学術フロンティア講義 (S セメスター) 近似を厳密に考える

1. 積分の値を求めること

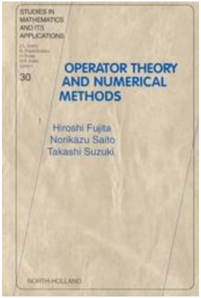
齊藤　宣一 (さいとう　のりかず)
数理科学研究科 norikazu@ms.u-tokyo.ac.jp

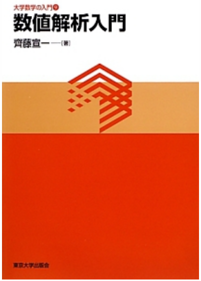
2019 年 6 月 6 日 (木) 5 限 521 教室

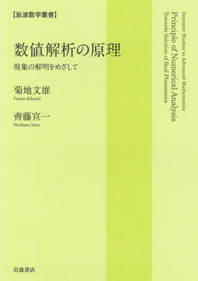
Graduate School of Mathematical Sciences
THE UNIVERSITY OF TOKYO

担当者

- 齊藤 宣一（さいとう のりかず） `http://www.infsup.jp/saito/`
- 数理科学研究科　　`norikazu@ms.u-tokyo.ac.jp`
- 専門：数値解析（という，解析学・応用数学の一分野）







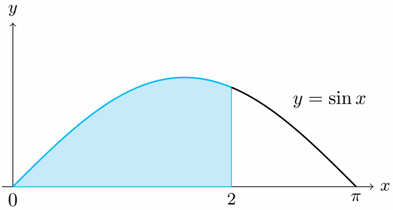
- H. Fujita, N. Saito and T. Suzuki: *Operator Theory and Numerical Methods* Elsevier, 2001
- 齊藤宣一「数値解析入門」東京大学出版会，2012 年 10 月　3,150 円
- 菊地文雄，齊藤宣一「数値解析の原理—現象の解明をめざして」岩波書店，2016 年　6,800 円
- 齊藤宣一「数値解析」共立出版，2017 年　2,500 円

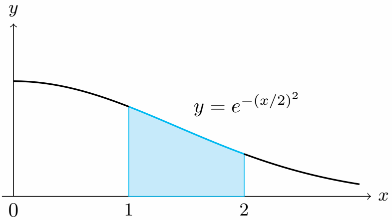
今後の予定

- 6 月 6 日 (齊藤宣一)　1. 積分の値を求めること
- 6 月 13 日 (河澄響矢)
- 6 月 20 日 (河澄響矢)
- 6 月 27 日 (齊藤宣一)　2. 方程式の解を求めること
- 7 月 4 日 (齊藤宣一)　3. シミュレーションと多角形の形

定積分の値

$$Q_1 = \int_0^2 \sin x \; dx, \qquad Q_2 = \int_1^2 e^{-(x/2)^2} \; dx.$$





$$Q_1 = [-\cos x]_{x=0}^{x=2} = 1 - \cos 2 = 1.416146836547142 \cdots$$

$$Q_2 = \cdots$$

そもそも，定積分とは何か?

$$Q(f) = \int_a^b f(x)\ dx \qquad ([a,b]\ \text{は有界閉区間})$$

- 区間 $[a,b]$ に $n+1$ 個の点 $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$ をとる．
- 小区間 $[x_{j-1}, x_j]$ の代表点 ξ_j を選び，次の和 (リーマン和) を考える．

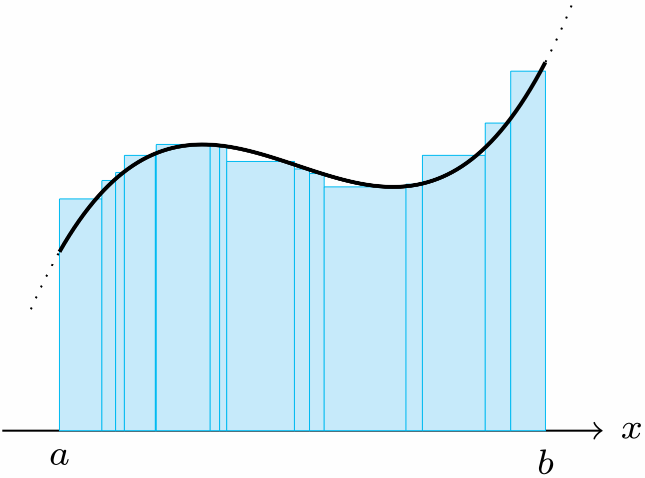
$$R_n = \sum_{j=1}^{n} f(\xi_j) h_j \qquad (h_j = x_j - x_{j-1}).$$

$\forall\{x_1, x_2, \ldots, x_{n-1}\}$，$\forall\{\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_n\}$ に対して，$n \to \infty$ かつ $h = \max_{1 \le j \le n} |h_j| \to 0$ とした際に，R_n が一定の極限値に収束するとき，$f(x)$ は $[a,b]$ で可積分 (リーマン可積分) であるといい，次のように定義する：

$$\int_a^b f(x)\ dx \stackrel{\text{def.}}{=} \lim_{n\to\infty, h\to 0} R_n.$$

例えば，$f(x)$ が連続関数であれば，これは可積分であることが知られている．

リーマン和の例



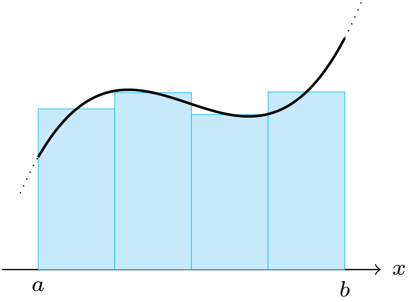
複合中点公式

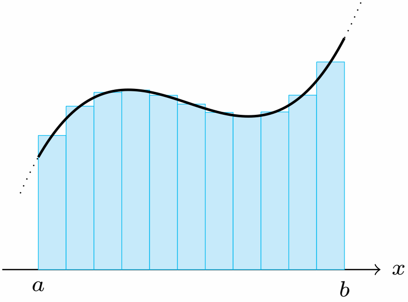
以下では，$h = \dfrac{b-a}{n}$ とおき，次の様にする：

$$x_1 = a + h, \quad x_2 = a + 2h, \quad \ldots \quad , \quad x_{n-1} = a + (n-1)h$$

複合中点公式

$$R_h(f) = \sum_{j=1}^{n} f(x_{j-\frac{1}{2}})h \qquad \left(x_{j-\frac{1}{2}} = \frac{x_{j-1} + x_j}{2} \right)$$

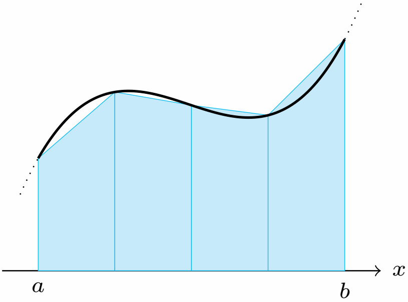


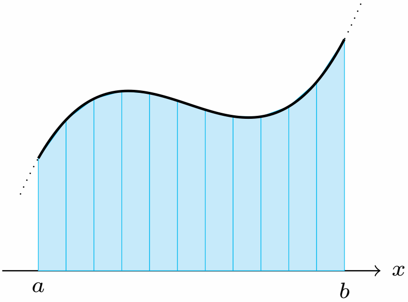


複合台形公式

複合台形公式

$$T_h(f) = \sum_{j=1}^{n} \frac{f(x_{j-1}) + f(x_j)}{2} h$$





計算例

誤差　$a = 0,\ b = 2,\ f(x) = \sin x$

$$\mathcal{E}_h^R = |Q_1 - R_h(f)|, \qquad \mathcal{E}_h^T = |Q_1 - T_h(f)|$$

h	$R_h(f)$	$\mathcal{E}_h^R$
0.2	1.418509837800	$2.36 \cdot 10^{-3}$
0.1	1.416737069876	$5.90 \cdot 10^{-4}$
0.05	1.416294362600	$1.48 \cdot 10^{-4}$
0.025	1.416183716043	$3.69 \cdot 10^{-5}$
0.0125	1.416156056295	$9.22 \cdot 10^{-6}$

h	$T_h(f)$	$\mathcal{E}_h^T$
0.2	1.411423197099	$4.72364 \cdot 10^{-3}$
0.1	1.414966517449	$1.18032 \cdot 10^{-3}$
0.05	1.415851793663	$2.95043 \cdot 10^{-4}$
0.025	1.416073078131	$7.37584 \cdot 10^{-5}$
0.0125	1.416128397087	$1.84395 \cdot 10^{-5}$

2 次関数で近似？

一般的に，$(a, f(a))$，$(c, f(c))$，$(b, f(b))$ の三点を通る二次関数 $p(x)$ を考えると，次の様になる：

$$\int_a^b p(x)\ dx = [f(a) + 4f(c) + f(b)]\,\frac{b-a}{6}.$$

実際，$x_0 = a$, $x_1 = c$, $x_2 = b$ とおくと，

$$p(x) = f(x_0)L_0(x) + f(x_1)L_1(x) + f(x_2)L_2(x)$$

と表現できる．ただし，

$$L_0(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}, \quad L_1(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_0)}{(x_1-x_2)(x_1-x_0)},$$
$$L_2(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

複合シンプソン (Simpson) 公式

複合シンプソン (Simpson) 公式

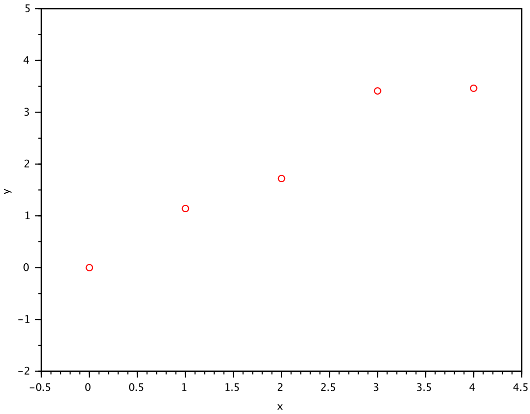
$$S_h(f) = \sum_{j=1}^{n} \frac{f(x_{j-1}) + 4f(x_{j-\frac{1}{2}}) + f(x_j)}{6} h$$

h	$S_h(f)$	$\mathcal{E}_h^S$
0.2	1.416147624233	$7.87686 \cdot 10^{-7}$
0.1	1.416146885734	$4.91864 \cdot 10^{-8}$
0.05	1.416146839621	$3.07346 \cdot 10^{-9}$
0.025	1.416146836739	$1.92081 \cdot 10^{-10}$
0.0125	1.416146836559	$1.20057 \cdot 10^{-11}$

$$\mathcal{E}_h^S = |Q_1 - S_h(f)| \qquad (a = 0, b = 2, f(x) = \sin x)$$

高次の多項式を使った関数の近似

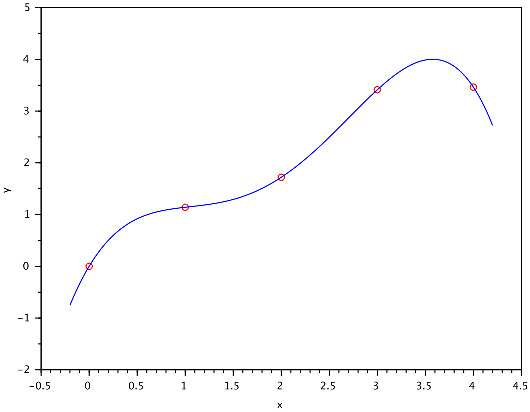
目標: 平面上の点を多項式で補間する



この 5 **点を厳密に通る多項式** $p(x) = ?$

高次の多項式を使った関数の近似

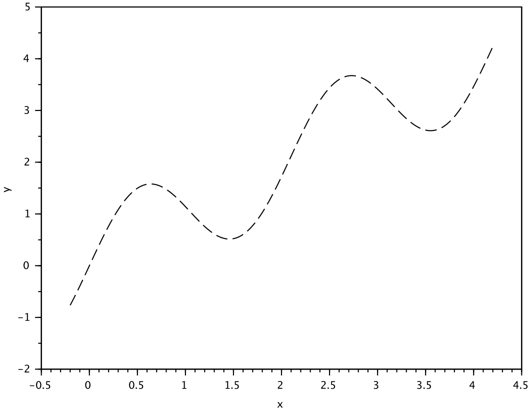
目標: 平面上の点を多項式で補間する



このような 4 **次多項式**

高次の多項式を使った関数の近似

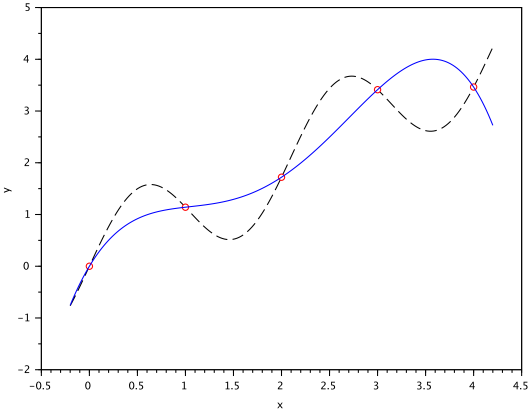
目標: 平面上の点を多項式で補間する



曲線 $y = x + \sin 3x$ を**よく近似する**多項式

高次の多項式を使った関数の近似

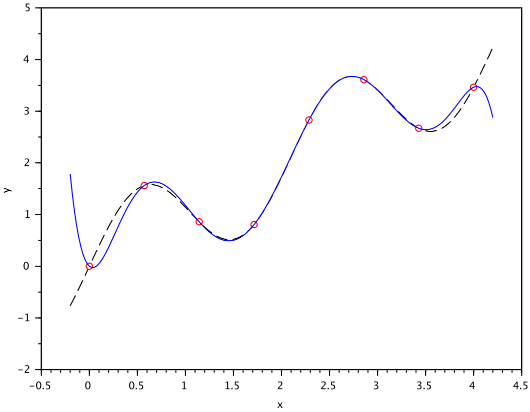
目標: 平面上の点を多項式で補間する



曲線 $y = x + \sin 3x$ 上にデータを 5 個取り，4 次多項式で近似 (**先ほどと同じもの**)

高次の多項式を使った関数の近似

目標: 平面上の点を多項式で補間する



データの数を増やして 8 個とすると，7 次多項式で近似できる．

Lagrange 補間多項式

定義

- $x_0, x_1, \ldots, x_n \; (x_i \neq x_j)$　補間点 (標本点)

- 補間データ (x_i, y_i) に対する n 次の Lagrange 補間多項式 $p_n(x)$

$$\overset{\text{def.}}{\Longleftrightarrow} \quad p_n(x):\ n \text{ 次多項式，}\ p_n(x_i) = y_i \ (0 \leq i \leq n).$$

- 関数 $f(x)$ の補間点 $\{x_i\}$ に関する n 次の Lagrange 補間多項式 $p_n(x)$

$$\overset{\text{def.}}{\Longleftrightarrow} \quad p_n(x):\ n \text{ 次多項式，}\ p_n(x_i) = f(x_i) \ (0 \leq i \leq n).$$

注意

このような多項式は，存在するとすれば唯一.

Lagrange 補間多項式

Lagrange の表現

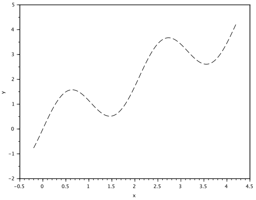
$$p_n(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i L_i(x) \quad \text{or} \quad \sum_{i=0}^{n} f(x_i) L_i(x).$$

ただし，

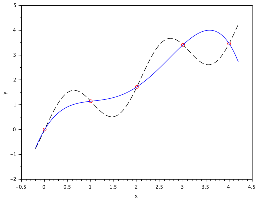
$$L_i(x) = \prod_{k=0, k\neq i}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k} \quad (n\ \text{次多項式}).$$

しかし，ここまでの議論では，**標本点 $x_0, \ldots, x_n$ をどう選ぶか？**については，何も述べていない．

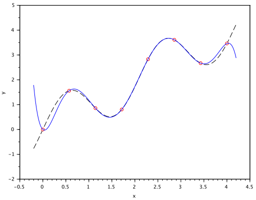
例 1



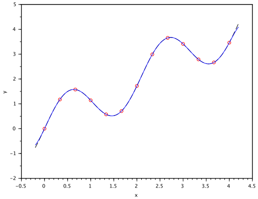
$y = x + \sin 3x \ (0 \leq x \leq 4)$



$n = 4$



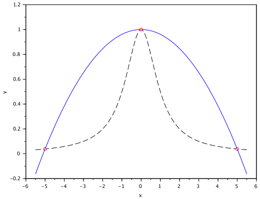
$n = 7$



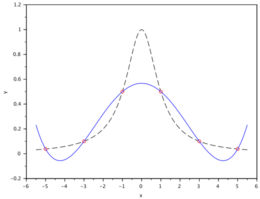
$n = 12$

等間隔補間点 $x_j = \dfrac{4j}{n} \ (j = 0, \ldots, n)$ **をとって，** $y = x + \sin 3x$ **の** Lagrange **多項式補間** $p_n(x)$ **を求める．**

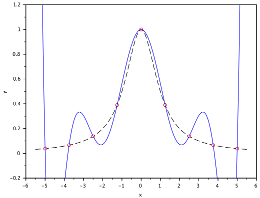
例 2



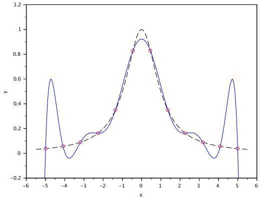
$n = 2$ (Err=0.6462159)



$n = 5$ (Err=0.4326923)



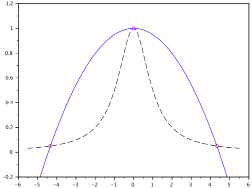
$n = 8$ (Err=7.7847756)



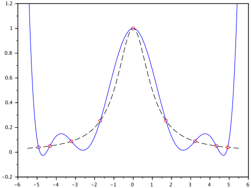
$n = 11$ (Err=8.9600036)

等間隔補間点 $x_j = -5 + \frac{10}{n} j \ (j = 0, \ldots, n)$ **をとって，** $y = \frac{1}{1+x^2}$ **の** Lagrange **多項式補間** $p_n(x)$ **を求める．** Err$= \max_{|x|\leq 5} |f(x) - p_n(x)|$.

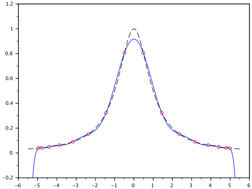
例 3



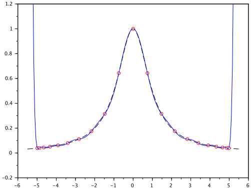
$n = 2$



$n = 8$



$n = 15$



$n = 20$

補間点 $x_j = 5\cos\dfrac{(j+\frac{1}{2})\pi}{n+1}$ $(j = 0, \dots, n)$ **を使う.**

内積

有界な開区間 (a,b) 上の連続関数で $w(x)>0\ (a<x<b)$, $\int_a^b w(x)\ dx<\infty$ を満たすものを取り,

$$(f,g)_w=\int_a^b f(x)g(x)w(x)\ dx$$

と定義する.

命題

$(f,g)_w$ は $X=C[a,b]$ に内積を定める．すなわち，次が成り立つ．

(1) 正値性．$(f,f)_w\geq 0\quad (f\in X)$ かつ $(f,f)_w=0$ となるのは $f\equiv 0$ のときのみ.

(2) 対称性．$(f,g)_w=(g,f)_w\quad (f,g\in X)$

(3) 線形性．$(f+g,h)_w=(f,h)_w+(g,h)_w\quad (f,g,h\in X)$, $(\alpha f,h)_w=\alpha(f,h)_w\quad (f,g\in X,\ \alpha\in\mathbb{R})$.

直交多項式系

定義 (直交性)

$f, g \in C^0[a,b]$ に対して，$(f,g)_w = 0$ が成り立つとき，f と g は (密度関数 w に対して) 直交すると言う.

定義 (直交多項式系)

多項式の列 $\{\phi_n\}_{n\geq 0}$ が (密度関数 w に対する) 直交多項式系であるとは，各 ϕ_n が n 次の多項式であり，$(\phi_n, \phi_m)_w = 0$ $(n \neq m)$ かつ $(\phi_n, \phi_n)_w > 0$ が成り立つこと．ただし，ϕ_0 は非零の定数関数とする.

以下しばらく，$\{\phi_n\}_{n\geq 0}$ を (密度関数 w に対する) 直交多項式系としよう (**これは必ず存在する**).

命題 A

任意の n 次多項式は $\{\phi_k\}_{k=0}^{n}$ の一次結合で表現できる.

命題 B

$k < n$ かつ $q(x)$ が k 次の多項式ならば，$(\phi_n, q)_w = 0$.

命題 C

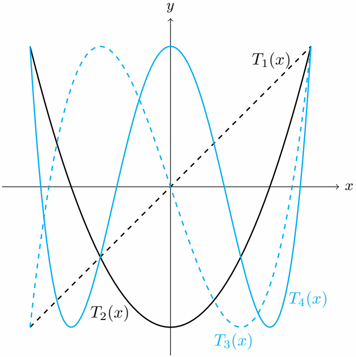
$n \geq 1$ に対して，方程式 $\phi_n(x) = 0$ は (a, b) 内に相異なる n 個の根を持つ.

例 4．チェビシェフ (Chebyshev) 多項式

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x) \qquad (-1 \le x \le x)$$

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

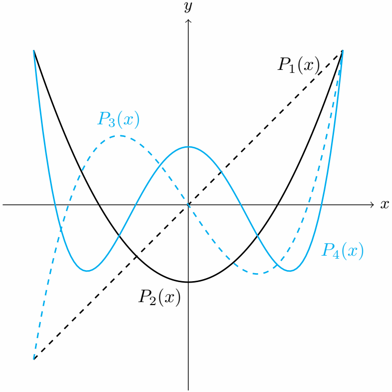
$$\int_{-1}^{1} \frac{T_n(x)\,T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx = \begin{cases} 0 & (n \neq m) \\ \pi/2 & (n = m \neq 0), \quad \pi \ (n = m = 0). \end{cases}$$



例 5. ルジャンドル (Legendre) 多項式

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n}(x^2 - 1)^n \qquad (-1 \leq x \leq 1)$$

$$\int_{-1}^{1} P_n(x) P_m(x)\ dx = \begin{cases} 0 & (n \neq m) \\ \frac{2}{2n+1} & (n = m). \end{cases}$$



例 6. ラゲール (Laguerre) 多項式

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}(e^{-x}x^n) \qquad (0 \le x < \infty)$$

$$\int_0^\infty L_n(x)L_m(x)e^{-x}\,dx = \begin{cases} 0 & (n \neq m) \\ 1 & (n = m). \end{cases}$$

例 7. エルミート多項式

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2} \qquad (-\infty < x < \infty)$$

$$\int_{-\infty}^\infty H_n(x)H_m(x)e^{-x^2}\,dx = \begin{cases} 0 & (n \neq m) \\ \sqrt{\pi}\,2^n n! & (n = m). \end{cases}$$

再度，積分の話に戻る

開区間 (a, b) 上で定義された連続関数 $w(x)$ で，

$$w(x) > 0 \quad (a < x < b), \qquad \int_a^b w(x)\ dx < \infty$$

を満たすものを取り，これを密度関数と呼ぶ．重み付きの定積分

$$Q_w(f) = \int_a^b f(x)w(x)\ dx$$

の近似解法を考察する．以下，特に断りがなければ，$f \in C[a, b]$ としている．

Gauss 型積分公式

定義 (Gauss 型積分公式): $n \geq 1$ とする.

$$Q^{\mathrm{G}}_{w,n}(f) = \sum_{i=0}^{n} W_i f(x_i), \qquad W_i = \int_a^b w(x) L_i(x)\ dx \quad (0 \leq i \leq n).$$

ここで,

- $\{\phi_k\}_{k \geq 0}$ は, $w(x)$ に対する直交多項式系.
- $a < x_0 < x_1 < \cdots < x_n < b$ は $\phi_{n+1}(x) = 0$ の根
- 命題 A により, このような $n+1$ 個の点の存在は保証されている.
- $p_n(x)$ を $x_0, \ldots, x_n$ に関する $f(x)$ の n 次 Lagrange 補間多項式として,

$$Q^{\mathrm{G}}_{w,n}(f) \overset{\text{def.}}{=} \int_a^b p_n(x)\ dx$$

とすることで, 公式を導いている.

性質

定理 I

$q(x)$ を $2n+1$ 次 (以下) の多項式とすると，$Q_{w,n}^{\mathrm{G}}(q) = Q_w(q)$ が成り立つ．
これを，$Q_{w,n}^{\mathrm{G}}$ は $2n+1$ 次精度 の公式であると言う．

- $Q_{w,n}^{\mathrm{G}}$ は，n 次多項式近似に基づいた方法であるにも関わらず，$2n+1$ 次の多項式の積分値を厳密に計算できる．これは，驚くべき性質である．
- $R_h(f)$, $T_h(f)$ は，n をいくら大きくしても，1 次精度の公式である．$S_h(f)$ は，n をいくら大きくしても，3 次精度の公式である．

定理 II

$W_i > 0 \quad (0 \leq i \leq n)$.

定理 III

$\lim_{n\to\infty} Q_{w,n}^{\mathrm{G}}(f) = Q_w(f)$.

例 8

重み関数 $w(x) = (1 - x^2)^{-1/2}$ **に関する重み付き積分**

$$\int_{-1}^{1} \frac{f(x)}{\sqrt{1 - x^2}}\, dx$$

の近似値を計算するための， Chebyshev **多項式を用いた** Gauss **型積分公式** (Gauss–Chebyshev **積分公式**) **は,**

$$Q_n^{\mathrm{GC}}(f) = \sum_{i=0}^{n} W_i f(x_i),$$

$$x_i = \cos \frac{\left(i + \frac{1}{2}\right)\pi}{n+1}, \quad W_i = \frac{\pi}{n+1} \quad (i = 0, \ldots, n)$$

となる.

例 9

$[a, b] = [-1, 1]$, $w(x) = 1$ とする．Legendre 多項式 $P_{n+1}(x)$ の零点 $-1 < x_0 < x_1 < \cdots < x_n < 1$ を用いた Gauss 型積分公式

$$G_n^{\mathrm{L}}(f) = \sum_{i=0}^{n} W_i f(x_i), \qquad W_i = \int_{-1}^{1} L_i(x)\ dx \quad (i = 0, 1, \ldots, n)$$

を Gauss–Legendre 積分公式と呼ぶ．

i	x_i	W_i
0	0.932469514203	0.171324492379
1	0.661209386466	0.360761573048
2	0.238619186083	0.467913934573

$n = 5$

i	x_i	W_i
0	0.949107912343	0.129484966169
1	0.741531185599	0.279705391489
2	0.405845151377	0.381830050505
3	0.0	0.417959183673

$n = 6$

Table: ガウス・ルジャンドル積分公式 $G_n^{\mathrm{L}}(f)$ の標本点 x_i と係数 W_i．

疑問と次のテーマ

良い公式だが，$\{x_i\}$ と $\{W_i\}$ をどうやって計算するか？

方程式の解を求めるための系統的な方法を考察する必要がある

$\rightarrow$ 次回 (6 月 27 日)　“2. 方程式の解を求めること” へ続く