数値計算の最前線

蔡　大維

1.　はじめに

コンピュータとコンピューティング手法の急速な発展により，ほぼすべての専門分野で定量化と高精度化が展開しており，計算物理学，計算化学，計算生物学，計算地質学，計算気象学などの一連の計算分野の分岐が生じている． そして，計算材料科学など，計算数学における数値計算方法は,「計算」問題を解決するための架け橋と有力なツールである．計算能力は計算ツールと計算方法の効率の積であることがわかっていますが，計算方法の効率を改善することはコンピューターハードウェアの効率を改善することと同様に重要である． 科学計算技術は，科学技術と社会生活のあらゆる分野で応用されている．

数値計算は，数学的な問題の研究と解決を実現するための数値近似のアプローチであり，コンピュータを利用する数学問題を解く方法である．

科学研究および工学応用研究開発では，さまざまな計算方法が使用される．たとえば,航空宇宙開発，地質の調査，自動車製造，建築設計，天気予報，市大規模 LSI 設計開発など分野では，数値計算の利用実績がある．数値計算は，数学理論の抽象性と厳密さ，および工学の実用性と実験性の両方を備える理論的かつ実践的な分野である．1970 年代から，世界のほとんどの大学では，コンピューターサイエンス学科又は数学学科の計算数学専門の学生だけに数値計算関連の科目を開講した．現在，高性能コンピュータと関係技術の急速的な発展と普及に伴い，数値計算関係の講義はほぼすべて理工系の学生にとって勉強すべき科目になっている．

数値計算の計算対象は，微積分，線形代数，および常微分方程式などの典型的な数学問題である．具体的な内容として，補間，数値微分と数値積分，線形方程式を解く直接法と反復法，行列の固有値と固有ベクトルの計算，常微分方程式の数値解法などがある．

2.　アルゴリズムと誤差

2.1.　アルゴリズム

数値計算は単純な数式を使う計算だけではない．数値計算では，問題の結果を得るための基本的な演算と演算のシーケンスの全体をアルゴリズムという．アルゴリズムは，一般的に，ブロック図（フローチャート）でより直感的に示すことができる．数値計算にとって，適切なアルゴリズムを選択することは非常に重要である．アルゴリズムの選択によって，計算量に大きな影響を与えることがある．例えば,多項式

$$p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$$

の値を求めよう．まず, $\mathrm{a_i} x^i$ $(i = 0,1,2, \dots, n)$を計算しておいて，それらの項の合計を計算したら，$n(n+1)/2$回掛算とn回足し算が必要である．この多項式の表し方を数学的に変換し，次のようになる．

$$p(x)$$
$$= \left(\left(\dots \left((a_n x + a_{n-1}) x + a_{n-2} \right) x + + a_2 \right) x + a_1 \right) x + a_0$$

この式で計算したら，n回掛算とn回足し算だけで済む上記の例から，使ったアルゴリズムは，計算の速度と効率に直接影響する．簡単な問題については,計算速度とコンピュータメモリの利用量がそれほど大きな影響がないようですが，複雑で大規模な問題の場合では，アルゴリズムの選択と構成は決定的な役割を果たす．

一方，不適切なアルゴリズムを使うことは，コンピュータ数値計算の近似性とエラーの伝播と累積など原因で計算精度に直接的に影響する．極端の場合,計算失敗の結果につながることがある．

2.2.　誤差と評価

数値計算では，誤差が重要な指標である．誤差の大きさを表すには絶対誤差と相対誤差がある．xの近似値$\tilde{x}$として，近似値$\tilde{x}$の絶対誤差Eは$E = x - \tilde{x}$で表す．更に，近似値$\tilde{x}$の相対誤差εは$\varepsilon = (x - \widetilde{x)}/x$で定義される．違い単位間の精度を比較する時に，相

対誤差はより精度の特徴を反映することがある．

3. 補間と応用

3.1. 補間の基本

1日中の気温や風速は時間の関数$f(x)$で表すことができるが，多様性や複雑性など要素の影響で正確な数式で表すことができない．この関数$f(x)$について，一連の離散的な点$f(x_i)$だけが既知である．ここで，$i = 0,1,\cdots,n$とする．ある近似関数$g(x)$はこれらの点で関数$f(x)$と一致になれば，この関数$g(x)$で，この関数$f(x)$の近似値を得ることができる．図1で示される処理は補間のプロセスである．

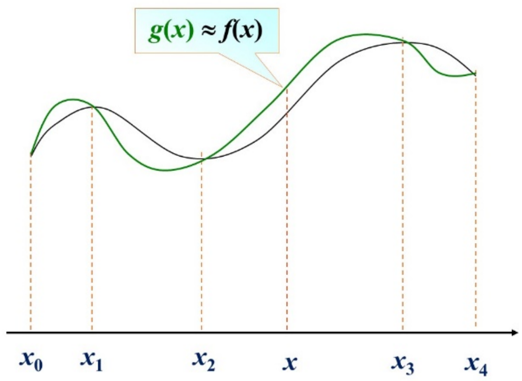

図1　関数の近似

一般性として，補間を下記のように定義する．

定義：区間$[a,b]$上の連続関数$f(x)$がある．$[a,b]$内のお互いに異なる点$\{x_i\}_{i=0}^{n}$における値

$$f_i = f(x_i) \quad i = 0,1,\cdots,n$$

が与えられるとき，

$$\boldsymbol{g(x_i) = f_i \quad i = 0,1,\cdots,n} \qquad \textbf{(1)}$$

となる関数$\boldsymbol{g(x)}$を求めることを補間という．$\boldsymbol{g(x)}$はある関数類であるが，補間計算の利便性を考えて，一般的に，$\boldsymbol{g(x)}$を$\boldsymbol{n}$次多項式に指定することが多い．この多項式$\boldsymbol{g(x)}$を求めるには，以下の三つ問題がある．

・多項式$g(x)$の存在は唯一

・多項式$g(x)$の構成方法

・近似誤差の評価

まず，$g(x) = a_0 + a_1x + \cdots + a_nx^n$とおくと，条件（1）から，

$a_0 + a_1x_0 + a_2x_0^2 + \cdots + a_nx_0^n = f_0$

$a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \cdots + a_nx_1^n = f_1$

…

$a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \cdots + a_nx_n^n = f_n$

がある．この$n+1$個の未知変数$a_0, a_1, \cdots, a_n$に関する連立一次方程式の係数行列の$rank$が$n+1$になる場合，即ち，係数行列が正則の場合，この方程式の解は一つだけになる．従って，$g(x)$がただ一つで求まる．

ただし，現実的に，$g(x)$を求めるために，複雑な連立方程式を解かなければならない．直接的に$g(x)$が構成されない．条件（1）から，直接的に$g(x)$を構成する方法が実用的に重要な価値がある．方法の一つはラグランジュ補間である．ラグランジュ補間では，ラグランジュ多項式と呼ばれる多項式$p(x)$がつぎのように定義される．

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} f_i\, l_i(x)$$

ここで，

$l_i(x)$

$$= \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$$

$i,j = 0,1,\cdots,n$に対して，式（＊）を考えて，

$$\mathrm{l_i}(\mathrm{x}_j) = \begin{cases} 0, i \neq j \\ 1, i = j \end{cases}$$

であるから，

$$l_i(x_i) = 1, i = 0,1,\cdots,n$$

が成立する．従って，$p(x)$が条件（1）を満たす多項式である．

最後に，ラグランジュ補間の近似誤差を考察してみる．n次ラグランジュ多項式$p_n(x)$を用いる誤差$R_n(x)$が次のようになる．

$$R_n(x) = f(x) - p_n(x)$$

x_i, $i = 0,1,\cdots,n$において，

$$p_n(x_i) = f(x_i)$$

があるから，

$R\_n(x_i) = 0$

になる．したがって，

$$R_n(x) = k(x)\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$$

計算によって，

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{i=0}^{n}(x - x_i)$$

が得られる．

ラグランジュ補間で使われるラグランジュ多項式では，分点数nが一つだけ増えても，すべてのラグランジュベース関数$l_i(x)$が再度計算しなければならない．これはラグランジュ補間の欠点となる．この欠点を解消するために，ニュートン差分公式がある．

多数の分点を用いて，高次ラグランジュ多項式を構成する場合，近似区間の両端で激しい振動を発生する現象がよく見られる．このような振動で，分点間の近似誤差が大きくなる．この問題を回避するために，工学的な対策として，全体の区間を複数の小区間に分割し，それぞれの区間において，より次数の低いラグランジュ多項式で近似する．実際，数値積分では，高次のラグランジュ多項式を使わないで，１次又は２次ラグランジュ多項式を利用したものである．このような処理では，精度を維持したが，全体の円滑性が犠牲される．

3.2. 補間の応用

補間は数値計算の基本技術として，数値積分など計算問題の解を求めるとき，よく利用される．数値積分の台形法とシンプソン法は線形補間と２次補間の計算式を利用して，導出される．近年，自動運転や AR や VR など分野への注目が急増している．これらの研究分野では，AI と画像処理がコア技術である．実際，AI と画像処理では，補間の技術が利用されている．人工知能の処理によるデジタル信号処理では，補間の手法を利用するベクトル学習機構を構成される[1]. 個々の知恵を大きな知恵に統合するためにモデルに組み込まれている複数のエージェントを接続するネットワークプラットフォームでは,

マルチエージェントを接続しているネットワークプラットフォームを用いて，リスクレーダーが，PHP 言語で記述された数学モデルによる駆動ができる．この数学モデルを構築するには，補間技術が利用されました[2]．BP ニューラルネットワークの補間機能をもちいる RBF ニューラルネットワークの関数近似で，土壌の窒素空間の変異を予測することが実現された[3]．ビッグデータ処理ための機械学習では，CPU と GPU の協調処理できる並列的な補間アルゴリズムを提案した[4]．衛星画像処理で，異なる時間の画像に対して，マルチ画像の補間処理を行い，特定時間の衛星画像を生成する手法を開発した[5]．

4. 数値積分

4.1. 数値積分の考え

数値積分の必要性は関数の原始関数を計算するのが難しいからである．積分関数$f(x)$の原始関数$F(x)$による定積分の計算方法は，下記の Newton-Leibnitz の公式に基づいている．

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$$

ただし，この原始関数$F(x)$は，基本関数で表すものが少なくて，多くの積分可能な関数の積分は，基本関数の形や解析的な数式でさえ表すことはできない．例えば，一般的な正規分布関数

$$f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$$

の原始関数は基本関数で表すことはできない．それだけでなく，多くの実際応用問題，例えば，気象測定の温度，湿度，圧力など，医療測定の血圧，酸素濃度などのような特定の時刻での積分関数値のみを知ることが多い．さらに，積分関数は特定の微分方程式の解である場合がある．多くの微分方程式は数値的にしか解けないため，特定の点での関数の値のみがわかる．これらの場合では，原始関数の方法で関数の積分を計算することはできない．

数値計算では，定積分を計算するために，積分区間$[a, b]$，又はその一部において，原始関数がある関数で積分関数を近似する方法がよく利用される．特に，利便性と誤差解析の容易性から，多項式$\mathrm{p}(x)$で積分関数$f(x)$を近似し，積分の数値結果を求める．即ち

$$\int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b p(x)dx$$

関数$f(x)$を近似する多項式$P(x)$を定めるために，積分区間$[a, b]$をn分割し，$n+1$個の分点を $a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n = b$ をとり，$f_k = f(x_k)$を通るn次ラグランジュ補間多項式$p_n(x)$を構成する．n次ラグランジュ補間多項式$p_n(x)$を展開すると，下記の一般的なn次多項式形になる．

$$p_n(x) = a_0 + a_1 x + \cdots + a_n x^n$$

従って，$p_n(x)$の原始関数$P_n(x)$は

$$P_n(x) = a_0 x + \frac{a_1 x^2}{2} + \cdots + \frac{a_n x^{n+1}}{n+1}$$

得られる．ただし，実際の計算として，このようなやり方は限界がある．まず，（＊）のようにラグランジュ多項式を一般式に展開する計算は複雑である．また，近似精度を達成するために，積分区間の分割数が多くなる必要がある.」その場合，高次多項式の利用によって,計算式が複雑になるだけではなくて,近似精度が逆に悪化してしまうことがある．

実際の計算では,計算の効率化を実現するために,次の対策を採用する．まず，積分区間の分割について，ランダムの分割ではなくて，等間隔の分割を実施する．即ち，$h=(b-a)/n$とおくと，

$$x_0 = a, x_1 = a+h, x_2 = a+2h, \cdots, x_n = a+nh = b$$

となる．次に，連接の複数分点で構成された小区間において，低次ラグランジュ多項式で積分関数を近似する．このようなアプローチで典型的な台形公式とシンプソン公式が導かれる．

4.2. 台形公式

隣接の二つ分点を通る１次ラグランジュ多項式で積分関数を近似し，得られた計算公式は台形公式と呼ぶ．具体的な流れを説明する．

積分区間$[a,b]$をn等分し，

$$h = (b-a)/n$$

$$\mathrm{x_i} = a + ih \ \ (i = 0,1,2,\cdots,n)$$

となる場合，

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} p_i(x)\,dx$$

となる．ここで，$p_i(x)$は分点(x_i, f_i)と(x_{i+1}, f_{i+1})を通る直線である．ラグランジュ多項式によって，

$$p_i(x) = f_i \frac{x - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} + f_i \frac{x - x_i}{x_{i+1} - x_i}$$

となる．従って，台形公式

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1})$$

$$= h(\frac{f_0}{2} + f_1 + f_2 + \cdots + f_{n-1} + \frac{f_n}{2})$$

が導かれる．

4.3. シンプソン公式

台形公式では，隣接の分点を結ぶ直線で積分関数を近似したが，隣接の三つ分点を結ぶ放物線で近似する方法がシンプソン法と呼ぶ．この方法で導出した計算式はシンプソン公式である．

積分区間$[a,b]$を$2n$等分し，

$$h = (b-a)/2n$$

$$\mathrm{x_i} = a + ih \ \ (i = 0,1,2,\cdots,2n)$$

となる．従って，

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_{2i}}^{x_{2i+2}} p_i(x)\,dx$$

がある．ここで，$p_i(x)$は分点(x_{2i}, f_{2i})と(x_{2i+1}, f_{2i+1})と(x_{2i+2}, f_{2i+2})を通る放物線である．ラグランジュ多項式によって，

$$p_i(x) = f_{2i} \frac{(x - x_{2i+1})(x - x_{2i+2})}{(x_{2i} - x_{2i+1})(x_{2i} - x_{2i+2})}$$

$$+ f_{2i+1} \frac{(x - x_{2i})(x - x_{2i+2})}{(x_{2i+1} - x_{2i})(x_{2i+1} - x_{2i+2})}$$

$$+ f_{2i+2} \frac{(x - x_{2i+1})(x - x_{2i+2})}{(x_{2i+2} - x_{2i})(x_{2i+2} - x_{2i+1})}$$

となる．台形公式の導きと同じように，

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{3}(f_{2i} + 4f_{2i+1} + f_{2i+2})$$

$$= \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 \cdots 3f_{2n-2} + 4f_{2n-1} + f_n)$$

が得られる．

同じ分割数で積分区間を分割する場合，台形公式と比べて，シンプソン公式はより小さい誤差と少ない計算量の特徴が現れる．

4.4. 数値積分精度の追求

台形公式とシンプソン公式の分割数の増加で数値積分の精度を改善できる．ただし，こうすると，計算量の倍増が避けられない．高精度と低計算量で数値積分の計算を実現するために，いろいろなアルゴリズムが提案された.典型的なアルゴリズムとして,ロンベルグ（Romberg）法がある．研究によって，台形公式又はシンプソン公式のような一定の分点間隔で積分問題の答えを求める計算では，分点の間隔hが半分にすると,下記の興味深い現象が確認できる．

ここで,記号$I(f)$が積分を示すものである.即ち,

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx$$

また，記号$I(h)$は台形公式又はシンプソン公式を用いて，分点間隔hで計算された積分公式である．分点間隔hと分割数倍の分点間隔$h/2$の計算結果をしらべてみると，下記のようになる．

$$I(f) - I(h) = ch^m + o(h^m)$$

$$I(f) - I\left(\frac{h}{2}\right) = c\left(\frac{h}{2}\right)^m + o\left(\left(\frac{h}{2}\right)^m\right)$$

上記式から，

$$I(f) - I\left(\frac{h}{2}\right) \approx \frac{I\left(\frac{h}{2}\right) - I(h)}{2^m - 1}$$

となる．したがって，積分$I(f)$の近似値は

$$I(f) \approx I\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{I\left(\frac{h}{2}\right) - I(h)}{2^m - 1}$$

で計算される．上式から分かるように，積分区間の分割数を倍する前後の積分計算値$I(h)$と$I(h/2)$を使う単純な四則演算だけで，精度が大幅に向上される計算結果が期待できる．更に，このように得た結果を利用し，似ている四則演算を行うと，再度計算精度の大幅改善ができる．これについて，Euler-Maclaurin 定理がある．

Euler-Maclaurin 定理

２階公式$I(f) = I^{(m)}(h) + o(h^{2m})$がある場合，

$$I^{(m+1)}\left(\frac{h}{2}\right) = I^{(m)}\left(\frac{h}{2}\right) + \frac{I^{(m)}\left(\frac{h}{2}\right) - I^{(m)}(h)}{2^m - 1} + o(h^{2m+2})$$

ここで，添字mがm回目の計算結果を示す．従って，上式を繰り返し使うと，より精度の高い結果が得られる．

4.5. 数値積分の応用

自動車開発や建築設計や天気予報や集積回路設計など産業と日常生活と密着する分野では，計算力学をサポートする基礎技術として，数値積分の応用が不可欠の存在である[6]．具体的に，線積分，面積分，体積分，平面図形の性質，有限要素法，境界要素法は数値積分を利用している．また，宇宙開発では，例えば，人工衛星の発射軌道計算，月面着陸の計算問題で，数値積分も使われている．従って，現在数値積分は殆どの産業にとって，重要な技術である．新しい問題に対する新しい数値積分のアルゴリズムの研究と開発も世界中に行っている．

5. おわりに

コンピュータとコンピューティング手法の急速な発展により，ほぼすべての専門分野で定量化と高精度化が展開しており，計算物理学，計算化学，計算生物学，計算地質学，計算気象学などの一連の計算分野の分岐が生じている．本論文では，数値計算の補間と数値積分の代表的なアルゴリズムを説明し，誤差の影響など重要な問題を議論した．更に，数値計算の応用分野と補間と数値計算の典型的な応用例を紹介した．特に，人工知能や自動認識など近年注目される研究分野での応用での研究例を上げて，補間アプローチが基本技術の一つとして，その重要性を説明した．理工系の学生にとって，数値計算は修得すべき重要科目の一つである．

参考文献

[1] Han Pu,Meng Lei,Huang Bao-hai,Li Qin-dao, “The design of digital filter based on improved EMD”, 8th World Congress on Intelligent Control and Automation, pp.101-105,2010.

[2] Chongfu Huang,“Principle of Internet of Intelligences and Development of its Core Technology”, Journal of Risk Analysis and Crisis Response, Volume 7,Issue 3,pp.146-155, September 2017.

[3] Li Qiquan,Wang Changquan,Yue Tianxiang,Li Bing, Yang Juan, “Open Access Method for spatial variety of soil organic matter based on radial basis function neural network”, Transactions of the Chinese Society of Agricultural Engineering, Volume 26, Number 1, pp.87-93, January 2010.

[4] Xuefeng GUAN, Yumei ZENG, “Research progress and trends of parallel processing, analysis, and mining of big spatiotemporal data”, PROGRESS IN GEOGRAPHY,Vol.37, Issue 10, pp.1314-1327, 2018.

[5] Mengyin Fu,Xiaochen Zhang, “Reference map generation techniques for scene matching guidance: An overview”, Proceedings of the 29th Chinese Control Conference, pp.25-

31, 2010.

[6] 黒木 健実, 添田 朋子, 大塚 宣子, “計算力学における数値積分の応用”, 森北出版, 1991.