

数学入門公開講座

昭和55年7月29日(火)から8月7日(木)まで

日	7月	7月	7月	8月	8月	8月	8月	8月	8月	8月
時間	29日 (火)	30日 (水)	31日 (木)	1日 (金)	2日 (土)	3日 (日)	4日 (月)	5日 (火)	6日 (水)	7日 (木)
13:15~14:45	数値計算の落とし穴(一松)						地底の物体の形について (松浦)			
14:45~15:00	休		憩				休		憩	
15:00~16:30	電気振動の話(上田)						流体の数理(後藤)			

京都大学数理解析研究所

講師及び内容

1. 数値計算の落とし穴 (6時間)

京都大学数理解析研究所教授 一松 信

電子計算機の発展により、かつては大変だった計算が容易にできるようになった。しかし電子計算機はブラック・ボックスであり、扱える数値の範囲の制限などの理由により、機械的な計算を不用意に進めると、とんでもない結果になることが多い。この講義では必要に応じて電卓を使って、その種の実例を示し、数値計算の結果の精度保証が意外に困難であることを解説する。

2. 電気振動の話 (6時間)

京都大学工学部助教授 上田 院 亮

社会生活と密接に結びついた電力や通信システムの基礎となる電気・電子回路における振動現象の数理について初等的な解説を試みる。

3. 地底の物体の形について (6時間)

京都大学数理解析研究所教授 松浦 重 武

上記表題のもとに、直観的な立体図形(および平面図形)の問題について解説する。

4. 流体の数理 (6時間)

京都大学数理解析研究所助教授 後藤 金 英

流体とは気体・液体を理想化した連続体である。この講義では、流体の力学において数学がどのように用いられ、又流体力学が数学にどのような影響を与えたか、数学と流体力学の関りあいを、出来るだけ平易な例題を用いて紹介したい。

時 間 割

日	7月 29日 (火)	30日 (水)	31日 (木)	8月 1日 (金)	2日 (土)	3日 (日)	4日 (月)	5日 (火)	6日 (水)	7日 (木)
時 間	数値計算の落とし穴 (一松)						地底の物体の形について (松浦)			
13:15~14:45										
14:45~15:00	休 憩						休 憩			
15:00~16:30	電 気 振 動 の 話 (上田)						流 体 の 数 理 (後藤)			

1. 数 値 計 算 の 落 し 穴

講 師 : 一 松 信

期 間 : 昭 和 5 5 年 7 月 2 9 日 ~ 8 月 1 日

時 間 : 1 3 : 1 5 ~ 1 4 : 4 5

数値計算の落とし穴

数理解析研究所教授 一松 信

はしがき

電子計算機の発展により, その昔は大変だった計算が容易にできるようになった。しかし電子計算機による機械的な計算を不用意に進めると, とんでもない結果になることが少なくない。これに対し, 警鐘をかきならしたのが, Stanford大学の計算機科学科(現在 M.I.T.; Carnegie-Mellon 大学と共に“御三家”とよばれる)の創設者の一人^もであった, 故 George E. Forsythe 教授の“Pitfalls in Computations”, (1970, 1月)である。これは一面では, 当時の大学紛争を背景に, 数学者が抽象理論に没頭して, 現実の応用面を無視する傾向に対する警鐘でもあった。

10年後の今日読み返しても, 初読の折の強烈なショックはそのままである。もちろんこの講義は, そのままの解説ではないが, なるべくそのような例を見せながら進もう。聴講者の方々も, できればポケット電卓を持参して, 自ら試みながら進むことを希望する。

I. いくつかの“珍”現象例 (第1日)

初めにまず, 歴史的にも有名ないくつかの“珍”現象の例をあげ, その解析を兼ねて, どこに落とし穴があるかを説明しよう.

- 1° e^{-8} は負? — 1950年代の末, 初期の国産計算機ができた頃, 本当に大騒ぎをした話.
- 2° $\sqrt{0}$ は正? — これも学会で1時間近く討論した.
- 3° $\sum 1/n$ は収束する? — “満員バス通過現象”のいたずら; 及び数学上と数値上の“収束”の差
- 4° $(1 + \frac{1}{n})^n \rightarrow e$ について — 電卓の“完全”犯罪
- 5° 敏感な問題の例. — $\varepsilon = 2^{-23}$ のノイズが破局を生ずる例. Wilkinson ([2]) の例.
- 6° 不安定性の例 — Chaos の道.

合わせて, 現行の電子計算機での数表現体系とそうなった由来, その改良案と批判, などにも触れる.

(この日は少く, 計算機がいかには“危い”ものであるかをショック療法(?) 的に示したいと考えている.)

II. 二次方程式を正しく解くこと (第2日)

二次方程式

$$ax^2 + bx + c = 0$$

は, 純粋数学的には

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

で万事完了である。しかし数値的には, これだけではすまない。なぜ? — Forsythe の次の例を中心に説明する。

(a) $a=6, b=5, c=-4$ (これは何の困難もない)

(b) $a=6 \times 10^{30}, b=5 \times 10^{30}, c=-4 \times 10^{30}$

単に 10^{30} を掛けただけなのに, このまま計算機に入れると, たちまち "あふれ" を生じて立往生となる。

(c) $a=10^{-30}, b=-10^{30}, c=10^{30}$

"あふれ" の他に, 小さい (1 に近い) 根を求める特殊な工夫が必要となる。これはプログラムのテスト問題となる。

(e) $a=1.00000000, b=-4.00000000, c=3.99999999$

重根と近接二根の問題が典型的に現れる。

(d) $a=1, b=-10^5, c=1$. 析落ちの典型例

代数方程式の数値解法に関連して。

代数方程式の数値解法は, 古くて新しい問題である。最近ようやく図形表示技術の発展によって, 根の所在を眼で見ることができるようになり, かなり一般的に解法がでてきた。

しかし, ここでも, 伝統的な数学の教科書では, ほとんど触れられていない「落とし穴」がある. その例として, 次の2つを論じて見る. (共に平野豊保氏の発見)

1. 次数低下における除法のしかた.

大きい根 α に対して, 機械的に高位から $x - \alpha$ で割るとよい値がえられない. 低位の項から割るとうまくゆく.

逆に小さい根 α に対しては, 通例のように上位から $x - \alpha$ で割るとよい. 例. (Wilkinson の Σ Forsythe が引用)

$$x^4 - 6.7980x^3 + 2.9948x^2 - 0.043686x + 0.000089248 = 0.$$

根の近似値: 0.0024532, 0.012576, 0.45732, 6.32565

Wilkinson が, 代数方程式の根を 小さい方 から求める, と強調しているのは, 実は $x - \alpha$ で割って次数低下をするときは, 必ず高位の項から除法を行う, と先天的に定めているからである. 除法を "最大影響項" にしわよせすれば, どこから求めても, 精度をそこなわずに計算できる.

2. 誤差の相殺

普通 α に誤差 δ があり, 次に誤差 ε が入れば, δ と ε とは "独立" であって, 誤差の上限は $|\delta| + |\varepsilon|$ とする. これは大体は正しいが, いっども墨守すべき鉄則ではない. 極めて稀だが, δ も ε も同じルーツの子孫であり, $\delta + \varepsilon$ が相殺し

て, ほとんど0になることがある. 大ざっぱな“理論”よりも誤差が著るしく小さいのは“異常”であって解析を要する!

平野氏はその種の例を数多く発見しているが, 素朴な一例をあげる. 3次方程式

$$x^3 + 3px + 2q = 0 \quad (q \neq 0)$$

をCardano法で解く: $x = u + v$, $uv = -p$ として

$$u^3, v^3 = q \pm \sqrt{q^2 + p^3}.$$

いま $q^2 + p^3 = \varepsilon \neq 0$ とする. 原方程式は1単根^(α)と1重根 β (2つの近接根)をもつ. u^3, v^3 は重根(またはそれに近い)ため, n 桁計算では $n/2$ 桁の精度でしか求められない.

それにもかかわらず, 単根 α については

$$\begin{aligned} \alpha = u + v &= (q + \sqrt{\varepsilon})^{1/3} + (q - \sqrt{\varepsilon})^{1/3} \\ &= q^{1/3} \left[1 + \frac{\sqrt{\varepsilon}}{3q} - \frac{\varepsilon}{9q^2} - \dots + 1 - \frac{\sqrt{\varepsilon}}{3q} - \frac{\varepsilon}{9q^2} - \dots \right] \\ &= 2q^{1/3} - \frac{2}{9} \varepsilon q^{-5/2} + \dots \end{aligned}$$

となり, ε (n 桁)の精度で求められる. $\sqrt{\varepsilon}$ のオーダーの誤差が+と-で相殺してしまう. これに対して $\beta = u\omega + v\omega^2$ では, $\sqrt{\varepsilon}$ の項が残って $n/2$ 桁しかでない.

誤差の入っている値を, そのまま正しい値とみなして機械的に計算するのは, 一見無意味だが, それを1111加減に丸めると, 劇的な誤差の相殺は生じなくなる!

III. 線型計算に生ずる例. (第3日)

1. 小さな枢軸は危険

$$\text{例. } \begin{cases} 0.000100x + 1.00y = 1.00 \\ 1.00x + 1.00y = 2.00 \end{cases}$$

2. どっちがよい答?

$$\text{例. } \begin{cases} 0.780x + 0.563y = 0.217 \\ 0.913x + 0.659y = 0.254 \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{真の解は} \\ x=1.000, y=-1.000 \end{array}$$

$$\text{近似解} \begin{cases} (x_1, y_1) = (0.999, -1.001) & \text{残差 } -0.001243, -0.001572 \\ (x_2, y_2) = (0.341, -0.087) & \text{残差 } -0.000001, 0 \end{cases}$$

3. 右逆行列 = 左逆行列? (理論的には左しか1=等しい)

$$\text{例. } A = \begin{bmatrix} 9999 & 9998 \\ 10000 & 9999 \end{bmatrix}, \quad A^{-1} = \begin{bmatrix} 9999 & -9998 \\ -10000 & 9999 \end{bmatrix}$$

$$\text{近似逆行列 } X = \begin{bmatrix} 9999.9999 & -9997.0001 \\ -10001 & 9998 \end{bmatrix}$$

$$AX - I = \begin{bmatrix} 0.001 & 0.0001 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \doteq 0$$

$$XA - I = \begin{bmatrix} 19997.0001 & 19995.0003 \\ -19999 & -19995 \end{bmatrix} \neq 0 ?$$

4. 最小二乗問題

$0 \leq t \leq 1$ で定義された連続関数 $f(t)$ を $(n-1)$ 次多項式

$$x_0 + x_1 t + x_2 t^2 + \dots + x_{n-1} t^{n-1}$$

で最小二乗近似するとすれば, x_j は連立一次方程式

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_{j-1} = b_i \quad (i=1, \dots, n)$$

$$a_{ij} = 1/(i+j-1), \quad b_i = \int_0^1 t^{i-1} f(t) dt$$

を解いてえられる。しかしこの係数行列は, "悪名高き"

Hilbert 行列であって, このままでは解きにくい。普通の計算機の単長計算のままでは, $n \geq 7$ のときには解けない(原理的に正しい答がえられない) ことが示される。— 昔は使用する計算機によって答が変わった。現在では同じ答がでるか, これは計算機が"規格化"されたためであって, 正しい答がでていないわけではない!

この問題は直交多項式を使えば, わけなく正しく解ける。また有理数計算をするか, 適当に共通分母を掛けて多倍長精度計算をすれば, 正しい答がでるか。これは Hilbert 行列の特殊性に基づくものである。

一般の最小二乗あてはめでも, 古典的な教科書にある方法を機械的に適用すると, とんでもない答がでる例がある。現在では, 正規方程式を作るよりも, 特異値分解によるほうが精度もよいし, 計算量も少ないことが確かめられている。

IV. 微分方程式の解法の不安定性 (第4日)

1. Milne - Simpson 公式 $y_{n+1} = y_{n-1} + (h/3)(y'_{n-1} + 4y'_n + y'_{n+1})$ による不安定性
 $y' = -y, y(0) = 1, y_0 = 1.$

出発値 $y_1 = 0.90483742.$

同じことは, 中点公式 $y_{n+1} = y_{n-1} + 2h y'_n$ においても典型的に生ずる.

現在では, この原因も完全に解析され, 対策もたてられている。さらにいわゆる Chaos の典型例として, 積極的に研究されるようになった。しかし Forsythe のいう通り, 応用数学の教科書にさえ, 古く本をうのみにしてはいけな例の一つである。

2. 熱伝導方程式 $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\partial u}{\partial t}, \quad 0 \leq x \leq 1, t \geq 0$

$u(0, t) = 0 \quad (t > 0) \quad u(1, t) = 1 \quad (t > 0)$

$u(x, 0) = 0 \quad (0 < x < 1)$

これを x を h , t を τ の幅の刻みで差分近似し

$$\frac{u(x-h, \tau) - 2u(x, \tau) + u(x+h, \tau)}{h^2} = \frac{u(x, \tau+h) - u(x, \tau)}{h}$$

として前進型で解く。 $h/h^2 > 1/2$ となると激しい振動を生ずる。

これは最も古く知られた“不安定性”である。何と電子計算機が発明される20年近く前(1928年)に、理論的に予言されていたが、いまでも毎年(?)^(アメリカの) 多くの学生が実験的に再発見をくりかえしている、といわれる。(日本ではほとんどない。)

現在では、これ自身詳しく解析されていて、さういって硬直(stiff)方程式の一例として研究されている。

3. 硬直方程式 $y' = -ay$ ($a > 0$, a 大)

の解は $y = ce^{-ax}$ であって、急激に0に近づくが、通例の前進型の差分解法では、振動発散しやすい。このように急激に減少して、長い時間にわたってこの解には寄り合わないのに、数値解法の妨害になる項を含むのが、硬直方程式である。この型は、化学反応の方程式(例えば光化学スモッグ)や、時定数の大きく違う電気回路の方程式によく現れ、しばしば“幻の解”を生ずる。現在では、かなり有用な解法が研究されている。

V. おすゝめ

Forsythe 教授が、前記の論文の末尾で述べているのは、純粋数学の理論と、計算機による計算との隔り、及びそれに対する(特に教育上の)方策である。これは1970年のアメリカの状況を反映したものであるが、日本での現状と比較す

ると, なお“うらやましく”思う点が多い.

私はむしろ1980年代において, 数値計算と“計算機科学”との間隙の方を強調したい.

いづれにせよ, 計算機はやはり道具にすぎず, それをどう使いこなすかは人間の責任であることと, 少なくとも“計算機でやった”という呪文に迷わぬ心構えを作ることが, 私の講義の目的であった.

文 献

[1] G.E.Forsythe, Pitfalls in computation, or why a Math-Book isn't enough?, Stanford Tech. Rep. CS 174, 1970, Jan.

計算の中のおとしあな (清野武・津田孝夫・市田浩三訳), 京都大学大型計算センター広報 vol 3 (1970) No. 8, 9

[2] J.H.Wilkinson, The algebraic eigenvalue problem, Oxford 1966.

[3] G.E. Forsythe- M.A.Malcolm- C.B.Moler:

森正武訳, 計算機のための数値計算法, 科学技術出版社, 1978. (原-Prentice-Hall, 1977)