数理解析研究所講究録
第832巻1993年1-11

総合技術としての数値計算

東京大学工学部計数工学科　伊理　正夫

数値計算、数値解析の研究にはいろいろな立場からのものがありうるが、分野全体の健全な発展のためには、一つの立場に偏ることなく、問題を総合的に捉え、実用技術との繋りに常に関心を持つ研究態度が必要であると信じる。これが、数値計算を純粋数学の諸分野（“応用数学”と銘打ったものの中にも純粋数学的研究が少なくないことはよく知られている通りであり、それらも含めて）から区別して、真の意味での応用科学あるいは工学に属する分野として位置づける大きな特徴であるといえよう。本講演では、自戒も込めて、講演者の乏しい経験の中からいくつかの例を選んで、そのような数値計算の特徴について論じたい。

主たる論点、視点を以下に列挙するが、それらは未整理で断片的であることを予めお断りして、お詫びする。（１．～８．は総論的、９．～14.は各論的である。）

１．数値計算の研究は実験科学である

数値計算をこのように位置づけるべきであるということは森口繁一先生がもう４０年くらい前に多くの実例を添えて提唱され、当時の学界に大きなインパクトを与えた（例えば[１]）。現在では、このような研究の姿勢はかなり定着してきている。

２．数値計算と工業製品の製造とは共通する点がある

工業製品の製造には、“設計→試作→改良→製品”という過程が必ず踏まれ、しかも製品には保証書が付けられているのがいまや常識であり、

更に“納期”は本来厳守されるべきものと考えられている。

数値計算をするとき（あるいはそのためのソフトウェアを作製するとき）にもそのような姿勢が必要であろうと思うが、概していえば、現状は試作も改良もなく、納期は厳守されないということではなかろうか。

そもそもプログラムの“値段”を行数で計るような習慣が依然として残っているようでは、数値計算やソフトウェアの技術の前近代性を非難されても致し方ない。（Dijkstraが[2]でも述べているように“行数”は帳簿の“借方”に記入すべきもので“貸方”に記入すべきものではない。）

3. 数値計算は数学からは独立した分野でありまたそうあるべきである

既製の数学理論に全面的に頼れる場合は少ない。それどころか、頼ると道を誤ることさえある。“収束”という概念にしても、数値計算においては、定量的な“収束速度”を無視できないし（例えば、調和級数の収束）、また“丸め誤差”の影響との関連が致命的であることも少なくない（例えば、数値微分）。[3]

実際に数値計算で扱う量は、ほとんどの場合、物理量である。一方、数学書には、次元の異なる物理量を足し合わせた“ノルム”を用いてベクトルの大きさを計り、収束の判定をするような話が書かれていて、数値計算の教科書にもそのようなノルムを用いた算法が提示され、多くのソフトウェアもそのような算法を採用している。“物理”のセンスからすれば、このようなことは決して納得できないはずである[4]。

計算複雑度の概念は、数学基礎論における計算可能性の概念と似たような雰囲気を持ちながらもそれとは一線を劃し、計算機科学における多くの組合せアルゴリズムの設計評価に役立っているが、それはまた、数

値計算アルゴリズムにおいても重要な概念である。計算複雑度の理論の発展に数値計算法からの問題意識が大いに影響を与えたことも事実である。ただ、この分野もかなり“爛熟”してきたので、ともすると“数学的”になって、最近では初心から離れてきがちにみえるのは残念である。[5]

4. 数値計算は分野横断技術である

個別技術に特化した計算術は歴史的に数多あった。例えば、電気回路解析のための計算法として節点解析、閉路解析など、構造物計算のための撓角·撓度法など、上下水、ガス、農業用水などの流量計算で使われているHardy-Cross法など、数え上げればきりがないし、それぞれの分野で独自の概念を用いて独自の展開がなされている。しかし、すべては、一旦現象の基本的数学モデルができてしまえば、あとは単なる数値計算法であるとみなすこともできる。このような立場に立って分野横断的に、“数値計算的世界観”で科学・技術全体を見渡すこともまた楽しく有用なことであろう。それにより、個別技術、個別数学理論を見直し、新しい総合的方法論を確立し、個別分野への貢献をなすことができるからである。

5. 数値計算の目的は外の世界にある

自己目的的な数学とは違い、数値計算は本来的には応用科学であり、そこでは対象分野の本質の理解が重要である。「企業では、数式を与えないと仕事を始めない、計算を始めないような卒業生は要らない。」とは、大学における教育に関してしばしば言われることであるが、これは数値計算の研究者もまた常に心すべきことであろう。

6. 数値計算家はハードの極端からソフトの極端までを熟知すべし

数値計算を有効に行うためには、単に数値解析の理論と数値計算の算法とを知っているだけでは不十分で、計算機環境の急速な変化（進歩?）に追随しながら適切な計算環境を選択できなければならない。そのためには、ハードウェアの原理、演算機構、数値の表現、プログラム言語、コンパイラー、組合せアルゴリズム、等々、幅広く深い知識と経験が要求される。この意味でも、数値計算は“総合技術”なのである。

7. 数値計算自体よりその前後の段階の方が量的には大である

現実の問題を扱ったことのある者なら誰でも経験したことがあるように、数値計算によりある問題を解決するためには、多くの場合、計算そのものよりも、むしろ、データ集めと整理・入力、結果の整理・加工・提示というような、その前後の段階に大量の労力とセンスとが要求される。大規模な数理計画法の計算、構造計算、回路計算、統計計算、システム解析、等のソフトウェアにおいては、昔から、データ入力と結果の提示のために多大の工夫がなされていた。有限要素法のソフトウェアではメッシュ・グリッドを自動的に生成する部分が重要視されてきている。計算結果の図化、可視化には伝統的な製図のセンスも必要である。

しかし、既製のソフトウェアがこのような観点からして必ずしも満点いくものではない、いやむしろ“悪質”といった方がよいものも少なくない、そして、学生はもちろん研究者までがそのようなソフトウェアを無批判に喜々として用いているようにみえるのはどうしたことであろうか。折角ISO（JIS，DIN 等も同じ）の数学記号の標準があるのにわざわざそれに反することをしたり、手でグラフを描いていた時代には決して

しなかったような縦軸・横軸の選択と醜い目盛り、伝統的に確立されていた方式と（故意か不注意か知らないが）違った図の注釈や表の見出しのスタイル、等々、例は枚挙にいとまない。

8. 個人の創造性と集団の創造性とは両方とも必要である

ここで理想として述べていることごとを一個人で具現するのはそうたやすいことではない。しかし、数値計算関係者全体がチームとして協力しながらそのような理想に向かって進むことは容易であろう。一般の技術の分野では、個人の独創的な着想はもちろん大切であるが、それにもまして高信頼性・高能率の製造技術をチームを組んで確立して行くということが大切で、それには“集団の創造性”とでもいうべきものをもっと評価すべきであるとの論も最近盛んになされている。こんな点からも、数値計算というものの技術としての側面が見えるのではなかろうか。

---

9. 幾何学の精神と数値計算

1872年に Felix Klein が Erlangen 大学の教授就任講演で提唱したといわれるいわゆる Erlanger Programm の中心にある不変性の原理は、ひとり幾何学（数学）において重要であるだけではなく、あまねく適用すべき科学的方法論として、あらゆる分野で尊重されるべきものである。特に、数理的な方法を用いようとする者にとっては。

数値計算において、不変性の原理がどこまで実現できるか、それは今後の課題である。線形計算において、スケールの変換や枢軸選択が不変性の観点からどういう意味を持ちうるのかを、常に意識しながら算法の

設計がなされているとは言い難い。微分方程式の数値解法、数値積分やそれに関連した good lattice の構成などが非線形変換はもちろん線形変換に関してさえ不変でないと分かってはいても、どうしたらよいかは今のところ不明である。

３．で触れたノルムも然り。ノルムや計量が不明のまま単位計量などをいわば密輸入して、spline を扱い、行列の標準形や固有値・特異値を論じ、主成分分析を行っている。また、いわゆる ill-posed problem に対するregularization も多くの場合恣意的に導入した副条件の方が実は大きな役割を果たすような仕組みになっている。代用電荷法が不変性の観点からみてあまりにも恣意性がありすぎることも、よく知られているとおりである[６],[７],[８]。

10. 計算の品質

工業製品いついては“品質保証”が今や不可欠の条件になっているが、数値計算については、実際家は、いまだに“計算しっぱなし”の時代から脱却しきれていない。しかし一方では、実用的な観点からの手間の議論はひとまず置いて、区間計算、精度保証、self-validating numerics 等の名の下に、離散化誤差や丸め誤差のような雑音のある世界での計算によりながらも厳密な数学的議論をなすことを可能にするような研究が進みつつある。技術的な立場からは、計算の品質保証の全く無い状態と超過剰品質の状態との間に、費用／効果の最適な手法を選ぶ方法論の研究が大切でありかつ興味がある。

11. 計算幾何学と数値計算

数値計算と他の分野との交流が必要でありかつ有用であることを例示

するために、計算幾何学に関係した例を幾つか挙げよう。

(a) 代数方程式を解くためのいわゆる平野法においては、複素平面上で、現在得られている近似解を中心とするある半径の円の周を方程式の次数等分した点の中で原点に最も近いものを選ぶ必要がある。例えば、[9], pp.132-134, にはこのように書いてあるが、それを文字通りに行って、円周上のそれらの点の値をいちいち計算してから、それらの絶対値を取って比較するという、大変遅いプログラムが掲載されている書物があるという。このような場合、極く初等的な幾何の知識があれば、円周上に等間隔で並ぶ点の中から原点に最も近いものを選ぶのは簡単であろうのに。(室田一雄君から教えてもらった話である。)

(b) 地理情報処理、コンピューターグラフィックス、有限要素法、パターン認識、等々、多くの有用な応用を持つ Voronoi 線図やその双対図形である Delaunay 三角網を構成することは、計算幾何学の代表的主題であるが、他の幾何学的計算と同じように、そこでは、丸め誤差が不可避な数値計算と完全に組合せ的・離散的なトポロジーの話とが相互に関連している。すなわち、極く微小な丸め誤差による擾乱が不連続的な変化をトポロジーにもたらす。例えば、丸め誤差のある世界では、三角形の三辺の垂直二等分線は一点に会すとは限らない。このような場合、算法の設計の際に初等幾何学の定理に頼ると悲惨なことになる。トポロジーと数値計算との両方に気を配りながら算法を工夫しなければならない。そうした結果、現在では単精度計算によっても百万個以上もの点に対するVoronoi 図が描けるようになっている[10]。

(c) 行列の固有値の複素平面上での存在範囲に関する Gershgorin の定理をきちんと用いるには、Gershgorin 円を連結成分に類別する必要がある。このような基本図形の交差判定と連結成分分解は、計算幾何学の

得意とするところであり、漫然と多くの円の交差を初等的に調べるよりは遙かに速い算法が存在する。しかし、この場合、普通にやると、複素平面を多くの円の勢力圏に分けることになり、勢力圏の境界は双曲線になる。計算複雑度のオーダーは変わらないとはいうものの、双曲線の交差を扱うのは計算的には厄介である。しかるに、平面上の点から円への“距離”として、ユークリッド距離ではなく、点から円への接線の長さを採用するいわゆる Laguerre 幾何を利用することによって、勢力圏の境界が直線となるようにし、扱いを格段と容易にするという工夫もなされている[11]。

12. グラフ・マトロイドと数値計算

連続な対象を扱う数値計算と組合せ数学的な手法とは、見方によれば、数理的技術の両極端に位置するものであるが、大規模システムのモデル化や大規模計算の手順の体系化においては、両者が協力することによって大きな力を発揮することが知られている（例えば[12]を参照）。

計算の手順のグラフ表現である計算グラフの上の経路問題を扱うことによって、自動微分、高速自動微分、丸め誤差推定等の数値計算の基本技術を確立しようとする試みも、最近注目されている[13],[14]。

13. 古典的回路網合成理論における正実関数と常微分方程式の初期値問題の数値解法における多段階法のA-安定性

濾波回路、伝送回路等が専ら受動素子を用いて作られていた時代には、回路の受動性を数学的に正実関数により特徴づけ、正実関数を手懸りとした回路合成（設計）の理論が展開されていた。半導体電子回路全盛時代の今日、能動回路が自由に使えるようになって、回路理論の分野では

正実関数の理論はほとんど忘れ去られようとしているが、剛い常微分方程式の初期値問題の数値解法における多段階法のA-安定性の理論が、実は、正実関数の話に他ならないということが知られている[15]。

14. 統計工学における数値計算

統計工学は大量の数値計算を必要とする分野の一つであるので、数値計算の立場からみても興味ある話題が多く、"statistical computing" という分野もできている。

標本分散を自乗平均と平均の自乗との差によって計算するという方法（分散の簡便計算法）は相対変動の小さい大量のデータに対して用いると丸め誤差の影響で破綻が生じることがあるということ、最小自乗法により正規方程式を立てて回帰式を計算するときにも同様な問題が生ずること、丸め誤差の点からは正規方程式を経由するよりはデータ行列を直接ＱＲ分解してしまった方がよいこと、等々、統計の専門家と数値計算の専門家との交流により、もっと広く常識として普及して欲しいことが少なくない。

最尤法でパラメタ推定を行うときに、統計学固有の理論や手法が何処まで必要であるか、何処から数値計算法に委せてしまったらよいか。

自己回帰・移動平均モデルで表わされる確率過程のパラメタを定めるときに、まずデータの共分散（相互相関）の推定を行ってからToeplitz行列を係数とする連立一次方程式を解くというようにした方がよいのか、それとも、観測方程式のパラメタを直接最小自乗法で定めてしまった方がよいのか。等々、・・・。

文献

[1] 森口繁一, 高田勝: 数値計算法I, II. 岩波講座“現代応用数学”, 岩波書店, 1958.

[2] E. W. Dijkstra: On the cruelty of really teaching computer Science. Communicatins of the ACM, Vol.32 (1989), pp.1398-1404.

[3] 伊理正夫, 藤野和建: 数値計算の常識. 共立出版, 1985.

[4] 伊理正夫, 久保田光一: 数値計算の基礎技術の最近の話題から ---ノルム、丸め誤差、偏微分と高速自動微分法を中心として---. 電子情報通信学会誌, 72巻, 10号 (1989年10月), pp.1044-1052.

[5] M. Iri: A very personal reminiscence on the problem of computational complexity. Discrete Applied Mathematics, Vol.17 (1987), pp.17-27.

[6] 岡本久, 桂田祐史: ポテンシャル問題の高速解法. 応用数理, Vol.2 (1992), pp.212-230.

[7] 天本要: 代用電荷法に基づく外部等角写像の数値解法. 情報処理学会論文誌, Vol.29, No.3 (1988), pp.62-72.

[8] 室田一雄: 代用電荷法におけるスキームの「不変性」について. 情報処理学会論文誌, Vol.34, No.3 (1993年3月) 掲載予定.

[9] 伊理正夫: 数値計算---方程式の解法. 朝倉書店 (理工系基礎の数学12), 1981.

[10] K. Sugihara and M. Iri: A robust topology-oriented incremental algorithm for Voronoi diagrams. to appear in International Journal of Computational Geometry and Applications.

[11] H. Imai, M. Iri and K. Murota: Voronoi diagram in the Laguerre geometry and its applications. SIAM Journal on Computing, Vol.14 (1985), pp.93-105.

[12] K. Murota: Systems Analysis by Graphs and Matroids --- Structural Solvability and Controllability. Springer-Verlag, 1987.

[13] M. Iri: History of automatic differentiation and rounding error estimation. In A. Griewank and G. F. Corliss (eds.): Automatic Differentiation of Algorithms --- Theory, Implementation, and Application, SIAM, Philadelphia, 1991, pp.3-16.

[14] 伊理正夫, 久保田光一: 高速自動微分法 I, II. 応用数理, 1巻, 1号（1991年3月）, pp.17-35, 1巻, 2号（1991年6月）, pp.153-163.

[15] 伊理正夫: 正実関数と数値計算<故藤沢俊男教授に捧ぐ>. 電子情報通信学会誌, Vol.74, No.3（1991年3月）, pp.261-270.