

3.3 ラグランジュ補間の誤差

本節では、関数 $f(x)$ をラグランジュの補間多項式で近似したときの誤差を考える。いま、補間に使う点を

$$x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n \quad (3.12)$$

とし、点 $x_{n+1} \in [x_0, x_n]$ 、 $x_{n+1} \neq x_i$ ($i = 0, 1, \dots, n$) における誤差を評価する。ただし、 $f(x) \in C^{n+1}$ とする。

最初に

$$g(x) = f(x) - f_n(x) - a_{n+1}(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_n) \quad (3.13)$$

という関数を定義する。ただし、定数 a_{n+1} は $g(x_{n+1}) = 0$ となるよう定める。すると、この条件と $g(x)$ の定義から容易にわかるように

$$g(x_i) = 0 \quad (i = 0, 1, \dots, n, n+1) \quad (3.14)$$

が成り立つ。ここで、次の補題を用いる。

補題 関数 $g(x) \in C^{n+1}$ が区間 $[x_0, x_n]$ 内の相異なる $n+2$ 点で 0 となると、 $g^{(n+1)}(x)$ はこの区間で少なくとも 1 個の零点を持つ。

証明 $g(x)$ の $n+2$ 個の零点によって区切られてできる $n+1$ 個の区間を考える。各区間の両端では $g(x) = 0$ となるから、ロルの定理より、 $g'(x)$ はその区間内（両端点を含まない）に少なくとも 1 個の零点を持つ。したがって、 $g'(x)$ は区間 $[x_0, x_n]$ 内の相異なる $n+1$ 点で 0 となる。また、明らかに $g'(x) \in C^n$ である。この論法を繰り返してゆくことにより、 $g^{(n+1)}(x)$ は区間 $[x_0, x_n]$ 内の少なくとも 1 点で 0 となることがわかる。したがって補題が成り立つ。(Q.E.D.)

補題より、(3.13) 式の $g(x)$ に対し、 $g^{(n+1)}(\xi) = 0$ となる $\xi \in [x_0, x_n]$ が存在する。いま、 $f_n(x)$ は n 次多項式であるから、

$$g^{(n+1)}(x) = f^{(n+1)}(x) - (n+1)! a_{n+1} \quad (3.15)$$

となり、 $x = \xi$ を代入して

$$a_{n+1} = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \quad (3.16)$$

これを (3.13) 式に代入して $x = x_{n+1}$ とすると、

$$\begin{aligned} g(x_{n+1}) &= f(x_{n+1}) - f_n(x_{n+1}) \\ &\quad - \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} (x_{n+1} - x_0)(x_{n+1} - x_1)\cdots(x_{n+1} - x_n) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.17)$$

したがって,

$$f(x_{n+1}) - f_n(x_{n+1}) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x_{n+1} - x_i) \quad (3.18)$$

$$|f(x_{n+1}) - f_n(x_{n+1})| \leq \frac{1}{(n+1)!} \max_{x_0 \leq \xi \leq x_n} |f^{(n+1)}(\xi)| |x_n - x_0|^{n+1} \quad (3.19)$$

ここで、最後の式の導出には $|x_{n+1} - x_i| \leq |x_n - x_0|$ ($i = 0, 1, \dots, n$) を用いた。補間の性質より、 $x_{n+1} = x_i$ ($i = 0, 1, \dots, n$) のときには誤差は 0 となるから、(3.19) は任意の $x_{n+1} \in [x_0, x_n]$ について成り立つ式である。また、ラグランジュ補間とニュートン補間とは多項式としては同じものであるから、(3.19) 式はニュートン補間に対する誤差の評価式ともなっている。

(3.19) 式より、もし n を大きくしたときの $f^{(n)}(x)$ の増加の割合が小さければ、ラグランジュ補間の精度は補間点の個数を大きくすることで向上することがわかる。指数関数 $\exp(x)$ 、三角関数 $\sin(x)$ などはこの例である。一方、 n を大きくするにつれて $f^{(n)}(x)$ が急激に大きくなるような関数では、補間点の個数を増やすことでラグランジュ補間の精度がかえって悪化する場合がある。これを *Runge* の現象と呼ぶ。

3.4 スプライン補間

ラグランジュ補間やニュートン補間では、一般には補間点の数を増やせば精度は向上するが、*Runge* の現象により、この性質が成り立たなくなる場合もある。そこで、より頑健な補間法として、スプライン補間について述べる。ここでは特に、3 次の自然スプラインを取り上げる。

3 次の自然スプラインとは、各区間 $[x_{i-1}, x_i]$ ($i = 1, 2, \dots, n$) で補間関数が 3 次関数

$$P_i(x) = C_{1,i} + C_{2,i}(x - x_{i-1}) + C_{3,i}(x - x_{i-1})^2 + C_{4,i}(x - x_{i-1})^3 \quad (3.20)$$

で表され、かつ補間関数が C^2 級 (すなわち区間の境目で 2 階までの微係数が連続) となるような補間法である。

いま、補間点 x_0, x_1, \dots, x_n での関数値を y_0, y_1, \dots, y_n とすると、補間関数は次の (1) から (4) までの条件から定まる。

(1) 補間点で補間関数が元の関数と一致

$$\begin{cases} P_i(x_{i-1}) = y_{i-1} \\ P_i(x_i) = y_i \end{cases} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3.21)$$

より

$$\begin{cases} C_{1,i} = y_{i-1} \\ C_{1,i} + C_{2,i}\Delta x_i + C_{3,i}\Delta x_i^2 + C_{4,i}\Delta x_i^3 = y_i \end{cases} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (3.22)$$

(ただし $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$) という $2n$ 個の条件が得られる。

(2) 補間関数の 1 階微分が連続

$$P'_{i-1}(x_{i-1}) = P'_i(x_{i-1}) \quad (i = 2, 3, \dots, n) \quad (3.23)$$

より

$$C_{2,i-1} + 2C_{3,i-1}\Delta x_{i-1} + 3C_{4,i-1}\Delta x_{i-1}^2 = C_{2,i} \quad (i = 2, 3, \dots, n) \quad (3.24)$$

という $n - 1$ 個の条件が得られる。

(3) 補間関数の 2 階微分が連続

$$P''_{i-1}(x_{i-1}) = P''_i(x_{i-1}) \quad (i = 2, 3, \dots, n) \quad (3.25)$$

より

$$2C_{3,i-1} + 6C_{4,i-1}\Delta x_{i-1} = 2C_{3,i} \quad (i = 2, 3, \dots, n) \quad (3.26)$$

という $n - 1$ 個の条件が得られる。

(4) 区間の端点で曲率が 0

$$\begin{cases} P''_1(x_0) = 0 \\ P''_n(x_n) = 0 \end{cases} \quad (3.27)$$

より

$$\begin{cases} C_{3,1} = 0 \\ 2C_{3,n} + 6C_{4,n}\Delta x_n = 0 \end{cases} \quad (3.28)$$

という 2 個の条件が得られる。

式 (3.22), (3.24), (3.26), (3.28) を合わせてできる $4n$ 元の連立一次方程式を $4n$ 個の変数 $C_{1,i}, C_{2,i}, C_{3,i}, C_{4,i}$ ($i = 1, 2, \dots, n$) について解くことにより, スプライン補間が求められる。この方程式の詳しい解き方については, 教科書(水島二郎: 柳瀬眞一郎: 「理工学のための数値計算法」, 数理工学社, 2002.) を参照のこと。スプライン補間では, ラグランジュ補間やニュートン補間よりも多くの種類の関数を滑らかに補間できる。

第3章の問題

問題1

平面上に $n+1$ 個の点 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ が与えられており, $i \neq j$ のとき $x_i \neq x_j$ が成り立っているとす。このとき, これら $n+1$ 個の点を通る n 次関数 $y = a_n x^n + \dots + a_1 x + a_0$ がただ1つ存在することを, 次の手順により証明せよ。

- (1) 関数 $y = a_n x^n + \dots + a_1 x + a_0$ が $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$ を通るという条件は,

$$\mathbf{y}_n = V_n \mathbf{x}_n \quad (3.29)$$

と書けることを示せ。ただし,

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_n &= (x_0, x_1, \dots, x_n)^t \\ \mathbf{y}_n &= (y_0, y_1, \dots, y_n)^t \\ V_n &= \begin{pmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \dots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^n \end{pmatrix} \end{aligned}$$

とする。

- (2) V_n の行列式が

$$\begin{aligned} \det V_n &= \prod_{i < j} (x_j - x_i) \\ &= (x_n - x_0)(x_{n-1} - x_0) \cdots (x_3 - x_0)(x_2 - x_0)(x_1 - x_0) \\ &\times (x_n - x_1)(x_{n-1} - x_1) \cdots (x_3 - x_1)(x_2 - x_1) \\ &\times (x_n - x_2)(x_{n-1} - x_2) \cdots (x_3 - x_2) \\ &\quad \vdots \\ &\times (x_n - x_{n-1}) \end{aligned}$$

と書けることを数学的帰納法により示せ。ただし, $1 \leq i < j \leq n$ を満たす i, j が存在しないときは, $\prod_{i < j} (x_j - x_i) = 1$ と定義する。

(ヒント: $\det V_n$ において第 i 列から第 $i-1$ 列の x_i 倍を引くという操作を $i = n+1, n, \dots, 3, 2$ の順に施し, その結果を第1行に関して展開せよ。更に, 各行が共通因数を持つことに着目し, その因数を外にくくり出せ。)

- (3) 前小問の結果を使い, 問題の主張が成り立つことを証明せよ。

問題 2

- (1) $f(x) = \sin x$ を区間 $[0, 2\pi]$ で $n+1$ 個の点 $x_i = 2\pi i/n$ ($i = 0, \dots, n$) を使ってラグランジュ補間する。このとき、区間内における絶対誤差の上限を求めよ。
- (2) $f(x) = \exp x$ を区間 $[0, 1]$ で $n+1$ 個の点 $x_i = i/n$ ($i = 0, \dots, n$) を使ってラグランジュ補間する。このとき、区間内における絶対誤差の上限を求めよ。
- (3) 上記 (1), (2) のそれぞれにおいて、絶対誤差を 10^{-3} 以下にするには n をどのように定めればよいか。

問題 3

- (1) $n+1$ 個の点 $x_0 < x_1 < \dots, x_n$ とそこでの関数値 $y_i = f(x_i)$ ($i = 0, 1, \dots, n$) が与えられたとき、ニュートンの補間公式により区間 $[x_0, x_n]$ 内の任意の点 x における関数の近似値 $f(x)$ を求めるプログラムを作成せよ。
- (2) $f(x) = \exp x$, $x_i = i/n$ ($i = 0, 1, \dots, n$) とするとき、上記のプログラムを用い、 n を 2 から 10 まで変えて $\exp(1/\sqrt{2})$ の近似値を計算せよ。 n を増やすにつれて誤差がどのように変化するか調べよ。

問題 4

- (1) $f(x) = \sin x$ を区間 $[0, \pi]$ で 4 個の点 $x = 0, \pi/3, 2\pi/3, \pi$ を使ってスプライン補間する。このとき、3 つの区間 $[0, \pi/3]$, $[\pi/3, 2\pi/3]$, $[2\pi/3, \pi]$ それぞれにおける補間の関数形を求めよ。
- (2) 上記のスプライン補間を使って $x = \pi/6$ および $x = \pi/4$ における $\sin x$ の近似値を計算せよ。また、真の値との誤差を求めよ。

第4章 数値積分法

数値積分法は、解析的に積分できない関数の定積分を計算するために用いられる。本章では、まず関数のラグランジュ補間に基づく数値積分法である台形公式とシンプソン公式について学ぶ。次に、前章で導いたラグランジュ補間の誤差評価を利用し、これらの公式の誤差評価を行う。最後に、台形公式と変数変換を組み合わせることにより極めて高い精度を実現できる二重指数型数値積分公式について述べる。

4.1 台形公式

定積分 $I = \int_a^b f(x) dx$ の値を近似的に計算する方法として、標本点 $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ において関数 $f(x)$ の値を計算し、それを用いて区間 $[a, b]$ での補間多項式を求めて、これを解析的に積分する方法が考えられる。この考え方に基づいて得られる数値積分公式を補間型数値積分公式と呼ぶ。補間多項式は、 $n + 1$ 個の標本点すべてを用いてラグランジュ補間により n 次の多項式を求めてもよいが、そうすると $f(x)$ によっては Runge の現象のために精度のよい補間ができない場合がある。そこで、 $[a, b]$ を小区間に分け、各小区間でそれぞれラグランジュ補間を行う方式を考える。

この小区間として $[x_{i-1}, x_i]$ ($i = 1, 2, \dots, n$) を取り、各小区間において $f(x)$ を 1 次関数で補間するのが台形公式である。ラグランジュ補間の公式 (3.1), (3.3) より、区間 $[x_{i-1}, x_i]$ での補関数は

$$P_i(x) = \frac{x - x_i}{x_{i-1} - x_i} y_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} y_i \quad (4.1)$$

となる。これを積分することにより、この区間からの積分への寄与は

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1}}^{x_i} P_i(x) dx &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \left(\frac{x - x_i}{x_{i-1} - x_i} y_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} y_i \right) dx \\ &= \int_0^1 \{(1 - z)y_{i-1} + zy_i\} (x_i - x_{i-1}) dz \\ &= \frac{1}{2}(x_i - x_{i-1})(y_{i-1} + y_i) \end{aligned} \quad (4.2)$$

ただし、 $z = (x - x_{i-1}) / (x_i - x_{i-1})$ とおいた。

以下では特に標本点が等間隔の場合のみを考え、

$$x_i - x_{i-1} = \frac{b - a}{n} = h \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (4.3)$$

とする。すると、上の寄与は $\frac{1}{2}h(y_{i-1} + y_i)$ となり、積分 I の近似値はこれをすべての区間について足し合わせたものとして

$$\begin{aligned} I^{(1)} &= \sum_{i=1}^n \frac{1}{2}h(y_{i-1} + y_i) \\ &= \left(\frac{1}{2}y_0 + \sum_{i=1}^{n-1} y_i + \frac{1}{2}y_n \right) h \\ &= \left(\frac{1}{2}y_0 + \sum_{i=1}^{n-1} y_i + \frac{1}{2}y_n \right) \cdot \frac{b-a}{n} \end{aligned} \quad (4.4)$$

と計算される。

4.2 シンプソン公式

いま、 n が偶数とする。すると、小区間として $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ ($i = 1, 3, 5, \dots, n-1$) を取り、各小区間の3個の標本点での関数値 y_{i-1}, y_i, y_{i+1} を使って2次のラグランジュ補間を行うことができる。こうしてできる数値積分公式は、1次のラグランジュ補間に基づく台形公式より一般に精度が高いと期待される。

この場合、区間 $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ での補間関数は

$$\begin{aligned} P_i(x) &= \frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} y_{i-1} + \frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} y_i \\ &\quad + \frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)} y_{i+1} \end{aligned} \quad (4.5)$$

これを積分することにより、区間 $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ からの寄与は ($x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1} = h$ として)

$$\begin{aligned} &\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} P_i(x) dx \\ &= \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} \left\{ \frac{(x-x_i)(x-x_{i+1})}{(x_{i-1}-x_i)(x_{i-1}-x_{i+1})} y_{i-1} + \frac{(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})}{(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})} y_i \right. \\ &\quad \left. + \frac{(x-x_{i-1})(x-x_i)}{(x_{i+1}-x_{i-1})(x_{i+1}-x_i)} y_{i+1} \right\} dx \\ &= \int_{-1}^1 \left\{ \frac{hz \cdot h(z-1)}{2h^2} y_{i-1} + \frac{h(z+1) \cdot h(z-1)}{-h^2} y_i \right. \\ &\quad \left. + \frac{h(z+1) \cdot hz}{2h^2} y_{i+1} \right\} h dz \\ &= \left(\frac{1}{3}y_{i-1} + \frac{4}{3}y_i + \frac{1}{3}y_{i+1} \right) h \end{aligned} \quad (4.6)$$

ただし $z = (x - x_i)/h$ とおいた。

これをすべての区間について足し合わせるにより、積分 I の近似値は

$$\begin{aligned} I^{(2)} &= \left\{ \left(\frac{1}{3}y_0 + \frac{4}{3}y_1 + \frac{1}{3}y_2 \right) + \left(\frac{1}{3}y_2 + \frac{4}{3}y_3 + \frac{1}{3}y_4 \right) \right. \\ &\quad \left. + \cdots + \left(\frac{1}{3}y_{n-2} + \frac{4}{3}y_{n-1} + \frac{1}{3}y_n \right) \right\} h \\ &= \left\{ \frac{1}{3}y_0 + \frac{2}{3}(y_2 + y_4 + \cdots + y_{n-2}) \right. \\ &\quad \left. + \frac{4}{3}(y_1 + y_3 + \cdots + y_{n-1}) + \frac{1}{3}y_n \right\} h \end{aligned} \quad (4.7)$$

と計算できる。これをシンプソン公式と呼ぶ。