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

$$x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_n \tag{3.12}$$

とし，点 $x_{n+1} \in [x_0, x_n]$，$x_{n+1} \neq x_i\,(i = 0, 1, \ldots, n)$ 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

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

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

$$g(x_i) = 0 \quad (i = 0, 1, \ldots, n, n+1) \tag{3.14}$$

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 となるとき，$g^{(n+1)}(x)$ 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，

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

となり，$x = \xi$ を代入して

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

これを (3.13) 式に代入して $x = x_{n+1}$ とすると，

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

したがって，

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

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

ここで，最後の式の導出には $|x_{n+1} - x_i| \leq |x_n - x_0|$（$i = 0, 1, \ldots, n$）を用いた。補間の性質より，$x_{n+1} = x_i$（$i = 0, 1, \ldots, n$）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 $f^{(n)}(x)$ の増加の度合いが小さければ，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 $[x_{i-1}, x_i]$（$i = 1, 2, \ldots, n$）で補間関数が３次関数

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

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 $x_0, x_1, \ldots, x_n$ での関数値を $y_0, y_1, \ldots, y_n$ 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

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

より

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

（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

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

より

$$C_{2,i-1} + 2C_{3,i-1}\Delta x_i + 3C_{2,i-1}\Delta x_i^2 = C_{2,i} \quad (i = 2, 3, \ldots, n) \tag{3.24}$$

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

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

より

$$2C_{3,i-1} + 6C_{2,i-1}\Delta x_i = 2C_{3,i} \quad (i = 2, 3, \ldots, n) \tag{3.26}$$

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

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

より

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

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 $C_{1,i}, C_{2,i}, C_{3,i}, C_{4,i}$（$i = 1, 2, \ldots, n$）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 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_n = b$ 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 $[x_{i-1}, x_i]$ （$i = 1, 2, \ldots, n$） 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 $[x_{i-1}, x_i]$ での補間関数は

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

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

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

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，

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

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

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

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 $[x_{i-1}, x_{i+1}]$ ($i = 1, 3, 5, \ldots, n-1$）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

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

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）

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

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ことにより，積分 I の近似値は

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

と計算できる。これを**シンプソン公式**と呼ぶ。

4.3 台形公式とシンプソン公式の誤差

（第５回の授業へ）

4.4 二重指数型数値積分公式

（第５回の授業へ）