数値積分 (1)

桂田 祐史

2016 年 4 月 26 日, 2016 年 6 月 8 日

森 [1] を参考にした。他のテキスト (山本 [2], 杉原・室田 [3] 等) を参考にして完備化したい。適当に選んで講義する (この文書には講義しないことが沢山書いてある)。

2016/4/27 の講義では、1.1, A.1, A.2, 1.2, 1.3 の内容を講義した。

目 次

1 数値積分入門

1.1 はじめに

定積分の値を数値計算で求めることを**数値積分**という。

積分の計算が微分の計算よりも難しい場合が多いということは知っているであろう。与えられた関数 f が、導関数が分かっている関数を組み合わせたものであるとき、f の導関数は容易に計算出来るが、同様のことが積分については成立しない (商の微分法、合成関数の微分法

があるが、商の積分法、合成関数の積分法はないことが理由としてあげられる。$\sin x$, x の原始関数を知っていても、$\dfrac{\sin x}{x}$ の原始関数は分からない。)。

そこで、定積分の値を数値計算で求めることを考える。

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx \tag{1}$$

を考える。

特別の f に対して $I(f)$ を計算するのではなく、ある程度広い範囲の f について、共通のやり方で $I(f)$ を計算する方法を考察する。

応用上現れる近似公式はほとんどが次の形をしている。

$$I_n(f) = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k). \tag{2}$$

ここで x_k は $[a,b]$ 内から選んだ相異なる点で、**標本点**と呼ばれる。また A_k は**重み**と呼ばれる。$I_n(f)$ は、n 個の標本点での f の関数値に重みをかけて和を取ったものである。

簡単な例をあげよう (図を描いて、各 $I_n(f)$ がどういう図形の面積を表しているか説明すること)。

例 1.1 (中点公式)

$$I_1(f) = hf\left(\frac{a+b}{2}\right), \quad h = b-a.$$

例 1.2 (台形公式)

$$I_2(f) = \frac{h}{2}\left(f(a)+f(b)\right), \quad h = b-a.$$

例 1.3 (Simpson 公式)

$$I_3(f) = \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right), \quad h = \frac{b-a}{2}.$$

例 1.4 (Simpson $\dfrac{3}{8}$ 公式)

$$I_4(f) = \frac{3h}{8}\left(f(a) + 3f\left(\frac{2a+b}{3}\right) + 3f\left(\frac{a+2b}{3}\right) + f(b)\right), \quad h = \frac{b-a}{3}.$$

注意 1.5 Simpson $\dfrac{3}{8}$ 公式には利点がほとんどないことを、後で紹介する予定である。使う価値のない公式であるので、間違えて使わないように。 ■

1.2 補間型数値積分公式

ここを説明する前に補間多項式 (付録 A.1, A.2) の説明をすること。

定積分 $I = \displaystyle\int_a^b f(x)\,dx$ の f を、区間 $[a,b]$ から選んだ相異なる n 個の点 (標本点と呼ばれる) $x_1, \cdots, x_n$ に関する f の Lagrange 補間多項式 $f_n(x)$ で置き換えて得られる

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

を**補間型数値積分公式**と呼ぶ。

標本点 $x_1, \cdots, x_n$ に関する補間多項式 $f_n(x)$ は、

$$f_n(x) \in \mathbb{R}[x], \quad \deg f_n(x) \le n-1, \quad f_n(x_j) = f(x_j) \quad (j = 1, 2, \cdots, n)$$

を満たすものとして定義されるが、次のように具体的に表せる。

$$f_n(x) := \sum_{k=1}^{n} f(x_k) L_k^{(n-1)}(x), \quad L_k^{(n-1)}(x) := \prod_{\substack{1 \le j \le n \\ j \ne k}} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}.$$

$L_k^{(n-1)}(x)$ は、標本点 $x_1, \cdots, x_n$ に関する Lagrange 補間係数と呼ばれる。次の条件で特徴づけることも出来る:

$$L_k^{(n-1)}(x) \in \mathbb{R}[x], \quad \deg L_k^{(n-1)}(x) = n-1, \quad L_k^{(n-1)}(x_j) = \delta_{jk} \quad (j = 1, 2, \ldots, n).$$

$$F_n(x) := \prod_{j=1}^{n} (x - x_j) = (x - x_1) \cdots (x - x_n)$$

とおくと、

$$L_k^{(n-1)}(x) = \frac{F_n(x)}{(x - x_k) F_n'(x_k)}$$

と表すことも出来る。

$$I_n = \int_a^b f_n(x)\,dx = \int_a^b \sum_{k=1}^{n} f(x_k) L_k^{(n-1)}(x)\,dx = \sum_{k=1}^{n} f(x_k) \int_a^b L_k^{(n-1)}(x)\,dx$$

であるから、

(3) $$A_k := \int_a^b L_k^{(n-1)}(x)\,dx$$

とおくと、

(4) $$I_n = \sum_{k=1}^{n} A_k f(x_k).$$

公式 $I_n(f)$ が m 次の精度であるとは、$E(f) := I(f) - I_n(f)$ とおいたとき、次の条件が成り立つことをいう。

(5) $$(\forall k \in \{0, 1, \cdots, m\}) \quad E_n\left(x^k\right) = 0 \quad \wedge \quad E_n\left(x^{m+1}\right) \ne 0.$$

(m 次以下の任意の多項式の積分を正確に計算できるが、$m+1$ 次の多項式で積分が正確に計算出来ないものがある、ということである。)

1.3 Newton-Cotes 公式

$x_0, x_1, \cdots, x_N$ を区間 $[a, b]$ の N 等分点とする。すなわち、

(6) $$h = \frac{b-a}{N}, \quad x_k = a + kh \quad (k = 0, 1, \cdots, N).$$

$x_0, x_1, \cdots, x_N$ を標本点とする補間型数値積分公式

(7) $$I_{N+1} = \sum_{k=0}^{N} A_k f(x_k)$$

を **Newton-Cotes の積分公式**と呼ぶ。ここで

$$A_k = \int_a^b L_k^{(N)}(x)\,dx, \quad L_k^{(N)}(x) = \prod_{\substack{0\le j\le N\\ j\ne k}} \frac{x-x_j}{x_k-x_j} \quad (k=0,1,\cdots,N). \tag{8}$$

$N=1$ の場合が**台形則** (例 1.2), $N=2$ の場合が **Simpson 則** (例 1.3) である。
作り方から次が成り立つことは、ほぼ明らかであろう。

命題 1.6 N 次以下の多項式 $f(x)$ に対して、N 次 Newton-Cotes 型数値積分公式 I_{N+1} は正確な値を与える。すなわち

$$I_{N+1}(f) = I(f) \left(= \int_a^b f(x)\,dx\right).$$

証明 $f(x) = f_N(x)$ であるから

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b f_N(x)\,dx = I_{N+1}(f).\blacksquare$$

しかし実は N が偶数のときは、I_{N+1} は $N+1$ 次以下の多項式に対して正確な値を与える(後で証明する)。

系 1.7 (1) 台形則は 1 次以下の多項式の積分を正確に計算できる。

(2) Simpson 則は 2 次以下の多項式の積分を正確に計算できる (実は 3 次以下の多項式の積分を正確に計算できる)。

注意 1.8 (番号の付け方) I_n, $f_{n-1}(x)$, $L_j^{(n-1)}(x)$, I_{N+1}, $f_N(x)$, $L_j^{(N)}(x)$ というのが出て来たが、

- 積分公式 I_n, I_{N+1} の添字 n, $N+1$ は、標本点の個数を表している。
- 多項式 $f_{n-1}(x)$, $f_N(x)$, $L_j^{(n-1)}(x)$, $L_j^{(N)}(x)$ の添字 $n-1$, N は、次数を表している。■

公式 I_{N+1} の具体形

N が小さい場合に A_k を計算してみよう。$x_0, x_1, \ldots, x_N$ を標本点とする補間多項式は

$$f_N(x) = \sum_{j=0}^N f(x_j) L_j^{(N)}(x), \quad L_j^{(N)}(x) = \prod_{k\ne j} \frac{x-x_k}{x_j-x_k}.$$

ただし $\prod_{k\ne j}$ は、$k\in\mathbb{Z}$, $0\le k\le N$, $k\ne j$ を満たす k についての積を表す。

$$I_{N+1} = \int_a^b \sum_{j=0}^N f(x_j) L_j^{(N)}(x)\,dx = \sum_{j=0}^N \frac{f(x_j)}{\prod_{k\ne j}(x_j-x_k)} \int_a^b \prod_{k\ne j}(x-x_k)\,dx.$$

$x = a+th$ ($t\in[0,N]$) と変数変換すると

$$dx = h\,dt,$$
$$\prod_{k\ne j}(x-x_k) = \prod_{k\ne j}(a+th-(a+kh)) = h^N \prod_{k\ne j}(t-k),$$

また

$$\prod_{k\neq j}(x_j - x_k) = \prod_{k\neq j}(j-k)h = h^N \prod_{k\neq j}(j-k) = h^N (-1)^{N-j}\frac{N!}{\binom{N}{j}}$$

であるから

$$I_{N+1} = \sum_{j=0}^{N} f(x_j)A_j, \quad A_j = h\cdot(-1)^{N-j}\frac{\binom{N}{j}}{N!}\int_0^N \prod_{k\neq j}(t-k)dt$$

$N=1$ のとき

$$(A_0, A_1) = \left(\frac{h}{2}, \frac{h}{2}\right) = \frac{b-a}{2}(1,1)$$
$$I_2(f) = \frac{b-a}{2}\left(f(a)+f(b)\right).$$

$N=2$ のとき

$$(A_0, A_1, A_2) = \left(\frac{h}{3}, \frac{4h}{3}, \frac{h}{3}\right) = \frac{b-a}{6}(1,4,1),$$
$$I_3(f) = \frac{b-a}{6}\left(f(a)+4f\left(\frac{a+b}{2}\right)+f(b)\right).$$

$N=3$ のとき

$$(A_0, A_1, A_2, A_3) = \left(\frac{3h}{8}, \frac{9h}{8}, \frac{9h}{8}, \frac{3h}{8}\right) = \frac{b-a}{8}(1,3,3,1),$$
$$I_4(f) = \frac{b-a}{8}\left(f(a)+3f\left(\frac{2a+b}{3}\right)+3f\left(\frac{a+2b}{3}\right)+f(b)\right).$$

$N=4$ のとき、

$$(A_0, A_1, A_2, A_3, A_4) = \left(\frac{14h}{45}, \frac{64h}{45}, \frac{24h}{45}, \frac{64h}{45}, \frac{14h}{45}\right) = \frac{b-a}{90}(7,32,12,32,7),$$
$$I_5(f) = \frac{b-a}{90}\left(7f(a)+32f\left(\frac{3a+b}{4}\right)+12f\left(\frac{2a+2b}{4}\right)+32f\left(\frac{a+3b}{4}\right)+7f(b)\right).$$

Mathematica で検算

```
a[NN_] := h Table[(-1)^(NN - j) Binomial[NN, j]/NN!
   Integrate[Product[t - k, {k, 0, NN}]/(t - j), {t, 0, NN}], {j, 0, NN}]
a[1]
a[2]
a[3]
a[4]
```

(h のところは (b-a)/NN とする方が良いか？)

A 関数近似

A.1 補間公式 (補間多項式)

関数 $f\colon [a,b]\to\mathbb{R}$ のグラフから、相異なる n 個の点 $(x_1, f(x_1)), \cdots, (x_n, f(x_n))$ を取ったとき、$n-1$ 次以下の多項式 $f_n(x)$ で、グラフがそれら n 個の点を通るものが一意的に存在することを示す。$f_n(x)$ を f の補間多項式と呼ぶ。

(導関数も近似するという Hermite 補間というものがあり、それと区別するために、Lagrange 補間ということがある。)

命題 A.1 (補間多項式の一意存在) $x_1, \cdots, x_n$ は区間 $[a,b]$ 内の相異なる点、$f\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ とするとき、

$$f_n(x) \in \mathbb{R}[x], \quad \deg f_n(x) \le n-1, \quad f_n(x_k) = f(x_k) \quad (k = 1, \dots, n)$$

を満たす $f_n(x)$ が一意的に存在する。

定義 A.2 (補間多項式) $x_1, \cdots, x_n$ は区間 $[a,b]$ 内の相異なる点、$f\colon [a,b] \to \mathbb{R}$ とするとき、命題 A.1 で一意的な存在が保証される $f_n(x)$ を、$x_1, \cdots, x_n$ を標本点とする、関数 f の**補間多項式**と呼ぶ。

証明 $f_n(x) \in \mathbb{R}[x]$, $\deg f_n(x) \le n-1$ であることから、

$$f_n(x) = \sum_{j=0}^{n-1} b_j x^j, \quad b_0, b_1, \cdots, b_{n=1} \in \mathbb{R}$$

と置くことが出来る。

$$f_n(x) = \begin{pmatrix} 1 & x & x^2 & \cdots & x^{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-1} \end{pmatrix}$$

であるから、条件 $f_n(x_k) = f(x_k)$ $(k = 1, \cdots, n)$ は

$$\begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{n-1} \\ \vdots & & & \vdots & \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_{n-1} \end{pmatrix}$$

と同値であり、$\varphi\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ を $\varphi\left(\begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_{n-1} \end{pmatrix}\right) := \begin{pmatrix} f_n(x_1) \\ f_n(x_2) \\ \vdots \\ f_n(x_n) \end{pmatrix}$ で定めると、φ は線形写像であり、(定義域と終域の次元が等しいので) 3 条件 (i) φ が全単射, (ii) φ が単射, (iii) φ が全射, が同値であることに注意する。

以下、3 通りの証明 (a), (b), (c) を与える。

(a) (構成的な証明) $k \in \{1, \cdots, n\}$ に対して、

$$(9) \qquad L_k^{(n-1)}(x) := \frac{\displaystyle\prod_{\substack{1 \le j \le n \\ j \ne k}} (x - x_j)}{\displaystyle\prod_{\substack{1 \le j \le n \\ j \ne k}} (x_k - x_j)} = \frac{(x-x_1)\cdots(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})\cdots(x-x_n)}{(x_k-x_1)\cdots(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})\cdots(x_k-x_n)}$$

とおくと、

$$(10) \qquad L_k^{(n-1)}(x) \in \mathbb{R}[x], \quad \deg L_k^{(n-1)}(x) = n-1, \quad L_k^{(n-1)}(x_j) = \delta_{jk} \quad (1 \le j \le n)$$

が成り立つ。ゆえに任意の $\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$ に対して、

$$f_n(x) := \sum_{k=1}^{n} a_k L_k^{(n-1)}(x) \tag{11}$$

とおくと、

$$f_n(x) \in \mathbb{R}[x], \quad \deg f_n(x) \le n-1, \quad f_n(x_j) = a_j \quad (1 \le j \le n)$$

が成り立つ (実際、$f_n(x_j) = \displaystyle\sum_{k=1}^{n} a_k L_k^{(n-1)}(x_j) = \sum_{k=1}^{n} a_k \delta_{jk} = a_j$)。これは φ が全射であることを示している。ゆえに φ は全単射である。

(b) (省エネの証明. (志村 [4] に載っていた。) $(b_0, b_1, \cdots, b_n)^T \in \ker \varphi$ とする。$\varphi(b_0, b_1, \cdots, b_n) = \mathbf{0}$ は

$$f_n(x_1) = f_n(x_2) = \cdots = f_n(x_n) = 0$$

を意味する。$x_1, \cdots, x_n$ が相異なるならば、因数定理を用いて、$f_n(x) = 0$ (多項式として) が導かれる。ゆえに $b_0 = \cdots = b_{n-1} = 0$. ゆえに $\ker \varphi = \{\mathbf{0}\}$ であるので、φ は単射である。ゆえに φ は全単射である。

(c) (もしも Vandermonde の行列式を知っているならば) φ の表現行列は、Vandermonde 行列であり、その行列式は差積 $\displaystyle\prod_{1 \le i < j \le n} (x_j - x_i)$ に等しい。$x_1, \cdots, x_n$ が相異なるならば、これは 0 ではない。ゆえに φ は全単射である。 ■

定義 A.3 (Lagrange 補間係数) $x_1, \cdots, x_n$ を $\mathbb{R}$ 内の相異なる点とするとき、(9) で定まる $L_1^{(n-1)}(x), \ldots, L_n^{(n-1)}(x)$ を、$x_1 \cdots, x_n$ を標本点とする **Lagrange 補間係数**と呼ぶ。

細かい注意になるが、Lagrange 補間係数は、条件 (10) で特徴づけられる。実際、命題 A.1 の証明中の φ が単射であることから、(10) を満たす $L_k^{(n-1)}(x)$ は一意的である。

命題 A.4 $x_1, \cdots, x_n$ を $\mathbb{R}$ 内の相異なる点、$L_k^{(n-1)}(x)$ $(k = 1, \cdots, n)$ を、$x_1, \cdots, x_n$ を標本点とする Langrange 補間係数とするとき、$F_n(x) := \displaystyle\prod_{j=1}^{n} (x - x_j)$ とおくと、

$$L_k^{(n-1)}(x) = \frac{F_n(x)}{(x - x_k) F_n'(x_k)} \quad (k = 1, 2, \cdots, n).$$

証明

$$\frac{F_n(x)}{x - x_k} = \prod_{\substack{1 \le j \le n \\ j \ne k}} (x - x_j).$$

一方、積の微分法から

$$F_n'(x) = \sum_{k=1}^{n} \prod_{\substack{1 \le j \le n \\ j \ne k}} (x - x_j), \quad F_n'(x_k) = \prod_{\substack{1 \le j \le n \\ j \ne k}} (x_k - x_j) \quad (k = 1, \cdots, n)$$

であるから

$$\frac{F_n(x)}{(x-x_k)F_n'(x_k)}=\frac{\displaystyle\prod_{\substack{1\le j\le n\\ j\ne k}}(x-x_j)}{\displaystyle\prod_{\substack{1\le j\le n\\ j\ne k}}(x_k-x_j)}=L_k^{(n-1)}(x).\blacksquare$$

この命題を用いると、補間多項式 $f_n(x)$ は次のように表現できる:

(12)
$$f_n(x)=\sum_{k=1}^{n}\frac{F_n(x)}{(x-x_k)F_n'(x_k)}f(x_k),\quad F_n(x):=\prod_{j=1}^{n}(x-x_j)\,.$$

これを **Lagrange の補間公式**と呼ぶ。

補間多項式を表す公式には、これ以外に **Newton の補間公式**と呼ばれるものがあるが、省略する。

次の命題は具体的な誤差評価の役に立つのかなあ？

命題 A.5 (Lagrange 補間公式の誤差) (準備中) $n\in\mathbb{N}$, $f\in C^n([a,b];\mathbb{R})$ ならば、任意の $x\in[a,b]$ に対して、ある $\xi_x\in J$ が存在して、

$$f(x)-f_n(x)=\frac{1}{n!}F_n(x)f^{(n)}(\xi_x).$$

ここで J は $x_1,\cdots,x_n,x$ のすべてを含む最小の区間 (いわゆる区間包) である。

証明 (準備中 — 実は閉店だったりして) ■

A.2 Runge の現象

補間多項式において、標本点を等間隔に取ることにすると、標本点の数を増やすにつれて、補間多項式 $f_n(x)$ がもとの関数 f とかけ離れてしまうことが起こり得る。詳しい分析は後回しにして、ここでは実例を見てもらうことにする。

$$a=-1,\quad b=1,\quad N\in\mathbb{N},\quad h=\frac{2}{2N}=\frac{1}{N},\quad x_j=a+jh\quad (j=0,1,\cdots,2N)$$

として、関数

(13)
$$f(x)=\frac{1}{1+25x^2}$$

の補間多項式を求めてグラフを描いてみよう。

```
/*
 * runge.c --- 等間隔標本点の Lagrange 補間はポシャるという Runge の現象
 * 参考: 森正武, 数値解析, 共立出版 (1973, 第2版 2002).
 * gcc runge.c ; ./a.out > runge.data
 * gnuplot> f(x)=1/(1+25*x*x)
 * gnuplot> plot [-1:1] [-1:1] "runge.data" with linespoints, f(x)
 * gnuplot> plot [-1:1] [-1:10] "runge.data" with linespoints, f(x)
 */

#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>

/* [-1,1] での等間隔標本点がうまく行かないことで有名な関数 */
double f(double x)
{
  return 1.0 / (1.0 + 25.0 * x * x);
}

/* Lagrange 補間係数 */
double L(double x, int k, int N, double xv[])
{
  int j;
  double t = 1;
  for (j = -N; j <= N; j++)
    if (j != k)
      t *= (x - xv[j+N]) / (xv[k+N] - xv[j+N]);
  return t;
}

/* Lagrange 補間公式 */
double fn(double x, int N, double xv[], double fv[])
{
  int k;
  double s = 0;
  for (k = -N; k <= N; k++)
    s += fv[k+N] * L(x, k, N, xv);
  return s;
}

int main(void)
{
  int j, N, nn;
  double h;
  double *xv, *fv;
  N = 10;
  xv = malloc(sizeof(double) * (2 * N + 1)); // エラーチェックさぼり
  fv = malloc(sizeof(double) * (2 * N + 1)); // 同上
  h = 1.0 / N;
  for (j = -N; j <= N; j++) {
    xv[j + N] = j * h;
    fv[j + N] = f(xv[j + N]);
  }
  nn = 200;
  h = 2.0 / nn;
  printf("%g %g\n", -1.0, fn(-1.0, N, xv, fv));
  for (j = 1; j <= nn; j++)
    printf("%g %g\n", -1.0 + j * h, fn(-1.0 + j * h, N, xv, fv));
}
```

```
$ gcc runge.c
$ ./a.out > runge.dat
$ gnuplot
gnuplot> f(x)=1/(1+25*x*x)
gnuplot> plot [-1:1] [-1:1] "runge.dat" with linespoints,f(x)
gnuplot> plot [-1:1] [-1:10] "runge.dat" with linespoints,f(x)
```

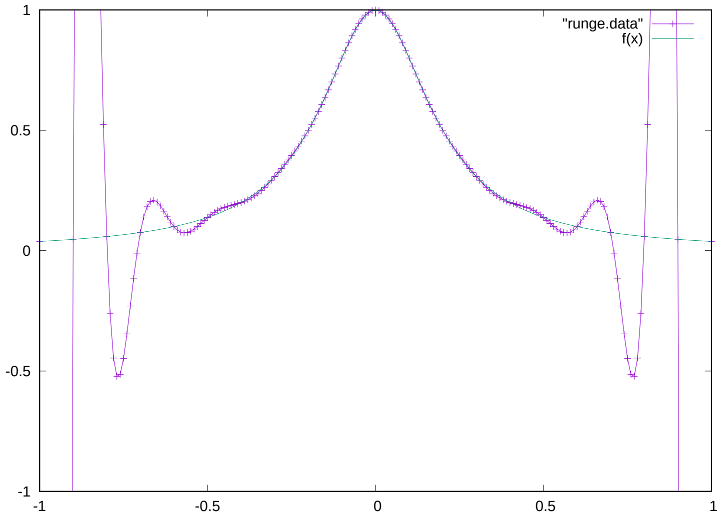

図 1: Runge の現象, $f(x) = \dfrac{1}{1+25x^2}$, $N = 10$

グラフを見ると、区間の中央部分では、そこそこ近似できているが、中央から離れるとずれが大きくなり、端の近くでははなはだしい差が生じている。これは標本点の個数を増やしても改善されず、むしろ悪化する。

この問題を回避するためにいくつか方法がある。

- 区間全体で 1 つの補間多項式を使うことをあきらめ、区間を小区間に分割して、その各小区間で、小さい n に対して補間多項式 f_n を用いる。
  - スプライン近似
  - 有限要素法の区分的多項式
  - 数値積分では、積分区間を事前に小区間に分割しておき、各小区間で少ない個数の等間隔標本点による Lagrange 補間公式の積分を用いる (**複合則**と呼ぶ)。例えば、小区間 $[a, b]$ で $N = 2$, $x_1 = a$, $x_2 = \frac{a+b}{2}$, $x_2 = b$ としたものを **(複合) Simpson 公式**と呼ぶ。
- 直交多項式の根を標本点とする Lagrange 補間公式 (直交多項式補間) が利用する。直交多項式の根は (等間隔に分布するのではなく) 区間の端付近に集まる性質を持っていて、Runge の現象は起きない。

  直交多項式の根を標本点とする補間多項式に基づく補間型数値積分公式を、**Gauss 型の数値積分公式**と呼ぶ。n 次の Gauss 型数値積分公式は $2n-1$ 次以下の多項式に対して、正確な積分値を与える (この点で Newton-Cotes 公式と比べて非常に優れている)。

余談 A.1 Simpson 公式は、Thomas Simpson (1710–1761, 英国の Market Bosworth, Leicestershire に生まれ、没する) にちなむ。公式自体は有名な Newton が先に発見していたとか。歴史上最も良く使われた数値積分公式であるそうだ。

筆者が高校生の頃の教科書には、数値積分が載っていた。参考書には、関数の 3 次関数補間に基づく "Simpson $\frac{3}{8}$ 公式" というのも紹介されていた。(実は、積分に関しては、3 次関数補間が 2 次関数補間より優れているということはないので、Simpson $\frac{3}{8}$ 公式を使うのはくたびれ損なのだが…) ■

A.3 直交多項式補間

これは関数近似や数値積分では、重要性が高い事項であるが、今回は言及する余裕がないだろう (直交性がからむと色々面白いことが起こるのだが…)。

w は区間 $[a,b]$ で連続で、有限個の点を除き $w(x)>0$ を満たすとする。$C([a,b])$ における内積 $(\cdot,\cdot)_w$ を

$$(f,g)_w := \int_a^b f(x)g(x)w(x)\,dx \tag{14}$$

で定める。

次の条件を満たす多項式の列 $\{p_n(x)\}_{n\ge 0}$ を**直交多項式**と呼ぶ。

(a) $(\forall n\ge 0)$ $p_n(x)\in\mathbb{R}[x]$, $\deg p_n(x)=n$.

(b) $(\forall j,k\ge 0)$ $j\ne k \Rightarrow (p_j,p_k)_w=0$.

(c) $p_0(x)=\mu_0>0$.

1, x, x^2, $\cdots$ に、内積 $(\cdot,\cdot)_w$ に関する Gram-Schmidt の直交化を施して得られる直交系 $p_0(x)$, $p_1(x)$, $\cdots$, $p_n(x)$, $\cdots$ は直交多項式である。

注意 A.6 (直交多項式の定義について) 密度関数を定めたとき、直交多項式は定数倍を除いて定まるので、Gram-Schmidt の直交化をしたものを直交多項式と定義しても良さそうである。もしそうすると、最高次の係数は常に 1 のはずであるが、以下の (伝統的な直交多項式の) 例ではそうなっていない (負になったりしている)。そのため、上のように定義することにした。 ■

$$\mu_j := p_j(x) \text{ の最高次の係数}, \quad \lambda_j := (p_j,p_j)_w \tag{15}$$

とおく。

$$f_n(x) := \sum_{j=0}^{n} c_j p_j(x), \quad c_j := \frac{(f,p_j)_w}{(p_j,p_j)_w} \quad (j=0,1,\cdots,n) \tag{16}$$

とおく。

命題 A.7 (直交多項式の根は積分区間内部に属する) w は区間 $[a,b]$ で連続で、有限個の点を除き $w(x)>0$ を満たすとする。このとき、任意の自然数 n に対して、$p_n(x)$ の根はすべて単純で、開区間 (a,b) に含まれる。

記号	名前	区間	密度関数 w	λ_n
$P_n(x)$	Legendre 多項式	$[-1,1]$	1	$\dfrac{2}{2n+1}$
$T_n(x)$	第 1 種 Chebyshev 多項式	$(-1,1)$	$\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	$\pi/2$ $(n\in\mathbb{N})$, π $(n=0)$
$L_n(x)$	Laguerre 多項式	$[0,\infty)$	e^{-x}	1
$H_n(x)$	Hermite 多項式	$(-\infty,\infty)$	e^{-x^2}	$\sqrt{\pi}2^n n!$

表 1: 良く利用される直交多項式 (A.4 参照)

証明　(準備中)

命題 A.8 (直交多項式の 3 項漸化式)

$$p_k(x)=(\alpha_k x+\beta_k)\,p_{k-1}(x)-\gamma_k p_{k-2}(x)\quad(k\in\mathbb{N}). \tag{17}$$

ただし、

$$\begin{aligned}
p_{-1}(x)&=0,\\
\alpha_k&=\frac{\mu_k}{\mu_{k-1}},\\
\beta_k&=-\frac{\alpha_k\,(xp_{k-1},p_{k-1})}{\lambda_{k-1}},\\
\gamma_k&=\frac{\alpha_k\,(xp_{k-1},p_{k-2})}{\lambda_{k-2}}=\frac{\mu_k\mu_{k-2}\lambda_{k-1}}{\mu_{k-1}^2\lambda_{k-2}}.
\end{aligned}$$

証明　(準備中) ■

命題 A.9 (直交多項式は Strum 列) $p_0(x)$, $p_1(x)$, $\cdots$, $p_n(x)$, $\cdots$ を直交多項式とするとき、任意の $n\in\mathbb{N}$ に対して、

$$p_n(x),p_{n-1}(x),\cdots,p_0(x)$$

は $[a,b]$ における Strum 列である。

証明　(準備中 — 当面使わないので後回し？) ■

命題 A.10 (Christoffel-Darboux の恒等式)

$$\sum_{k=0}^{n-1}\frac{p_k(x)p_k(y)}{\lambda_k}=\frac{\mu_{n-1}}{\mu_n\lambda_{n-1}}\cdot\frac{p_n(x)p_{n-1}(y)-p_{n-1}(x)p_n(y)}{x-y}. \tag{18}$$

証明　(準備中) 命題 A.8 を用いる。 ■

直交多項式の零点を標本点に用いた Lagrange 補間係数は簡単に求まる。

命題 A.11 w は区間 $[a,b]$ で連続で、有限個の点を除き $w(x)>0$ を満たすとする。$p_0(x)$, $\cdots$, $p_n(x)$ を内積 $(f,g)_w := \int_a^b f(x)g(x)w(x)\,dx$ に関する直交多項式で、x_1, $\cdots$, x_n を $p_n(x)$ の零点とする。このとき、

$$P_j^{(n-1)}(x) := w_j \sum_{k=0}^{n-1} \frac{p_k(x_j)p_k(x)}{\lambda_k}, \quad w_j := \left(\sum_{k=0}^{n-1} \frac{p_k(x_j)^2}{\lambda_k}\right)^{-1}$$

とおくと、$P_j^{(n-1)}$ は x_1, $\cdots$, x_n を標本点とする Lagrange 補間係数である。すなわち

$$P_j^{(n-1)}(x) = L_j^{(n-1)}(x).$$

証明 $j \neq \ell$ のとき (18) に $x=x_j$, $y=x_\ell$ を代入すると ($p_n(x_j)=p_n(x_k)=0$ であるから)

$$P_j^{(n-1)}(x_\ell) = w_j \sum_{k=0}^{n-1} \frac{p_k\left(x_j\right) p_k\left(x_\ell\right)}{\lambda_k} = w_j \frac{\mu_{n-1}}{\mu_n \lambda_{n-1}} \cdot \frac{p_n(x_j)p_{n-1}(x_\ell) - p_{n-1}(x_j)p_n\left(x_\ell\right)}{x_j - x_\ell} = 0.$$

一方、$j=\ell$ のとき、w_j の定義によって、

$$P_j^{(n-1)}(x_\ell) = w_j \sum_{k=0}^{n-1} \frac{p_k\left(x_j\right) p_k\left(x_\ell\right)}{\lambda_k} = w_j \sum_{k=0}^{n-1} \frac{p_k\left(x_j\right)^2}{\lambda_k} = 1.$$

ゆえに $P_j^{(n-1)}(x)$ は (10) を満たす。ゆえに $L_j^{(n-1)}(x)$ と一致する。■

$$f_n(x) = \sum_{j=1}^{n} f(x_j) P_j^{(n-1)}(x) = \sum_{j=1}^{n} f(x_j) \left(w_j \sum_{k=0}^{n-1} \frac{p_k(x_j)p_k(x)}{\lambda_k} \right) = \sum_{k=0}^{n-1} c_k p_k(x),$$

$$c_k := \frac{1}{\lambda_k} \sum_{j=1}^{n} w_j p_k(x_j) f(x_j).$$

これが効率よく計算できることを以下に示す。

(工事中…)

A.4 良く使われる直交多項式

定義式と重要な公式 (証明抜き) を列挙する。

例 A.12 (Legendre(ルジャンドル)多項式, Legendre の球関数) Legendre 多項式 $P_n(x)$ とは、$a=-1$, $b=1$, $w(x)\equiv 1$ の場合の直交多項式である。しばしば、次の Rodrigues の公式で定義される。

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \left(\frac{d}{dx}\right)^n \left[\left(x^2-1\right)^n\right]. \tag{19}$$

最初の 5 個を具体的に書くと

$$P_0(x)=1, \quad P_1(x)=x, \quad P_2(x)=\frac{1}{2}\left(3x^2-1\right), \quad P_3(x)=\frac{1}{2}\left(5x^3-3x\right),$$
$$P_4(x)=\frac{1}{8}\left(35x^4-30x^2+3\right), \quad \cdots$$

漸化式

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)\,xP_n(x) - nP_{n-1}(x)$$

を用いて計算するのが簡単なことが多い。

$P_n(x)$ は、Legendre の微分方程式の解である。

$$\lambda_n = \frac{2}{2n+1}.$$

Mathematica では、`LegendreP[`n`,`x`]` で $P_n(x)$ が計算できる。■

例 A.13 ((第 1 種)Chebyshev 多項式) (第 1 種)Chebyshev 多項式 $T_n(x)$ とは、$a=-1$, $b=1$, $w(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ の場合の直交多項式である。

(20) $$T_n(x) = \cos(nt), \quad x = \cos t.$$

$$\cos(2t) = 2\cos^2 t - 1, \quad \cos(3t) = 4\cos^3 t - 3\cos t, \quad \cdots$$

であるから、最初の 4 個を具体的に書くと

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x, \quad T_2(x) = 2x^2 - 1, \quad T_3(x) = 4x^3 - 3x,$$

漸化式

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) \quad (n \in \mathbb{N})$$

が成り立つ。

母関数を用いた特徴付け

$$\sum_{n=0}^{\infty} T_n(x) t^n = \frac{1-tx}{1-2tx+t^2}$$

も出来る。

Chebyshev の微分方程式

$$\left(1-x^2\right) y'' - xy' + n^2 y = 0$$

の解である。

$$\lambda_0 = \pi, \quad \lambda_n = \frac{\pi}{2} \quad (n \in \mathbb{N}).$$

Mathematica では、`ChebyshevT[`n`,`x`]` で $T_n(x)$ が計算できる。■

例 A.14 (Laguerre 多項式) Laguerre 多項式 $L_n(x)$ とは、$a=0$, $b=\infty$, $w(x)=e^{-x}$ の場合の直交多項式である。しばしば、次の Rodrigues の公式で定義される。

(21) $$L_n(x) := e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^n \left[x^n e^{-x}\right].$$

最初の 4 個を具体的に書くと

$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = 1 - x, \quad L_2(x) = \frac{1}{2}\left(x^2 - 4x + 2\right), \quad L_3(x) = \frac{1}{6}\left(-x^3 + 9x^2 - 18x + 6\right), \quad \cdots$$

(最高次の係数が負になることがあるのに注意。)

母関数を用いた特徴付け

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{L_n(x)}{n!} t^n = \frac{\exp\left(-\frac{tx}{1-t}\right)}{1-t}$$

も出来る。

微分方程式

$$xy'' + (1-x)y' + ny = 0$$

の解である。

Mathematica では、`LaguerreL[`n`,`x`]` で $L_n(x)$ が計算できる。■

例 A.15 (Hermite 多項式) Hermite 多項式 $H_n(x)$ とは、$a=-\infty$, $b=\infty$, $w(x)=e^{-x^2}$ の場合の直交多項式である。しばしば、次の Rodrigues の公式で定義される。

$$H_n(x) = (-1)^n\, e^{x^2} \left(\frac{d}{dx}\right)^n e^{-x^2}.$$

漸化式

$$H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$$

が成り立つ。最初の 5 個を具体的に書くと

$$\begin{aligned}&H_0(x)=1, \quad H_1(x)=2x, \quad H_2(x)=4x^2-2, \quad H_3(x)=8x^3-12x,\\ &H_4(x)=16x^4-48x^2+12, \quad \cdots\end{aligned}$$

母関数を用いた特徴付け

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!}t^n = e^{-t^2+2tx}$$

も出来る。

$$\lambda_n = \sqrt{\pi}2^n n!.$$

Mathematica では、`HermiteH[`n`,`x`]` で $H_n(x)$ が計算できる。■

B　Newton の補間公式

この節の内容は、山本 [2] に基づく。

定義 B.1 $n=0,1,\cdots$ に対して、$n+1$ 変数関数 $f[x_n,\cdots,x_1,x_0]$ を次のように定め、f の n **階差分商**と呼ぶ。

$$\begin{aligned}
f[x_0] &:= f(x_0),\\
f[x_1,x_0] &:= \frac{f[x_1]-f[x_0]}{x_1-x_0},\\
f[x_2,x_1,x_0] &:= \frac{f[x_2,x_1]-f[x_1,x_0]}{x_2-x_0},\\
&\cdots\\
f[x_n,\cdots,x_1,x_0] &:= \frac{f[x_n,\cdots,x_1]-f[x_{n-1},\cdots,x_0]}{x_n-x_0},\\
&\cdots
\end{aligned}$$

命題 B.2

$$f\left[x_n, \cdots, x_1, x_0\right] = \sum_{i=0}^{n} \frac{f(x_i)}{(x_i - x_n)\cdots(x_i - x_{i+1})(x_i - x_{i-1})\cdots(x_i - x_0)}.$$

証明

$$\begin{aligned}
f\left[x_1, x_0\right] &= \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}, \\
f\left[x_2, x_1, x_0\right] &= \frac{f\left[x_2, x_1\right] - f\left[x_1, x_0\right]}{x_2 - x_0} = \frac{1}{x_2 - x_0}\left(\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} - \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}\right) \\
&= \frac{f(x_2)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_0)} + \frac{f(x_1)}{x_2 - x_0}\cdot\left(\frac{1}{x_1 - x_2} - \frac{1}{x_1 - x_0}\right) + \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_2)(x_0 - x_1)} \\
&= \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_2)(x_0 - x_1)} + \frac{f(x_1)}{(x_1 - x_2)(x_1 - x_0)} + \frac{f(x_2)}{(x_2 - x_1)(x_2 - x_0)}.
\end{aligned}$$

$n = 1, 2$ のとき、確かに成り立つ。

$n = k$ まで成り立ったとする。

$$\begin{aligned}
&f\left[x_{k+1}, x_k, \cdots, x_1, x_0\right] \\
&\quad = \frac{f\left[x_{k+1}, \cdots, x_0\right] - f\left[x_k, \cdots, x_1\right]}{x_{k+1} - x_0} \\
&\quad = \frac{1}{x_{k+1} - x_0}\left(\sum_{i=1}^{k+1} \frac{f(x_i)}{(x_i - x_{k+1})\cdots(x_i - x_{i+1})(x_i - x_{i-1})\cdots(x_i - x_1)}\right. \\
&\qquad\qquad \left. - \sum_{i=0}^{k} \frac{f(x_i)}{(x_i - x_k)\cdots(x_i - x_{i+1})(x_i - x_{i-1})\cdots(x_i - x_0)}\right) \\
&\quad = \frac{1}{x_{k+1} - x_0}\left[\frac{f(x_{k+1})}{(x_{k+1} - x_k)\cdots(x_{k+1} - x_1)}\right. \\
&\qquad\qquad + \sum_{i=1}^{k} f(x_i)\left(\frac{1}{(x_i - x_{k+1})\cdots(x_i - x_{i+1})(x_i - x_{i-1})\cdots(x_i - x_1)}\right. \\
&\qquad\qquad\qquad \left. - \frac{1}{(x_i - x_k)\cdots(x_i - x_{i+1})(x_i - x_{i-1})\cdots(x_i - x_0)}\right) \\
&\qquad\qquad \left. - \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_k)\cdots(x_0 - x_1)}\right] \\
&= \frac{f(x_{k+1})}{(x_{k+1} - x_k)\cdots(x_{k+1} - x_0)} + \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_{k+1})\cdots(x_0 - x_1)} \\
&\qquad + \frac{1}{x_{k+1} - x_0}\sum_{i=1}^{k} f(x_i)\frac{(x_i - x_0) - (x_i - x_{k+1})}{(x_i - x_{k+1})\cdots(x_i - x_{i+1})(x_i - x_{i-1})\cdots(x_i - x_0)} \\
&= \frac{f(x_{k+1})}{(x_{k+1} - x_k)\cdots(x_{k+1} - x_0)} + \frac{f(x_0)}{(x_0 - x_{k+1})\cdots(x_0 - x_1)} \\
&\qquad + \sum_{i=1}^{k} \frac{f(x_i)}{(x_i - x_{k+1})\cdots(x_i - x_{i+1})(x_i - x_{i-1})\cdots(x_i - x_0)} \\
&= \sum_{i=0}^{k+1} \frac{f(x_i)}{(x_i - x_{k+1})\cdots(x_i - x_{i+1})(x_i - x_{i-1})\cdots(x_i - x_0)}.
\end{aligned}$$

これは $n = k + 1$ のときも成り立つことを示す。■

命題 B.3 (差分商の対称性) n 階差分商 $f[x_n,\cdots,x_1,x_0]$ は x_0, $\cdots$, x_n の対称式である。すなわち σ を $\{0,1,\cdots,n\}$ の任意の置換とするとき

$$f\left[x_{\sigma(n)},\cdots,x_{\sigma(0)}\right]=f\left[x_n,\cdots,x_0\right].$$

証明 命題 B.2 からすぐ分かる。■

次の定理は、Taylor の定理に対応すると考えられる。

命題 B.4 (Newton の補間公式) x_0, x_1, $\cdots$, x_n を $\mathbb{R}$ 内の相異なる点とする。x_0, x_1, $\ldots$, x_k を標本点とする k 次補間多項式を $p_k(x)$ とする $(k=1,2,\cdots,n)$ とき、

$$\begin{aligned}p_n(x)&=f[x_0]+f[x_0,x_1](x-x_0)+\cdots\\&\qquad+f[x_0,x_1,\cdots,x_{n-1},x_n](x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{n-1})\\&=p_{n-1}(x)+f[x_0,x_1,\cdots,x_{n-1},x_n]\prod_{i=0}^{n-1}(x-x_i).\end{aligned}$$

C 補間多項式を計算するアルゴリズム

(工事中)

C.1 はじめに

この節の内容は杉原・室田 [3] の第 9 章に基づく (山本 [2] を読んで良く分からなかったので)。

Vandermonde の行列の条件数は大きくなりがちで、連立 1 次方程式を解いて補間多項式を求めるのは避けるべきらしい (このことを自分で検討したことはまだない)。

以下、標本点の集合の部分集合を標本点とする補間多項式を導入し、漸化式を導く。

C.2 標本点全体の部分集合を標本点集合とする補間多項式

$[a,b]$ は $\mathbb{R}$ の区間、x_1, $\ldots$, x_n は $[a,b]$ 内の相異なる点、$f\colon[a,b]\to\mathbb{R}$ とする。

これまで「$x_1,\ldots,x_n$ を標本点とする f の補間多項式」を考えたが、補間多項式は標本点の並べ方には依らずに定まるので、それを「$\{x_1,\ldots,x_n\}$ を標本点集合とする f の補間多項式」という呼び方をしても混乱は生じない。

(念のため表現を変えて繰り返し: これまでは (重複のない) 有限点列に関して補間多項式を定義したが、有限点集合に関して補間多項式を定義できる。)

$\{x_1,\cdots,x_n\}$ の任意の空でない部分集合 $S=\{x_{i_1},\cdots,x_{i_m}\}$ (m は S の要素数) に対して、S を標本点集合とする f の補間多項式 $P[S](x)$ を導入する。すなわち、$P[S](x)$ は次の条件で定まる。

$$P[S](x)\in\mathbb{R}[x],\quad \deg P[S](x)\le m-1,\quad P[S]\left(x_{i_j}\right)=f\left(x_{i_j}\right)\quad (j=1,\cdots,m).$$

$P[S](x)$ を $P\left[x_{i_1},\ldots,x_{i_m}\right](x)$ あるいは $P\left[i_1,\ldots,i_m\right](x)$ と略記し、さらに i_1, $\cdots$, i_m が連続している、すなわち

$$i_2=i_1+1,\quad i_3=i_2+1,\quad \cdots,\quad i_m=i_{m-1}+1$$

が成り立っているときは $P[i_1 \sim i_m](x)$ とも表す。

$P[S](x)$ の $m-1$ 次の係数を $C[S]$ と表す。(これは $P[S](x)$ の最高次の係数ではないことに注意する。$P[S](x)$ は $m-1$ 次以下の多項式であるが、$m-1$ 次多項式であるとは限らない。)

補題 C.1 (漸化式) $[a,b]$ は $\mathbb{R}$ の区間、$x_1, \ldots, x_n$ は $[a,b]$ 内の相異なる点、$f\colon [a,b] \to \mathbb{R}$, S は $\{x_1, \cdots, x_n\}$ の任意の部分集合 ($S=\emptyset$ も許す) とする。$1 \le j \le n$, $1 \le k \le n$, $j \ne k$, $S \cap \{x_j, x_k\} = \emptyset$ ならば、

$$P[S;x_j,x_k](x) = \frac{(x-x_j)P[S;x_k](x) - (x-x_k)P[S;x_j](x)}{x_k - x_j}, \tag{22}$$

$$C[S;x_j,x_k] = \frac{C[S;x_k] - C[S;x_j]}{x_k - x_j}. \tag{23}$$

ただし、$P[S \cup \{x_j\}](x)$, $P[S \cup \{x_k\}](x)$, $P[S \cup \{x_j, x_k\}](x)$ をそれぞれ $P[S;x_j](x)$, $P[S;x_k](x)$, $P[S;x_j,x_k](x)$ と略記した。

証明

(22) の右辺を $p(x)$ とおく。S の要素数を m とおくとき、$S \cup \{x_k\}$, $S \cup \{x_j\}$ の要素数はともに $m+1$ であるから、$P[S;x_k](x)$, $P[S;x_j](x)$ はともに m 次以下の多項式である。ゆえに $p(x)$ は $m+1$ 次以下の多項式である。また

$$p(x) = \begin{cases} f(x_j) & (x = x_j) \\ f(x_k) & (x = x_k) \\ f(x_i) & (x = x_i \in S) \end{cases}$$

が成り立つ。実際、

(i) $x = x_j$ のとき、補間多項式の定義により $P[S;x_j](x) = f(x_j)$ であるから、

$$p(x) = \frac{(x_j - x_j)\,P[S;x_k](x_j) - (x_j - x_k)\,f(x_j)}{x_k - x_j} = \frac{0 - (x_j - x_k)\,f(x_j)}{x_k - x_j} = f(x_j).$$

(ii) $x = x_k$ のときも、(i) と同様にして $p(x) = f(x_k)$ が証明できる。

(iii) $x = x_i \in S$ のとき、補間多項式の定義により $P[S;x_k](x) = P[S;x_j](x) = f(x_i)$ であるから、

$$p(x) = \frac{(x - x_j)\,f(x_i) - (x - x_k)\,f(x_i)}{x_k - x_j} = \frac{(x_k - x_j)\,f(x_i)}{x_k - x_j} = f(x_i).$$

ゆえに $p(x)$ は、$S \cup \{x_j, x_k\}$ の要素を標本点とする f の補間多項式 $P[S;x_j,x_k](x)$ に一致する。

(22) の $m+1$ 次の係数を取ると、(23) が得られる。■

補間多項式の、この漸化式に基づくアルゴリズムとして、**Neville アルゴリズム**, **Aitken アルゴリズム**と呼ばれるものが知られている。前者について次項で解説する。

C.3 Neville アルゴリズム

f の $x_1, \ldots, x_n$ に関する補間多項式は、前項 (C.2) の記号で $P[1 \sim n](x)$ である。これを計算するアルゴリズムである Neville アルゴリズムを解説する。

C.3.1 1点における値の計算

杉原・室田 [3] には、漸化式

$$P[k \sim k+j](x) = \frac{(x - x_{k+j})\, P[k \sim k+j-1](x) - (x - x_k)\, P[k+1 \sim k+j](x)}{x_k - x_{k+j}} \tag{24}$$

と、図 2 が載っているが、計算の開始部分が若干分かりにくいと思われるので、説明を補足しておく。

$$\begin{array}{ccccccccc}
P[1] & & & & & & & & \\
 & \searrow & & & & & & & \\
P[2] & \rightarrow & P[1,2] & & & & & & \\
 & \searrow & & \searrow & & & & & \\
P[3] & \rightarrow & P[2,3] & \rightarrow & P[1,2,3] & & & & \\
 & \searrow & & \searrow & & \searrow & & & \\
\vdots & & \vdots & & \vdots & & \ddots & & \\
 & \searrow & & \searrow & & \searrow & & \searrow & \\
P[n] & \rightarrow & P[n-1,n] & \rightarrow & P[n-2,n-1,n] & \rightarrow & \cdots & \rightarrow & P[1,2,\dots,n]
\end{array}$$

図 2: Neville 算法

第 1 段 まず 0 次多項式 (定数) $P[1](x)$, $P[2](x)$, $\cdots$, $P[n](x)$ を

$$P[k](x) = f(x_k) \quad (k = 1, \dots, n)$$

で求める。

第 2 段 1 次以下の多項式 $P[1,2](x)$, $P[2,3](x)$, $\cdots$, $P[n-1,n](x)$ を、補題 C.1 を $S = \emptyset$ として用いて、

$$P[k,k+1](x) := \frac{(x - x_{k+1})P[k](x) - (x - x_k)P[k+1](x)}{x_{k+1} - x_k}$$

で求める。

第 3 段 $P[k,k+1,k+2](x)$ $(k = 1, 2, \cdots, n-2)$ を、補題 C.1 を $S = \{x_{k+1}\}$ として用いて、

$$\begin{aligned} P[k,k+1,k+2](x) &= P[\{x_{k+1}\}; x_k, x_{k+2}](x) \\ &:= \frac{(x - x_{k+2})P[k,k+1](x) - (x - x_k)P[k+1,k+2](x)}{x_k - x_{k+2}}. \end{aligned}$$

で求める。

上に引用した (24) は、(ここでの数え方で) 第 $j+1$ 段の計算式である。
第 n 段で、$P[1 \sim n-1](x)$ と $P[2 \sim n](x)$ から $P[1 \sim n](x)$ が求まる。

C.3.2 多数の点における値の計算

x の多数の値に対して、補間多項式 $P(x) = P[1 \sim n](x)$ の値を求めるには、事前に式をある程度整理しておくと都合が良い。

ここでは、Newton 補間公式

$$P(x) = P[1 \sim n](x) = \sum_{j=0}^{n-1} c_j R_j(x), \quad R_j(x) = \prod_{i=1}^{j} (x - x_i)$$

を用いる。あらかじめ c_j $(j = 0, \ldots, n-1)$ を求めておくと、x が与えられるごとに、Horner 法 (組立除法) と類似したアルゴリズム

```
b_0 := c_{n-1};
for (j = 1; j <= n-1; j++)
  b_j = b_{j-1}(x - x_{n-j}) + c_{n-1-j};
```

で $P(x) = b_{n-1}$ が計算できる。Newton 補間公式は計算に便利であることが分かる。

$$P[1 \sim k](x) = \sum_{j=0}^{k-1} c_j R_j(x) \quad (k = 1, \ldots, n)$$

であるから、その $k-1$ 次の係数として

(25) $$c_{k-1} = C[1 \sim k] \quad (k = 1, \ldots, n).$$

C.3.1 において、多項式 $P[k \sim k+j](x)$ $(0 \le j \le n-1,\ 1 \le k \le n-j)$ を求めた。$P[k \sim k+j](x)$ は j 次以下の多項式であるが、その j 次の係数 $C[k \sim k+j]$ を考える。まず $j = 0$ に対しては

(26) $$C[k] = P[k](x) = f(x_k) \quad (k = 1, \cdots, n).$$

$j = 1$ に対して、

$$P[k, k+1](x) = \frac{(x - x_{k+1})\, P[k](x) - (x - x_k)\, P[k+1](x)]}{x_k - x_{k+1}}$$

であるから、

(27) $$C[k, k+1] = \frac{C[k] - C[k+1]}{x_k - x_{k+1}} \quad (k = 1, \ldots, n-1)$$

である。

各 $j = 2, \ldots, n-1$ と、各 $k = 1, \ldots, n-j$ に対して、

$$P[k \sim k+j](x) = \frac{P[k \sim k+j-1](x) - P[k+1 \sim k+j](x)}{x_k - x_{k+j}}$$

であるから、

(28)
$$C[k \sim k+j] = \frac{C[k \sim k+j-1] - C[k+1 \sim k+j]}{x_k - x_{k+j}} \quad (j = 2, \ldots, n-1;\ k = 1, \ldots, n-j)$$

である。(この式で $j = 1$) としたものは、(27) に一致する。

これから $C[k \sim k+j]$ を (c[k][$k+j$] でなく) c[k][j] に記憶するとして、次のようなコードが出来る (まだ全然チェックしていないので信用しないように)。

2 次元配列を用いたコーディング

```
for (k = 1; k <= n; k++)
  c[k][0] = f(x[k]);
for (j = 1; j < n; j++)
  for (k = 1; k <= n-j; k++)
    c[k][j] = (c[k][j-1] - c[k+1][j-1]) / (x[k] - x[k+j]);
```

1 次元配列を用いたコーディング

```
for (k = 1; k <= n; k++)
  c[k] = f(x[k]);
for (j = 1; j < n; j++)
  for (k = 1; k <= n-j; k++)
    c[k+j] = (c[k+j-1] - c[k+j]) / (x[k] - x[k+j]);
```

実例が、山本 [2]、ハイラー・ヴァンナー [5]、篠原 [6] にあった気がする。探して電子化して、それをプログラムにしてチェックして、ここを完備化する。

C.4 プログラム例

次のプログラムは、多項式関数 $f(x) = x^3 - 2x^2 + 7x - 5$ の、0, 1, 2, 3 を標本点とする補間多項式を Newton 補間公式で求め、標本点での値を計算させてみたものである。

```
/*
 * dif.c --- 階差、差分商、Newton の補間公式
 */

#define MAXN (100)
#include <stdio.h>

double fun(double x)
{
  int i, n = 3;
  double a[4] = {1, -2, 7, -5};
  double s;
  // Horner 法による多項式の計算
  s = a[0];
  for (i = 1; i <= n; i++)
    s = s * x + a[i];
  return s;
}

// 階差の計算
void differences(int n, double x[], double f[])
{
```

```
  int i, k;
  for (k = 1; k <= n; k++)
    for (i = n; i >= k; i--) {
      f[i] = f[i] - f[i-1];
    }
}

// 差分商の計算
void difference_quotients(int n, double x[], double f[])
{
  int i, k;
  for (k = 1; k <= n; k++)
    for (i = n; i >= k; i--) {
      f[i] = (f[i] - f[i-1]) / (x[i] - x[i-k]);
    }
}

// Mewton の補間公式による補間多項式の計算
// 入力 n: 次数, x[]: 標本点, dq[]: 差分商
//      xx: 計算したい点
double newton(int n, double x[], double dq[], double xx)
{
  int i;
  double s;
  s = dq[n];
  for (i = n - 1; i >= 0; i--)
    s = dq[i] + (xx - x[i]) * s;
  return s;
}

int main(void)
{
  double f[MAXN+1], x[MAXN+1], fv[MAXN+1];
  int i, n;
  n = 3;
  // 標本点
  for (i = 0; i <= n; i++)
    x[i] = i;
  // 標本値
  for (i = 0; i <= n; i++)
    fv[i] = fun(x[i]);
  for (i = 0; i <= n; i++)
    printf("%g %g\n", x[i], fv[i]);

  for (i = 0; i <= n; i++)
    f[i] = fv[i];
```

```
  differences(n, x, f);
  for (i = 0; i <= n; i++)
    printf("%d 階階差 %g\n", i, f[i]);

  for (i = 0; i <= n; i++)
    f[i] = fv[i];
  difference_quotients(n, x, f);
  for (i = 0; i <= n; i++)
    printf("%d 階差分商 %g\n", i, f[i]);
  for (i = 0; i <= n; i++)
    printf("%f %f\n", x[i], newton(n, x, f, x[i])
);
  return 0;
}
```

実行例

```
$ cc dif.c
$ ./a.out
0 -5
1 1
2 9
3 25
0 階階差 -5
1 階階差 6
2 階階差 2
3 階階差 6
0 階差分商 -5
1 階差分商 6
2 階差分商 1
3 階差分商 1
0.000000 -5.000000
1.000000 1.000000
2.000000 9.000000
3.000000 25.000000
```

参考文献

[1] 森正武：数値解析, 共立出版 (1973), 第 2 版が 2002 年に出版された。

[2] 山本哲朗：数値解析入門 [新訂版], サイエンス社 (2003), 1976 年初版発行の定番本の待望の改訂版.

[3] 杉原正顯, 室田一雄：数値計算法の数理, 岩波書店 (1994).

[4] 志村五郎：数学をいかに使うか, ちくま学芸文庫, 筑摩書房 (2010).

[5] E. ハイラー, G. ヴァンナー：解析教程 上, 下, シュプリンガーフェアラーク東京 (1997), “Analysis by its History” の邦訳. Wanner は元は「ワナー」と綴っていた.

[6] 篠原能材(よしたね)：数値解析の基礎, 日新出版 (初版 1978, 5 版 1997).