数値計算

No. 1

2019

補間

未知関数 $f(x)$.

点 $x_1, x_2, \cdots, x_N$ における値 $f(x_1), f(x_2), \cdots, f(x_N)$ はわかっている

↓

$f_N(x_i) = f(x_i)$ $(i=1, \cdots, N)$ なる簡単な関数 $f_N(x)$ を用いて、

$f(x) \approx f_N(x)$ と関数近似する。 … 補間 (interpolation)

$f_N(x)$ が $\underbrace{\text{多項式}}$ (高々 $N-1$ 次の) の場合 … Lagrange 補間

点 $x_1, x_2, \cdots, x_N$ … 標本点。

命題 $x_i \neq x_j$ $(i \neq j)$ とすると、$f_N(x_i) = f(x_i)$ $(i=1,2,\cdots,N)$ なる高々 $N-1$ 次の多項式 $f_N(x)$ は唯一つ存在する。 □

(証明) $f_N(x) = c_0 + c_1 x + \cdots + c_{N-1} x^{N-1}$ とおくと、$c_0, c_1, \cdots, c_{N-1}$ は次の連立一次方程式から定まる:

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{N-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{N-1} \\ 1 & x_3 & x_3^2 & \cdots & x_3^{N-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_N & x_N^2 & \cdots & x_N^{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ f(x_3) \\ \vdots \\ f(x_N) \end{bmatrix}. \quad \text{—①}$$

係数行列は Vandermonde 行列であり、その行列式は $\prod_{i>j} (x_i - x_j) \neq 0$ であるから、正則行列である。ゆえに、$c_0, c_1, \cdots, c_{N-1}$ は ① から唯一通りに定まる。 ⊠

Vandermonde 行列は悪条件なので、連立一次方程式 ① を解いて係数 $c_0, c_1, \cdots, c_{N-1}$ を求める方法は実用的ではない。

Lagrange 補間公式

$$f(x) \approx f_N(x) = \sum_{i=1}^{N} f(x_i) L_i^{(m)}(x) \quad \text{—②}$$

ここで

$$L_i^{(m)}(x) = \frac{W_m(x)}{W_m'(x_i)(x-x_i)} = \frac{(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_m)}{(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_m)},$$

$$W_m(x) = \prod_{k=1}^{m}(x-x_k) \quad (i=1,2,\cdots,m)$$

$$L_i^{(n)}(x_j)=\delta_{ij}=\begin{cases}1 & (i=j)\\ 0 & (i\neq j)\end{cases}$$

なので、$f_N(x_i)=f(x_i)$ $(i=1,\cdots,N)$ が成り立つことがわかる。
また、② 右辺は明らかに高々 $N-1$ 次の多項式である。
ゆえに、② 右辺は $f(x)$ に対する標本点 $x_1,\cdots,x_N$ の Lagrange 補間である。

実用的な補間法 … 反復補間法 (iterated interpolation method)

差分商 (divided difference) $f_j(x_1,x_2,\cdots,x_{j-1},x_i\,;x)$ を次で定義する：

$$f_1(x_i\,;x)=f(x_i) \qquad (i=1,2,\cdots,N)$$

$j=2,\cdots,N$ に対して、

$$\begin{aligned}&f_j(x_1,x_2,\cdots,x_{j-1},x_i\,;x)\\ &=\frac{1}{x_i-x_{j-1}}\{(x_i-x)f_{j-1}(x_1,x_2,\cdots,x_{j-2},x_{j-1}\,;x)\\ &\qquad -(x_{j-1}-x)f_{j-1}(x_1,x_2,\cdots,x_{j-2},x_i\,;x)\} \quad (i=j,j+1,\cdots,N).\end{aligned}$$

上で定義された差分商は

$$f_j(x_1,x_2,\cdots,x_{j-1},x_i\,;x_\ell)=f(x_\ell) \qquad (\ell=1,2,\cdots,j-1,i)$$

をみたす。

∵ j についての数学的帰納法で示す。
$j=1$ のときは自明。$j-1$ の場合に成立すると仮定して、j の場合に成立することを示す。帰納的仮定より

$$f_{j-1}(x_1,x_2,\cdots,x_{j-2},x_{j-1}\,;x_\ell)=f(x_\ell) \qquad (\ell=1,2,\cdots,j-2,j-1),$$

$$f_{j-1}(x_1,x_2,\cdots,x_{j-2},x_i\,;x_\ell)=f(x_\ell) \qquad (\ell=1,2,\cdots,j-2,i)$$

が成立するので、$\ell=1,2,\cdots,j-2$ に対し

$$\begin{aligned}&f_j(x_1,x_2,\cdots,x_{j-1},x_i\,;x_\ell)\\ &=\frac{1}{x_i-x_{j-1}}\{(x_i-x_\ell)f(x_\ell)-(x_{j-1}-x_\ell)f(x_\ell)\}=f(x_\ell).\end{aligned}$$

また、$f_j(x_1,\cdots,x_{j-1},x_i\,;x_{j-1})=f(x_{j-1})$、$f_j(x_1,\cdots,x_{j-1},x_i\,;x_i)=f(x_i)$ もすぐわかる。ゆえに、j の場合も成立することがわかる。 ⊠

次の表のように差分商を計算していく：

$$
\begin{array}{llllll}
x_1 & x_1 - x & f_1(x_1;x) & & & \\
x_2 & x_2 - x & f_1(x_2;x) & \to f_2(x_1,x_2;x) & & \\
x_3 & x_3 - x & f_1(x_3;x) & \to f_2(x_1,x_3;x) & \to f_3(x_1,x_2,x_3;x) & \\
x_4 & x_4 - x & f_1(x_4;x) & \to f_2(x_1,x_4;x) & \to f_3(x_1,x_2,x_4;x) & \ddots \\
x_5 & x_5 - x & f_1(x_5;x) & \to f_2(x_1,x_5;x) & \to f_3(x_1,x_2,x_5;x) & \cdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots &
\end{array}
$$

標本点 x_i の数を増しながら差分商を計算してゆき，十分近似が良くなったと判断したら $f_j(x_1, x_2, \cdots, x_j; x)$ を差分近似値として返す．

$i = 1, 2, \cdots, n$ に対して

$f_1(x_i; x) = f(x_i)$;

$j = 2, \cdots, i$ に対して

$$f_j(x_1, \cdots, x_{j-1}, x_i; x) = \frac{(x_i - x) f_{j-1}(x_1, \cdots, x_{j-2}, x_{j-1}; x) - (x_{j-1} - x) f_{j-1}(x_1, \cdots, x_{j-2}, x_i; x)}{x_i - x_{j-1}};$$

標本点 x_i を増しながら差分商を計算してゆく．

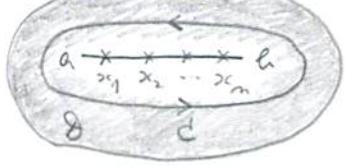
実際の計算では，標本点 x_i を x に近い方から順に並べ直す．

複素関数論を用いた補間誤差評価

$\begin{cases} \text{なめらかな関数, 解析関数 … 精度が良い} \\ \text{不連続な関数, 特異点をもつ関数 … 精度が悪い} \end{cases}$

命題　$f(x)$ $(a \leq x \leq b)$ に対する n 点補間（標本点 $a \leq x_1 \leq \cdots \leq x_n \leq b$）を考える. $f(x)$ が閉区間 $[a, b]$ を含む領域 $\mathcal{D}$ で正則ならば,

$$f(x) - f_n(x) = \frac{W_n(x)}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)\,dz}{(z-x)W_n(z)} \quad (a \leq {}^\forall x \leq b)$$



が成り立つ. ここで,

$$W_n(x) = \prod_{i=1}^{n} (x - x_i),$$

C : $\mathcal{D}$ に含まれ $[a, b]$ を正の向きに囲む閉積分路

である. □

（∵ 留数定理を用いて簡単に証明できる. ⊠）

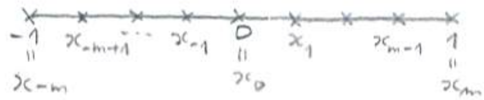
右辺の複素積分の大きさを評価することにより, 補間誤差評価ができる.

* 以下, $[a, b] = [-1, 1]$ とする.

関数 $f(x)$ の最大値ノルム　$\|g\| \equiv \sup_{-1 \leq x \leq 1} |g(x)|$.

＜等間隔標本点の Lagrange 補間＞

$x_i = ih$ $\left(i = -m, -m+1, \ldots, m;\ h = \frac{1}{m}\right)$（標本点数 $n = 2m+1$）



定理　$f(z)$ が複素平面 $\mathbb{C}$ 内の閉曲線

$$A(\rho) = \left\{ z \in \mathbb{C} \;\middle|\; \left| \frac{(z+1)^{z+1}}{(z-1)^{z-1}} \right| = (2\rho)^2 \right\} \quad (\rho > 1),$$

およびその内部を含む領域で正則ならば, 等間隔標本点の Lagrange 補間 f_n に対して

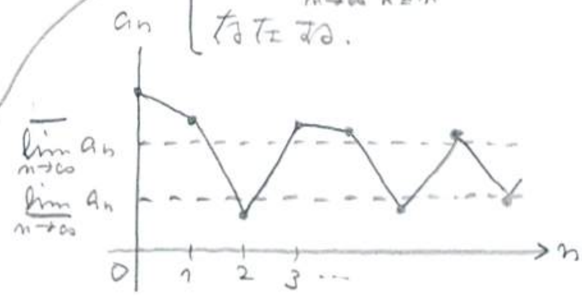
$$\overline{\lim_{n\to\infty}} \|f - f_n\|^{1/n} \leq \rho^{-1}$$

が成り立つ. □

つまり，n が十分大きければ

$$\|f-f_n\| \simeq \rho^{-n} \to 0 \quad (n\to\infty).$$

$\{\sup_{k\ge n} a_k\}_n$ は単調減少であるから，($-\infty$ を含めれば) 極限 $\lim_{n\to\infty}\sup_{k\ge n} a_k$ が存在する.



* 実数列 $\{a_n\}$ の上極限・下極限

上極限 $\overline{\lim}_{n\to\infty} a_n \equiv \lim_{n\to\infty}\sup_{k\ge n} a_k$,

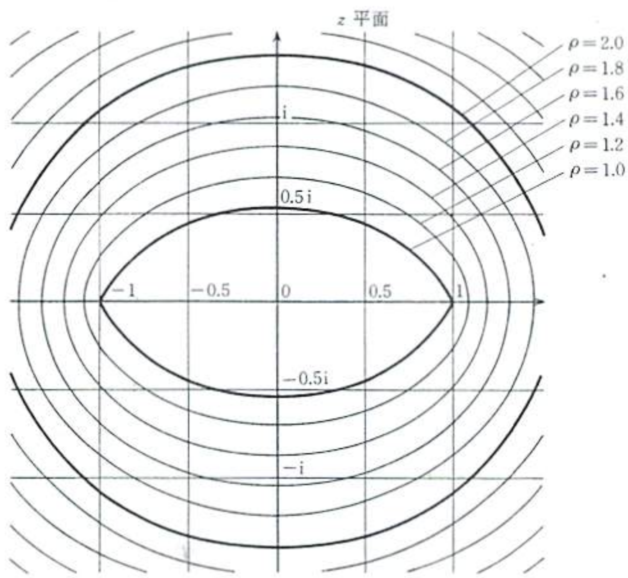
下極限 $\underline{\lim}_{n\to\infty} a_n \equiv \lim_{n\to\infty}\inf_{k\ge n} a_k$.

- $\limsup_{n\to\infty} a_n = \overline{\lim}_{n\to\infty} a_n$, $\liminf_{n\to\infty} a_n = \underline{\lim}_{n\to\infty} a_n$ と書くこともある.

- $\alpha_1 = \overline{\lim}_{n\to\infty} a_n \iff$ 任意の $\varepsilon>0$ に対しある $n_0\in\mathbb{N}$ が存在して
$$\begin{cases} a_n \le \alpha_1+\varepsilon & (\forall n\ge n_0) \\ \text{無限個の } n \text{ に対し } a_n \ge \alpha_1-\varepsilon. \end{cases}$$

$\alpha_2 = \underline{\lim}_{n\to\infty} a_n \iff$ 任意の $\varepsilon>0$ に対しある $n_0\in\mathbb{N}$ が存在して
$$\begin{cases} a_n \ge \alpha_2-\varepsilon & (\forall n\ge n_0) \\ \text{無限個の } n \text{ に対し } a_n \le \alpha_2+\varepsilon. \end{cases}$$

- 極限 $\lim_{n\to\infty} a_n$ が存在するならば $\lim_{n\to\infty} a_n = \overline{\lim}_{n\to\infty} a_n = \underline{\lim}_{n\to\infty} a_n$.



等間隔点補間に関する複素領域 $\mathcal{A}(\rho)$

杉原正顯・室田一雄「数値計算法の数理」(岩波書店，1994年)より

(定理の証明)

1° <u>補題</u> $W_m(x) = \prod_{j=-m}^{m}(x - jh)$ に関して.

$$\|W_m\| \le (2m)!\, m^{-2m-1} \simeq \sqrt{\frac{4\pi}{m}}\left(\frac{2}{e}\right)^{2m}$$

∵ $lh \le x \le (l+1)h$ $(-m \le l \le m-1)$ であるとすると.

$$|W_m(x)| = \prod_{j=-m}^{m}|x-jh| \le \prod_{j=-m}^{l}|(l+1)h - jh| \cdot \prod_{j=l+1}^{m}|jh - lh|$$

$$= m^{-2m-1}\prod_{j=-m}^{l}(l+1-j)\prod_{j=l+1}^{m}(j-l)$$

$$= m^{-2m-1}(l+m+1)!\,(m-l)! \qquad m-l+l-m$$

$$= m^{-2m-1}(l+m+1)!\,2\cdot 3\cdots(m-l)$$

$$\le m^{-2m-1}(l+m+1)!\,(l+m+2)(l+m+3)\cdots(2m)$$

$$= m^{-2m-1}(2m)!$$

漸近評価は Stirling の公式

$$n! \simeq \sqrt{2\pi n}\left(\frac{n}{e}\right)^n$$

による.

$$m^{-2m-1}(2m)! \simeq m^{-2m-1}\sqrt{4\pi m}\left(\frac{2m}{e}\right)^{2m} = \sqrt{\frac{4\pi}{m}}\left(\frac{2}{e}\right)^{2m}.$$ ⊠

2° 定理の証明に戻る. $z \in A(\rho)$ に対し

$$\lim_{m\to\infty}\frac{1}{m}\log|W_m(z)| = \lim_{m\to\infty}\frac{1}{m}\sum_{j=-m}^{m}\log\left|z-\frac{j}{m}\right|$$

$$= \int_{-1}^{1}\log|z-\xi|\,d\xi = \mathrm{Re}\left\{\int_{-1}^{1}\log(z-\xi)\,d\xi\right\}$$

$$= \mathrm{Re}\left\{\Big[-(z-\xi)\log(z-\xi)+(z-\xi)\Big]_{\xi=-1}^{1}\right\}$$

$$= \mathrm{Re}\left\{\log\frac{(z+1)^{z+1}}{(z-1)^{z-1}} - 2\right\}$$

$$= \log\left|\frac{(z+1)^{z+1}}{(z-1)^{z-1}}\right| - 2 = 2\log\left(\frac{2\rho}{e}\right).$$

$$\therefore \quad \lim_{m\to\infty}|W_m(x)|^{1/m} = \left(\frac{2\rho}{e}\right)^2.$$

これより，任意の $\varepsilon>0$ に対し m を十分大きくとれば，

$$|f(x)-f_m(x)| \leqq \frac{\|W_m\|}{2\pi}\oint_{A(\rho)} \frac{|f(z)|}{|z-x|\,|W_m(z)|}|dz|$$

$$\leqq \frac{1}{2\pi}\frac{[A(\rho)\text{の周長}]}{\min_{z,x}|z-x|}\frac{((2/e)^2+\varepsilon)^m}{((2\rho/e)^2-\varepsilon)^m}\max_{z\in A(\rho)}|f(z)|$$

$$\therefore\ |f(x)-f_m(x)|^{1/m} \lesssim (\text{const.})^{1/m}\rho^{-2m}.$$ ☒

e.g. $f(z)=\dfrac{1}{1+25z^2}$ … $z=\pm\dfrac{i}{5}$ に1位の極をもつ．

どんな $\rho>1$ に対しても $A(\rho)$ の内側にある．

∴ 定理の条件を満たさない．

この $f(x)\ (-1\leqq x\leqq 1)$ に対し等間隔標本点 Lagrange 補間を適用すると，m を大きくするにつれ，$f_m(x)$ は端点 $x=\pm1$ 近くで大きく振動する．

… Runge の現象

< Chebyshev 補間 >

<u>Chebyshev 多項式</u> (チェビシェフ)　$T_n(x) = \cos(n \arccos x)$　$(n = 0, 1, 2, \cdots)$

i.e. $T_n(\cos\theta) = \cos(n\theta)$.

e.g. $T_0(x) = 1$,　$T_1(\cos\theta) = \cos\theta$ より $T_1(x) = x$,
$T_2(\cos\theta) = \cos 2\theta = 2\cos^2\theta - 1$ より $T_2(x) = 2x^2 - 1$,
$T_3(\cos\theta) = \cos 3\theta = 4\cos^3\theta - 3\cos\theta$ より $T_3(x) = 4x^3 - 3x$.

<u>Chebyshev 補間</u> … Chebyshev 多項式 $T_n(x)$ の零点

$$x_k = \cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right) \quad (k = 1, 2, \cdots, n)$$

を標本点に用いた補間.

$$f(x) \simeq f_n(x) = \sum_{k=1}^{n} f(x_k) \frac{T_n(x)}{(x - x_k) T_n'(x_k)} \quad (-1 \leq x \leq 1).$$

<u>定理</u>　$f(z)$ が楕円

$$\mathcal{E}(\rho) = \{ z \in \mathbb{C} \mid |z+1| + |z-1| = \rho + \rho^{-1} \} \quad (\rho > 1)$$

および その内部を含む複素領域で正則ならば, n が十分大きいとき

$$\| f - f_n \| \leq \frac{C(\rho)}{\rho^n} \max_{z \in \mathcal{E}(\rho)} |f(z)|$$

($C(\rho)$ は ρ にのみ依る正定数)

が成り立つ.　□

$$* \quad \mathcal{E}(\rho) = \left\{ x + iy \in \mathbb{C} \;\middle|\; \left(\frac{2}{\rho + \rho^{-1}}\right)^2 x^2 + \left(\frac{2}{\rho - \rho^{-1}}\right)^2 y^2 = 1 \right\}.$$

(証明)　明らかに $\|T_n\| = 1$.
一方, $z \in \mathcal{E}(\rho)$ のとき $|T_n(z)| \leq \frac{1}{2}(\rho^n + \rho^{-n})$ が成り立つ.
実際, $w = z + \sqrt{z^2 - 1}$ とおくと,

$$T_n(z) = \frac{1}{2}\left[(z + \sqrt{z^2-1})^n + (z - \sqrt{z^2-1})^n \right] = \frac{1}{2}(w^n + w^{-n})$$

であり、$z=\frac{1}{2}(w+w^{-1})$ を $|z+1|+|z-1|=\rho+\rho^{-1}$ に代入すると、

$$\frac{1}{2}\left|\sqrt{w}+\frac{1}{\sqrt{w}}\right|^2+\frac{1}{2}\left|\sqrt{w}-\frac{1}{\sqrt{w}}\right|^2=\rho+\rho^{-1},$$

$$|w+1|^2+|w-1|^2=2|w|(\rho+\rho^{-1}),$$

$$|w|^2-(\rho+\rho^{-1})|w|+1=(|w|-\rho)(|w|-\rho^{-1})=0,$$

$$\therefore\quad |w|=\rho,\ \rho^{-1},$$

$$T_n(z)=\frac{1}{2}(\rho^n+\rho^{-n}).$$

以上より

$$|f(x)-f_n(x)|=\left|\frac{T_n(x)}{2\pi i}\oint_{\mathcal{E}(\rho)}\frac{f(z)}{(z-x)T_n(z)}dz\right|$$

$$\leq\frac{1}{2\pi}\cdot\frac{2}{\rho^n+\rho^{-n}}\frac{1}{\min\limits_{z,x}|z-x|}\max_{z\in\mathcal{E}(\rho)}|f(z)|$$

$$=\frac{c(\rho)}{\rho^n}\max_{z\in\mathcal{E}(\rho)}|f(z)|.$$

∎