な整数として

$$s = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^n}{n!} \ge s = \frac{x^n}{n!} + \dots + \frac{x^2}{2!} + \frac{x}{1!} + 1$$

で求める場合どちらがよいか考えなさい.

- 3. x を近似値, \bar{x} を真の値としたとき $\varepsilon(x)=|\bar{x}-x|$ (絶対誤差) に対して 次式が成り立つことを示しなさい ($\bar{B}\neq 0$).
 - (a) $\varepsilon(AB) = \bar{B}\varepsilon(A) + \bar{A}\varepsilon(B)$
 - (b) $\varepsilon(A/B) = \varepsilon(A)/\bar{B} \bar{A}\varepsilon(B)/\bar{B}^2$