

コンパクトシリーズ 数学

数値計算

河村哲也 著

Preface

大学で理工系を選ぶみなさんは、おそらく高校の時は数学が得意だったのではないのでしょうか。本シリーズは高校の時には数学が得意だったけれども大学で不得意になってしまった方々を主な読者と想定し、数学を再度得意になっていただくことを意図しています。それとともに、大学に入って分厚い教科書が並んでいるのを見て尻込みしてしまった方を対象に、今後道に迷わないように早い段階で道案内をしておきたいという意図もあります。

数学は積み重ねの学問ですので、ある部分でつまずいてしまうと先に進めなくなるという性格をもっています。そのため分厚い本を読んでいて、枝葉末節にこだわると読み終えないうちに嫌になるということが多々あります。このような時には思い切って先に進めばよいのですが、分厚い本だとまた引っかかる部分が出てきて、自分は数学に向かないとあきらめてしまうことになりかねません。

このようなことを避けるためには、第一段階の本、あるいは読み返す本は「できるだけ薄い」のがよいと著者は考えています。そこで本シリーズは大学の2～3年次までに学ぶ数学のテーマを扱いながらも重要な部分を抜き出し、一冊については本文は70～90頁程度（Appendix や問題解答を含めてもせいぜい100～120頁程度）になるように配慮しています。具体的には本シリーズは

微分・積分

線形代数

常微分方程式

ベクトル解析

複素関数論

フーリエ解析・ラプラス変換

数値計算

の7冊からなり、ふつうの教科書や参考書ではそれぞれ200～300ページになる内容のものですが、それをわかりやすさを保ちながら凝縮しています。

なお、本シリーズは性格上、あくまで導入を目的としたものであるため、今後、数学を道具として使う可能性がある場合には、本書を読まれたあともう一度、きちんと書かれた数学書を読んでいただきたいと思います。

河村 哲也

Contents

Preface	i
<hr/>	
Chapter 1	
数値計算の基礎	1
1.1 アルゴリズム	1
1.2 漸化式と反復法	3
1.3 誤差	5
Problems Chapter 1	8
<hr/>	
Chapter 2	
単一方程式の根	9
2.1 ニュートン法	9
2.2 2分法	15
Problems Chapter 2	20
<hr/>	
Chapter 3	
連立 1 次方程式の解法	21
3.1 ガウスの消去法	21
3.2 反復法	31
Problems Chapter 3	35
<hr/>	
Chapter 4	
関数の近似	36
4.1 多項式補間	37
4.2 最小 2 乗法	42
Problems Chapter 4	48
<hr/>	
Chapter 5	
数値微分と数値積分	49
5.1 数値微分 — その 1	49

5.2	数値微分 — その2.....	52
5.3	区分求積法と台形公式.....	53
5.4	シンプソンの公式.....	56

Problems Chapter 5 59

Chapter 6

微分方程式	60
6.1 初期値問題—1.....	60
6.2 連立・高階微分方程式.....	64
6.3 初期値問題—2.....	68
6.4 境界値問題.....	71

Problems Chapter 6 75

Chapter 7

偏微分方程式	76
7.1 ラプラス方程式の解法.....	76
7.2 拡散方程式の解法.....	81

Problems Chapter 7 86

Appendix A

A.1 テイラー展開とニュートン法.....	87
A.2 トーマス法.....	89
A.3 最大固有値.....	91
A.4 スプライン補間法.....	93

Appendix B

問題略解	95
Chapter 1.....	95
Chapter 2.....	96
Chapter 3.....	97
Chapter 4.....	97
Chapter 5.....	98
Chapter 6.....	98
Chapter 7.....	99

Chapter 1

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 を 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]

$$y_4 = a_0x^4 + a_1x^3 + a_2x^2 + a_3x + a_4 \quad (1.1.4)$$

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

$$4 + 3 + 2 + 1 = 10 \text{ 回} \quad (1.1.5)$$

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

$$4 + 1 + 1 + 1 = 7 \text{ 回} \quad (1.1.6)$$

に減ります。

一方、上式は

$$y_1 = a_0x + a_1$$

$$y_2 = y_1x + a_2$$

$$y_3 = y_2x + a_3$$

$$y_4 = y_3x + a_4$$

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。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

$$y = a_0x^n + a_1x^{n-1} + a_2x^{n-2} + \cdots + a_{n-1}x + a_n \quad (1.2.1)$$

の値を求める問題を考えます. この場合も

$$y_1 = a_0x + a_1$$

$$y_2 = y_1x + a_2$$

⋮

$$y_n = y_{n-1}x + a_n \quad (1.2.2)$$

とおき, 上から順に y_1, y_2, \dots, 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

$i = 1, 2, \dots, n$ の順に次式を計算する: (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

$$x^2 - x - 1 = 0 \quad (1.2.4)$$

を考えます. この方程式は

$$x = 1 + \frac{1}{x} \quad (1.2.5)$$

と変形できます. そこで, この式から漸化式

$$x_{i+1} = 1 + \frac{1}{x_i} \quad (1.2.6)$$

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

1, 2, 1.5, 1.6667, 1.6250, 1.6154, 1.6190, 1.6176, …

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

$$\alpha = \frac{1 + \sqrt{5}}{2} = 1.6181\dots \quad (1.2.7)$$

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

$$\alpha = 1 + \frac{1}{\alpha} \quad (1.2.8)$$

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

$$x = \sqrt{x+1} \quad (1.2.9)$$

という式も得られ、少し変わったものとしては

$$x = \frac{x^2 + 1}{2x - 1} \quad (1.2.10)$$

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

$$x_{i+1} = \sqrt{x_i + 1} \quad (1.2.11)$$

$$x_{i+1} = \frac{x_i^2 + 1}{2x_i - 1} \quad (1.2.12)$$

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, …

となり、式(1.2.12)では

1, 2, 1.6667, 1.6190, 1.6180, …

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…), 根号内は正確には $10^8 + 1$ 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

みなされます。このように大きさが極端に違う 2 数の加減を行うとき、絶対値が小さな数が無視される現象を**情報落ち**といいます。したがって、計算結果は

$$10^4(\sqrt{10^8 + 1} - 10^4) = 10^4(\sqrt{10^8} - 10^4) = 10^4(10^4 - 10^4) = 0 \quad (1.3.1)$$

となり、正解からは大きくはずれます。実はこの場合の根号内の 1 は大切な情報を含んでいたことになります。

次にもとの式を次のように変形してみます。

$$x(\sqrt{x^2 + 1} - x) = x \frac{(\sqrt{x^2 + 1} - x)(\sqrt{x^2 + 1} + x)}{\sqrt{x^2 + 1} + x} = \frac{x}{\sqrt{x^2 + 1} + x} \quad (1.3.2)$$

この式に $x = 10^4$ を代入して情報落ちを考慮に入れて計算すれば

$$\frac{10^4}{\sqrt{10^8 + 1} + 10^4} = \frac{10^4}{10^4 + 10^4} = 0.50000000 \quad (1.3.3)$$

となり、正解に近い数値が得られます。

有効数字がもっと多いコンピュータを用いて情報落ちが防げたとします。しかし、この場合でもこの例の式をそのままの形で計算することはあまりよい方法とはいえません。その理由は以下のとおりです。すなわち、 $\sqrt{10^8 + 1} = 10000.00005$ ですが、そこに現れる 0 を含めた各数字は有効数字で重要な意味をもちます。このとき $\sqrt{10^8 + 1} - 10^4$ を計算すれば 0.00005 となりますが、ほぼ同じ値をもつ 2 つの数の差を計算したため 5 より左の有効数字が失われてしまいます。同じようなことが、8 個の有効数字をもつ 2 つの数の引き算

$$0.12345687 - 0.12345678 \quad (1.3.4)$$

についてもいえます。このとき計算結果の有効数字は 1 桁になります。このようにほぼ等しい 2 つの数の差を計算したとき、有効数字の桁が殆どが失われる現象を**桁落ち**とよんでいます。桁落ちは数値計算でもっとも注意しなければならない現象のひとつです。

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

$$ax^2 + bx + c = 0 \quad (1.3.5)$$

の根は、ふつう根の公式

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

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

$$\sqrt{b^2 - 4ac} \sim |b| \quad (1.3.7)$$

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

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

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

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

から求め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

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

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。

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

$$s = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \cdots + \frac{x^n}{n!} \quad \text{と} \quad s = \frac{x^n}{n!} + \cdots + \frac{x^2}{2!} + \frac{x}{1!} + 1$$

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) $\varepsilon(AB) \doteq \bar{B}\varepsilon(A) + \bar{A}\varepsilon(B)$

(b) $\varepsilon(A/B) \doteq \varepsilon(A)/\bar{B} - \bar{A}\varepsilon(B)/\bar{B}^2$