第二章　桁落ちに気をつけよう（その一）

絶対値が極近い 2 数を足したり、引いたりして結果の絶対値が小さくなるような計算をすると[1], 有効数字が減る. このような現象を桁落ちという. 例えば絶対値のごく小さな x で,

$$x = 0.0031834 = 0.31834 \times 10^{-2}$$

という数に対して,

$$1 - \frac{1}{\sqrt{1+x}} = \frac{\sqrt{1+x}-1}{\sqrt{1+x}} \tag{1}$$

の値を計算せよと言われたとき, 左辺と右辺で値が変わってしまう. x と同じ有効数字５桁の計算で, (1) の左辺の値は

$$1 - \frac{1}{\sqrt{1.0032}} \approx 1 - \frac{1}{1.0016} \approx 1 - 0.099840 \approx 0.00160$$

となり, 最後の引き算で有効数字が３桁まで落ちてしまった. それに対して右辺の値は

$$\frac{1.0016-1}{1.0016} \approx \frac{0.0016}{1.0016} \approx 0.0015974$$

となり, 答えは有効数字３桁以降は誤差を含んでしまい有効数字は２桁となってしまう. それは第２辺の分子の引き算で有効数字が２桁になってしまったからである.

しかし, 式 (1) は, 分子の有理化ともいうべき形に変形すると全桁正しく計算できる.

$$\begin{aligned}\frac{\sqrt{1+x}-1}{\sqrt{1+x}} &= \frac{x}{\sqrt{1+x}(\sqrt{1+x}+1)} \\ &= \frac{x}{(1+x)+\sqrt{1+x}}\end{aligned}$$

[1]絶対値が極近い 2 数を足す場合は桁が繰り上がる場合に有効数字の桁落ちが起こる.

と変形してから計算すると,

$$\frac{0.003184}{1.0032+1.0016} \approx \frac{0.0031834}{2.0048} = 0.0015879$$

となって, 有効数字は 5 桁のままになる[2]. 似たようなことは三角関数を含んだ式の場合にも起こる. よく知られた倍角・半角の公式

$$\sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{1}{2}(1-\cos\theta) \tag{2}$$

において, θ が小さいとき, 例えば

$$\theta = 1.23456^\circ$$

のとき, 10 進 7 桁の表を使って左辺を計算すると

$$\sin^2 0.61728^\circ \approx (0.0107734)^2 \approx 1.16066\times10^{-4}$$

となるが, 右辺を計算すると

$$\frac{1}{2}(1-\cos 1.23456^\circ) \approx \frac{1}{2}(1-0.999768) \approx 1.16\times10^{-4}$$

このように $\cos\theta$ が 1 に極近いとき $1-\cos\theta$ は桁落ちを起こすので $1-\cos\theta$ を計算するときは $\sin^2\frac{\theta}{2}$ で, 計算した方が良い. つまり倍角より半角を使った方が良いということだ.

二次方程式でも同種の問題がある. 例えば根の公式をつかって

$$2.718282x^2 - 684.4566x + 0.3161592 = 0 \tag{3}$$

の根を 10 進 7 桁の精度で計算してみる. まず判別式は

$$\begin{aligned} D &= (684.4566)^2 - 4\times2.718282\times0.3161592 \\ &\approx 468480.8 - 3.437639 \\ &\approx 46847.44 \end{aligned}$$

となる. ゆえに

$$\sqrt{D} \approx 684.4541$$

で,

$$x_1 = \frac{684.4566+684.4541}{2\times2.718282} \approx \frac{1368.911}{5.436564} \approx 251.7970 \tag{4}$$

[2]途中で引き算が入らないので桁落ちが起こらない. 絶対値が極近い 2 数は足し算より引き算のほうが桁落ちが起こりやすい

$$x_2 = \frac{684.4566 - 684.4541}{2 \times 2.718282} \approx \frac{0.0025}{5.436564} \approx 0.0004598493 \tag{5}$$

(5) で極近い 2 数の引き算をしているので有効数字が 2 桁まで落ちてしまっている.

(1) を分子の有理化によって全桁の計算をしたように根の公式においても全桁に近い計算をする方法がある.

2 次方程式

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

が 2 実根をもつとき, その根の公式

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{D}}{2a} \qquad (D \equiv b^2 - 4ac)$$

において, $-b \pm \sqrt{D}$ の "$\pm$"は

$$\text{“}b > 0 \text{ なら} -, b < 0 \text{ なら } +\text{”}$$

をさいようして一方の根 x_1 を定めて, もう一方の根 x_2 は "根と係数の関係"

$$x_2 = \frac{\frac{c}{a}}{x_1}$$

により計算すると良い.

上例では

$$\begin{aligned} x_2 &\approx \frac{\left(\frac{0.3161592}{2.718282}\right)}{251.7970} \\ &\approx \frac{0.1163085}{251.7970} \approx 0.004619138 \end{aligned}$$

となり, 最後の桁に "2"の狂いがあるだけである[3]. これは根の公式の分子を有理化したもの[4] を使っているともみなせる.

重根の場合も同じことが起こる. 例えば

$$2.718282x^2 - 1.854089x + 0.3161592 = 0$$

[3] $x_2 = \frac{c}{ax_1}$ で計算すると全桁正しく計算できる.

$$x_2 \approx \frac{0.3161592}{2.718282 \times 251.7970} \approx \frac{0.3161592}{684.4553} \approx 0.0004619136$$

となる

[4] 根の公式の分子の有理化は $\frac{2c}{(-b \mp \sqrt{D})}$

の判別式は, 10 進 7 桁の計算で

$$\begin{aligned} D &= (1.854089)^2 - 4 \times 2.718282 \times 0.3161592 \\ &\approx 3.437646 - 3.437639 \approx 0.000007 \end{aligned}$$

になり, D が 0 に近くなる[5]ということは有効数字も少なくなる.

次に $\sqrt{D}$ を求める.

$$\sqrt{D} \approx 0.00264575$$

値が大きくなったように見えるがもともとの有効数字が 1 桁なのでこれも 1 桁になる. よって, 根の公式に入れると

$$\begin{aligned} -b \pm \sqrt{D} &\approx 1.854089 \pm 0.00264575 \\ &\approx 1.856737, 1.851445 \end{aligned}$$

よって,

$$x_1, x_2 = 0.3415277, 0.3415543$$

ただし, 有効数字は 3 桁.

一般に “m重根の有効数字の桁数は, 計算桁数の $\frac{1}{m}$ になる”といわれている[6].

[5] D が 0 のとき重根になるので今回は 0 に近くなる
[6] なんでそうなるかわからない