

解析関数の多項式近似とその誤差解析

京大 数 研

森 正 武



東大 大型計算機
センター

名 取 亮

§ 1	序	2
§ 2	線型汎関数の近似	3
§ 3	線型関数近似	7
§ 4	Taylor展開	9
§ 5	直交多項式展開	11
§ 6	Taylor展開の telescoping	13
§ 7	多項式による補間	15
§ 8	Spline関数による補間	16
§ 9	公式の収束について	18
§ 10	鞍点法および留数定理による誤差の計算	22
§ 11	多項式近似の誤差評価の数値例	24
§ 12	文献	29

§ 1 序

自然科学や工学に現れる問題で計算の対象となる関数は解析関数であることが多い。われわれはすでに数値積分の誤差解析において、被積分関数を解析関数と考えることにより有益な結果を得ている。^{1), 2), 3)} ここでは、Taylor展開、直交多項式展開、多項式補間など、与えられた解析関数 $f(x)$ の近似の誤差解析を、数値積分の場合と同様の原理に基づいて行う。対象の関数 $f(x)$ は解析関数であるので Cauchy の積分表示を利用することができる。これによって、すでに数値積分において得ている誤差の特性関数 $\Phi(z)$ が、多項式近似に対して導入される。近似の誤差は、 $\Phi(z)f(z)$ を被積分関数とする一つの複素積分によって表わされるが、鞍点法および留数定理の利用によりこの複素積分を再び誤差評価を具体的に効率よく実行することができる。

数値計算で得られる結果は文字通り数値であり、したがって数値解析の立場からは、関数 $f(x)$ に対する諸々の演算は関数と数値の対応としてみるべきであろう。この理由から、われわれの解析は原理的には解析関数に対する線型汎関数の近似という観点に立って行われている。対象を線型汎関数に限るので有理関数近似など本質的に線型でない問題は扱うことはできない。しかし、線型の問題に対しては、これまで個々

に扱われてきた対象を統一的に扱えるという利点があり、したがっていろいろな近似法の間の比較を容易に行うことができる。

数値積分、多項式近似など線型汎関数の近似の誤差評価式を公式集で見ると、ふつう対象の関数 $f(x)$ の高階の微係数によって表わされている。例えば、原点のまわりでの $f(x)$ の Taylor 展開を n 項で打ち切ったときの誤差は

$$E_n = \frac{1}{n!} x^n f^{(n)}(\xi) \quad , \quad 0 < \xi < x$$

で与えられている。この誤差の表示は平均値の定理に基づいているため、未知の数 ξ を引数として含んでおり、 ξ をいかに選ぶかによって $f^{(n)}(\xi)$ の値は著しく変わってくる。それに対して、われわれの方法にはこのような未定の因子は含まれず、真の誤差に十分近い値を直接知ることが可能である。

3.2 線型汎関数の近似

まず、一般の線型汎関数とその近似の問題を考える。実軸上の区間 $K = [a, b]$ で解析的な関数の集合を $\mathcal{O}(K)$ と記す。解析関数 $f(x)$ に対する線型な演算 T を、 $\mathcal{O}(K)$ 上の線型汎関数としてとらえこれを $T[f]$ で表わす。例えば、実 x における

関数値 $f(x)$ 、真 x における微係数 $\frac{d}{dx}f(x)$ 、区間 $[a, b]$ における定積分 $\int_a^b f(x)dx$ などがこの部類に入る。これに対して、 $T[f]$ を近似する適当な近似線型汎関数「 n 次の公式」を $T_n[f]$ と記す。数値計算で使われる近似公式は

$$T_n[f] = \sum_{k=1}^n A_k f(a_k) \quad (2-1)$$

の形をしているものが多い。一般には f に関して線型でない近似も数多く存在するが、以下 $T_n[f]$ としてはつねに f に関して線型なものを考える。

実用上はまず満足されていると秀えて差支えない仮定であるが、 T に対して次のような連続性を仮定しておこう。可なり、 K において解析的な関数の列 g_N が、すべての微係数も含めて K で 0 に近づくとき $T[g_N] \rightarrow 0$ が成立するものと可る。 T_n に対しても同様の連続性を仮定可る。

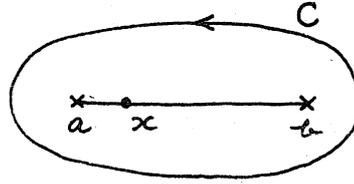
さて、 $\mathcal{O}(K)$ 上の連続線型汎関数 $T[f]$ に対して次式が成立可る。

$$T[f] = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \Psi(z) f(z) dz \quad (2-2)$$

$$\Psi(z) = T\left[\frac{1}{z-x}\right] \quad (2-3)$$

ここで積分路 C は $f(z)$ が正則な範囲にとったオ1回のような

路である。この関係は、直観的には
 明らかのように、 $T[f]$ の f に
 Cauchy の積分表示



オ 1 図
 積分路 C

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{1}{z-x} f(z) dz \quad (2-4)$$

を代入し、 T と $\oint dz$ とを交換して得られるものであるが、それをやると寧ろに言えば次のようになる。

Cauchy の積分表示 (2-4) の右辺の積分は、Riemann 和

$$f_N(x) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{k=1}^N \frac{1}{\zeta_k - x} f(\zeta_k) \Delta \zeta_k \quad (2-5)$$

ただし ζ_k は C 上の点で、 $\Delta \zeta_k = \zeta_k - \zeta_{k-1}$

によって $x \in K$ において一様に近似できる。ここで、 ζ_k および $\Delta \zeta_k$ が x によらないこと、それに T が f に関して線型であることに注意すれば

$$T_x[f_N(x)] = \frac{1}{2\pi i} \sum_{k=1}^N T_x \left[\frac{1}{\zeta_k - x} \right] f(\zeta_k) \Delta \zeta_k \quad (2-6)$$

となる。 T_x の添字 x は x に関する演算であることを明確にするために付したものである。ここで $N \rightarrow \infty$ とすると、上で仮定した T の連続性より

$$\lim_{N \rightarrow \infty} T[f - f_N] = 0 \quad (2-7)$$

となり、したがって

$$\lim_{N \rightarrow \infty} T[f_N] = T[f] = \frac{1}{2\pi i} \oint_C T\left[\frac{1}{z-x}\right] f(z) dz \quad (2-8)$$

なる関係が得られる。

近似演算 $T_n[f]$ も上に述べたような種類のものであれば $\mathcal{O}(K)$ 上の線型汎関数とみなすことができるから

$$T_n[f] = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \Psi_n(z) f(z) dz \quad (2-9)$$

$$\Psi_n(z) = T_n\left[\frac{1}{z-x}\right] \quad (2-10)$$

が成立する。例えば (2-1) の場合

$$\Psi_n(z) = \sum_{k=1}^n \frac{A_k}{z-a_k} = \frac{G_n(z)}{F_n(z)} \quad (2-11)$$

であり、これは n の有理関数である。 $F_n(z)$ は n 次多項式、 $G_n(z)$ は高々 $n-1$ 次多項式である。直交関数系による展開の係数が f に関する積分で表わされることからわかるように、一般に $\Psi_n(z)$ は必ずしも有理関数になるとは限らないが、いずれにしても近似 $T_n[f]$ による誤差 $E_n[f]$ は次のように表わされる。

$$E_n[f] = T[f] - T_n[f] = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \Phi_n(z) f(z) dz \quad (2-12)$$

$$\Phi_n(z) = \Psi(z) - \Psi_n(z) \quad (2-13)$$

$\Phi_n(z)$ を誤差の特性関数という。これは公式のみに依存し、 f には依存しないことはいうまでもない。これももちろん $\mathcal{O}(K)$ 上の線型汎関数である。一般に、 $|\Phi_n(z)|$ は z が $K=[a, b]$ から離れるにしたがって急速に 0 に近づく。具体的な誤差は (2-12) の複素積分の近似計算によって求められるが、 $|\Phi_n(z)|$ の持つ $z \rightarrow \infty$ のときのこの急速な減衰によって、この近似計算の手段として鞍点法が特に有効である。また f が有理関数であれば留数定理を適用することができる。

$\mathcal{O}(K)$ 上の連続線型汎関数として定義されるものが 1 変数の hyperfunction (佐藤超関数) である⁴⁾。したがって、われわれは線型演算 T の近似を hyperfunction の近似としてとらえているわけである。われわれの複素関数 $-\frac{1}{2\pi i} \Psi(z)$ は hyperfunction T の定義関数であり、具体的な近似公式の構成およびその誤差解析はこの定義関数を介して行われているのである。なお、distribution の立場からみると $-\frac{1}{2\pi i} \Psi(z)$ は超関数 T の analytic representation (Cauchy 表示) $\hat{T}(z) = \frac{1}{2\pi i} \langle T, \frac{1}{z-\bar{z}} \rangle$ である⁵⁾。

§3 線型な関数近似

解析関数 $f(x)$ を線型な公式で近似するというここでの本来の目的へ戻ろう。この場合、近似の対象は関数 f の値である

から、 $T[f]$ の積分表示は Cauchy の積分表示 (2-4) に他ならない。したがって

$$\Psi(z) = \frac{1}{z-x} \quad (3-1)$$

である。

これに対して、近似公式 $T_n[f] = f_n(x)$ は一般に適当な 1 次独立な関数系 $\{u_k(x)\}$ による展開で表わされる。

$$T_n[f] = f_n(x) = \sum_{k=0}^{n-1} c_k u_k(x) \quad (3-2)$$

もし $\{u_k\}$ が直交関数系であれば、係数 c_k は f を線型に含む積分によって表現される。また (3-2) が補間式であれば、 c_k は右辺が関数値 $f(x_j)$ である連立 1 次方程式の解として与えられ、したがって $f(x_j)$ の 1 次結合によって表わされる。

このように、数値計算に使われる典型的な近似公式は f に関して線型なものが多い。ただし、最良近似多項式は、その係数の決定に非線型な操作が入るから、線型な公式ではない。

関数近似において線型な近似法を使うと、経局誤差は次式で与えられる。

$$E_n[f] = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \Phi_n(z) f(z) dz \quad (3-3)$$

$$\Phi_n(z) = \frac{1}{z-x} - T_n\left[\frac{1}{z-x}\right] \quad (3-4)$$

誤差はそれを観測する点 x に依存するから、誤差の特性関数 $\Phi_n(z)$ は一般に x に依存している。しかし、関数近似において

は、考えている区間 $[a, b]$ における最大誤差が問題に存るのが普通である。このとき、最大誤差を

$$E_n^{\max}[f] = \max_{a \leq x \leq b} |E_n[f]| \quad (3-5)$$

によって定義すると

$$E_n^{\max}[f] \leq \frac{1}{2\pi} \oint_C \Phi_n^{\max}(z) |f(z)| |dz| \quad (3-6)$$

が成立する。ただし

$$\Phi_n^{\max}(z) = \max_{a \leq x \leq b} |\Phi_n(z)| \quad (3-7)$$

である。これらの関係式は具体的な誤差評価において有用である。しかし $E_n^{\max}[f]$ はもはや f に関して線型な演算ではない。以下具体的な近似公式に関して誤差解析を行う。

§4 Taylor 展開

点 $x = x_0$ における Taylor 展開を n 項で打ち切った $n-1$ 次多項式を考える。

$$T_n[f] = f(x_0) + (x-x_0)f'(x_0) + \dots + \frac{1}{(n-1)!} (x-x_0)^{n-1} f^{(n-1)}(x_0) \quad (4-1)$$

これに対しては、微分に関する Cauchy の積分表示

$$f^{(k)}(x_0) = \frac{k!}{2\pi i} \oint \frac{1}{(z-x_0)^{k+1}} f(z) dz \quad (4-2)$$

を使う。これを (4-1) に代入すれば次式を得る。

$$\begin{aligned}\Psi_n(z) &= \frac{1}{z-x_0} + \frac{(z-x_0)}{(z-x_0)^2} + \frac{(z-x_0)^2}{(z-x_0)^3} + \dots + \frac{(z-x_0)^{n-1}}{(z-x_0)^n} \\ &= \frac{1}{z-x_0} \frac{1 - \left(\frac{z-x_0}{z-x_0}\right)^n}{1 - \left(\frac{z-x_0}{z-x_0}\right)} = \frac{1}{z-x} \left\{ 1 - \left(\frac{z-x_0}{z-x}\right)^n \right\}\end{aligned}\quad (4-3)$$

したがって誤差の特性関数は結局次のようになる。

$$\Phi_n(z) = \frac{1}{z-x} - \frac{1}{z-x} \left\{ 1 - \left(\frac{z-x_0}{z-x}\right)^n \right\} = \frac{(z-x_0)^n}{(z-x)(z-x_0)^n}\quad (4-4)$$

$$\sim \frac{(z-x_0)^n}{z^{n+1}} \quad (z \rightarrow \infty)\quad (4-5)$$

これを(3-3)に代入した式はよく知られた式⁶⁾である。

原典 $x_0=0$ のまわりの展開を考え、その適用範囲を $-1 \leq x \leq 1$ とする。このとき次の関係が成立する。

$$|\Phi_n(z)| = \frac{|z|^n}{|z-x| |z|^n}$$

$$\leq \frac{1}{\left\{ \min_{-1 \leq x \leq 1} |z-x| \right\} |z|^n}$$

$$\equiv \Phi_n^M(z) \quad (\sim \Phi_n^{\max}(z))$$

(4-6)

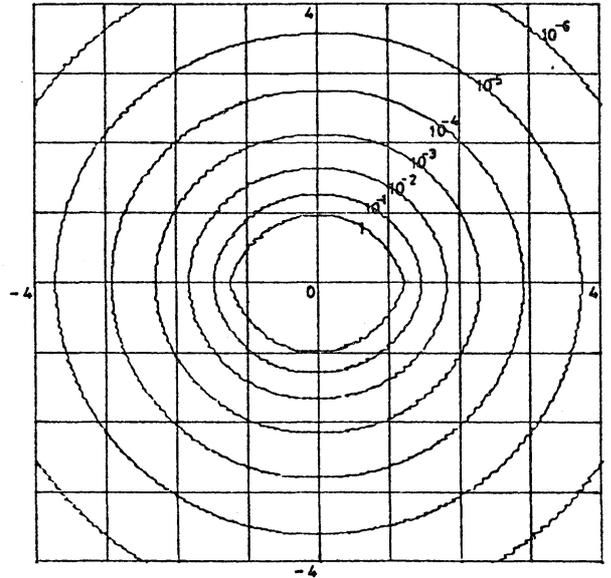


図2 図 Taylor 展開の $\Phi_8^M(z)$

$n=8$ のときの $\Phi_n^M(z)$ の等高線図を図2に示す。

§5 直交多項式展開

区間 $[a, b]$ において重み $w(x)$ に関して定義された直交多項式を $p_k(x)$ とする。

$$\int_a^b p_k(x) p_m(x) w(x) dx = \lambda_k \delta_{km} \quad (5-1)$$

関数 $f(x)$ をこの直交多項式 $p_k(x)$ によって展開したとする。

$$T_n[f] = f_n(x) = \sum_{k=0}^{n-1} c_k p_k(x) \quad (5-2)$$

このとき、展開係数 c_k は次のように定められる。

$$c_k = \frac{1}{\lambda_k} \int_a^b f(\xi) p_k(\xi) w(\xi) d\xi \quad (5-3)$$

$$= \frac{1}{\lambda_k} \int_a^b \left\{ \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{1}{z-\xi} f(z) dz \right\} p_k(\xi) w(\xi) d\xi$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{1}{\lambda_k} g_k(z) f(z) dz \quad (5-4)$$

ここで $g_k(z)$ は

$$g_k(z) = \int_a^b \frac{p_k(\xi)}{z-\xi} w(\xi) d\xi \quad (5-5)$$

によって定義される $p_k(x)$ に対応するいわゆるオーストラールの関数である。このとき誤差の特性関数は次のようになる。

$$\begin{aligned} \Phi_n(z) &= \frac{1}{z-x} - \sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{\lambda_k} g_k(z) p_k(x) \\ &= \sum_{k=n}^{\infty} \frac{1}{\lambda_k} g_k(z) p_k(x) \end{aligned} \quad (5-6)$$

典型的な例として、区間 $[-1, 1]$ で重み $1/\sqrt{1-x^2}$ に関して定義される Chebyshev 多項式 $T_k(x)$ による展開を考えよう。このとき

$$\Phi_n(z) = \frac{2}{\pi} \sum_{k=n}^{\infty} U_k(z) T_k(z) \quad (5-7)$$

が成立する。ここで $U_k(z)$ は次式で定義される n 種の Chebyshev 関数である。

$$\begin{aligned} U_k(z) &= \int_{-1}^1 \frac{T_k(\xi)}{(z-\xi)\sqrt{1-\xi^2}} d\xi = \int_0^\pi \frac{\cos k\theta}{z-\cos\theta} d\theta \\ &= \frac{\pi}{\sqrt{z^2-1} (z+\sqrt{z^2-1})^k} \end{aligned} \quad (5-8)$$

したがって、誤差の特性関数に関して次式が成立する。

$$\Phi_n(z) \sim \frac{T_n(z)}{2^{n-1} z^{n+1}} \quad (z \rightarrow \infty) \quad (5-9)$$

$$\begin{aligned} |\Phi_n(z)| &\leq \frac{2}{\pi} \sum_{k=n}^{\infty} |U_k(z)| |T_k(z)| \leq \frac{2}{\pi} \sum_{k=n}^{\infty} |U_k(z)| \\ &= \frac{2}{|\sqrt{z^2-1}|} \sum_{k=n}^{\infty} \frac{1}{|z+\sqrt{z^2-1}|^k} \\ &= \frac{2}{|\sqrt{z^2-1}| (|z+\sqrt{z^2-1}|-1) |z+\sqrt{z^2-1}|^{n-1}} \quad (|z+\sqrt{z^2-1}|>1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\equiv \Phi_n^M(z) \quad (5-10) \\ &(\sim \Phi_n^{\max}(z)) \end{aligned}$$

オ3図に $n=8$ のときの $\Phi_n^M(z)$ の等高線図を示す。

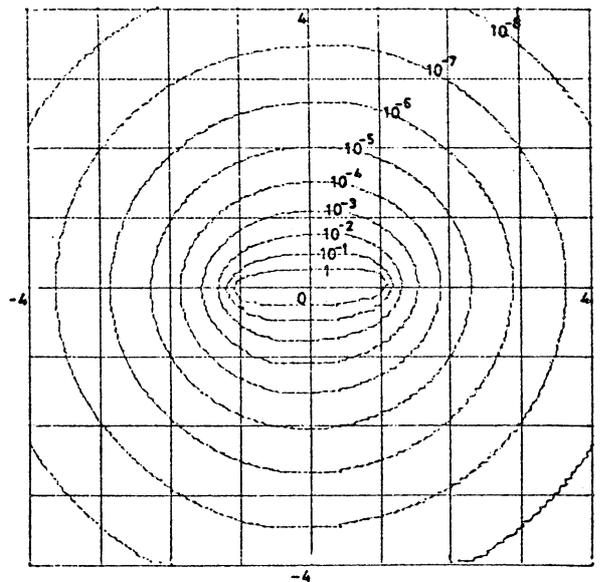
いま

$$z = \frac{1}{2} \left(w + \frac{1}{w} \right) \quad (5-11)$$

なる変数変換を考えると

$$w = z \pm \sqrt{z^2-1} \quad (5-12)$$

であり、 $|w| = \text{一定}$ なる



オ3図 Chebyshev 展開の $\Phi_n^M(z)$

w -平面の円は、 z -平面における $z = \pm 1$ を焦点とする楕円に写像される。したがって、ある円の等高線は近似的に楕円とみなすことができる。なお、(5-11)の変換を(5-4)に行うと

$$c_k = 2 \times \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{1}{w^{k+1}} f\left(\frac{1}{2}\left(w + \frac{1}{w}\right)\right) dw, \quad k \neq 0 \quad (5-13)$$

を得る。 $k=0$ のとき $\lambda_0 = \pi$ であるので右辺の乗数2は除く。これは、Chebyshev展開の係数が $f\left(\frac{1}{2}\left(w + \frac{1}{w}\right)\right)$ の Laurent 展開の係数の2倍というよく知られた関係式⁷⁾である。

なお、直交多項式が、区間 $[-1, 1]$ で重み $(1-x)^\alpha (1+x)^\beta$ に関して定義される Jacobi の多項式 $P_n^{(\alpha, \beta)}(x)$ のとき、対応する α, β 2種の関数 $Q_n^{(\alpha, \beta)}(z)$ は、 n が大のとき漸近的に α, β にほとんど依存せず同じようふるまう⁹⁾。例えば Legendre 多項式による展開の誤差の特性関数 $\Phi_n^{\text{leg}}(z)$ は、Chebyshev 展開の特性関数 $\Phi_n^{\text{Cheb}}(z)$ と比較すると近似的に

$$\Phi_n^{\text{leg}}(z) \sim \frac{\sqrt{\pi n}}{2} \Phi_n^{\text{Cheb}}(z) \quad (5-14)$$

なる関係にある。したがって、 n がそれ程大でなければ、Legendre 多項式展開の利用も考えられてよい。

本節の議論は、 $\{P_k(x)\}$ が直交多項式系の場合に限らず、一般の直交関数系に対して成立することを注意しておく。

§ 6 Taylor 展開の telescoping

原点のまわりの Taylor 展開

$$f_{N+1}(x) = f(0) + x f'(0) + \dots + \frac{1}{N!} x^N f^{(N)}(0) \quad (6-1)$$

において、右辺最後の項の x^N を $x^N - T_N(x)/2^{N-1}$ で置換えると、次のような $N-1$ 次多項式が得られる。

$$f_N(x) = f(0) + x f'(0) + \dots + \frac{1}{N!} \left\{ x^N - \frac{T_N(x)}{2^{N-1}} \right\} f^{(N)}(0) \quad (6-2)$$

次に右辺の x^{N-1} を $x^{N-1} - T_{N-1}(x)/2^{N-2}$ で置換ればさらに低い次数の多項式になる。この操作を続行すれば、ある段階までは誤差が次々に減少する。これを Taylor 展開の *telescoping* という⁸⁾。このようにして得られる近似式は明らかに f に関して線型である。いま簡単のために 1 回だけ *telescoping* を行った式の誤差の特性関数を求めてみよう。(6-2) より $f_n(x)$ の誤差は

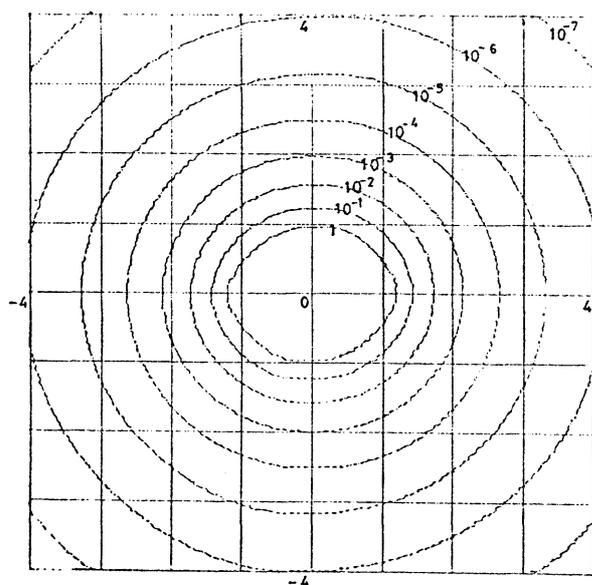
$$f(x) - f_n(x) = \sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{1}{k!} x^k f^{(k)}(0) + \frac{T_n(x)}{2^{n-1} n!} f^{(n)}(0) \quad (6-3)$$

であり、特性関数は $|x/2| < 1$ のとき次のようになる。

$$\begin{aligned} \Phi_n(z) &= \sum_{k=n+1}^{\infty} \frac{z^k}{2^{k+1}} + \frac{T_n(x)}{2^{n-1} 2^{n+1}} \\ &= \frac{1}{2^{n+1}} \left\{ \frac{z^{n+1}}{z-x} + \frac{T_n(x)}{2^{n-1}} \right\} \end{aligned} \quad (6-4)$$

$$\begin{aligned} |\Phi_n(z)| &\leq \frac{1}{|z|^{n+1}} \left\{ \frac{1}{\min_{|z|=1} |z-x|} + \frac{1}{2^{n-1}} \right\} \\ &\equiv \Phi_n^M(z) \quad (6-5) \\ &(\sim \Phi_n^{\max}(z)) \end{aligned}$$

オ 4 回 に $n=8$ のときの $\Phi_n^M(z)$ の等高線図を示す。オ 2 回と比較すると、 n の値がこの程度



オ 4 回 Taylor 展開に 1 回 *telescoping* を行ったときの $\Phi_n^M(z)$

の数のときには、1回の telescoping でもかなり効果があることが認められる。

§7 多項式による補間

標本点を x_1, x_2, \dots, x_n とする補間多項式は Lagrange 補間公式によって次のように与えられる¹⁰⁾。

$$T_n[f] = f_n(x) = \sum_{j=1}^n \frac{F_n(x)}{(x-x_j)F_n'(x_j)} f(x_j) \quad (7-1)$$

$$F_n(x) = (x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n) \quad (7-2)$$

この補間式 $f_n(x)$ によって $f(x)$ を近似したときの誤差の特性関数は次式のようになる。

$$\Phi_n(z) = \frac{F_n(z)}{(z-x)F_n'(z)} \quad (7-3)$$

なぜなら、点 x, x_1, x_2, \dots, x_n は上式の単純な極であるから、留数定理によって直ちに次式が得られるからである。

$$\frac{1}{2\pi i} \oint \Phi_n(z) f(z) dz = f(x) - f_n(x) \quad (7-4)$$

例として、 n 次の Chebyshev 多項式の零点を標本点とする補間の誤差を考える。このとき

$$\Phi_n(z) = \frac{T_n(z)}{(z-x)T_n'(z)} \quad (7-5)$$

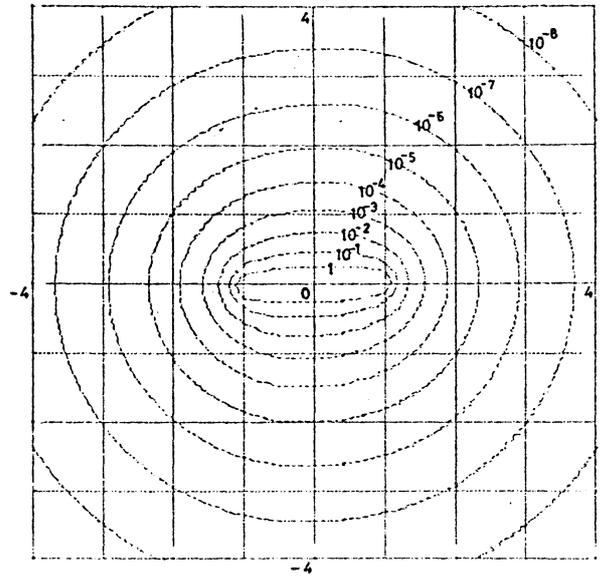
$$\sim \frac{T_n(z)}{2^{n-1} z^{n+1}} \quad (z \rightarrow \infty) \quad (7-6)$$

$$|\Phi_n(z)| \leq \frac{1}{\{\min_{-1 \leq x \leq 1} |z-x|\} |T_n'(z)|} \equiv \Phi_n^M(z) \sim \Phi_n^{\max}(z) \quad (7-7)$$

が成立する。オ5図に $n=8$ のときの $\Phi_8^M(x)$ の等高線図を示した。

区間 $[a, b]$ において重み $w(x)$ に関して定義される直交多項式 $p_n(x)$ による展開の係数は、(5-3) で与えられる。そして、その右辺の積分を $p_n(x)$ に対応して定義される

Gauss 型積分公式で近似的に行い、それを (5-2) に代入すると、得られる式は n 次直交多項式 $p_n(x)$ の零点を標本点とする補間多項式 (7-1) に正確に一致する¹¹⁾。一般に Gauss 型積分公式の精度は高いから、直交多項式展開と直交多項式補間とはほとんど同じ程度の近似であることが期待される。実際、 n が大きいとき (5-9) と (7-6) とは一致し、また Chebyshev 展開の $\Phi_n^M(x)$ の等高線図 (オ3図) と Chebyshev 補間の $\Phi_n^M(x)$ の等高線図 (オ5図) の間にほとんど差異は認められない。



オ5図 Chebyshev 補間の $\Phi_8^M(x)$

§8 Spline 関数による補間

関数 $f(x)$ を Spline 関数によって補間する近似はもちろん f に関して線型である。最も単純な場合として 1 次の Spline 関

数、可なり折れ線によって補間する場合を考えよう。区間 $[a, b]$ 内に n 個の標本点 x_1, x_2, \dots, x_n をとる。このとき、小区間 $[x_{j-1}, x_j]$ における補間 1 次式の誤差の特性関数は、

前節の結果から

$$\Phi^j(z) = \frac{F^j(x)}{(z-x)F^j(z)} \quad (8-1)$$

$$F^j(x) = (x-x_{j-1})(x-x_j) \quad (8-2)$$

である。したがって、全区間における誤差の特性関数 $\Phi_n(z)$ は

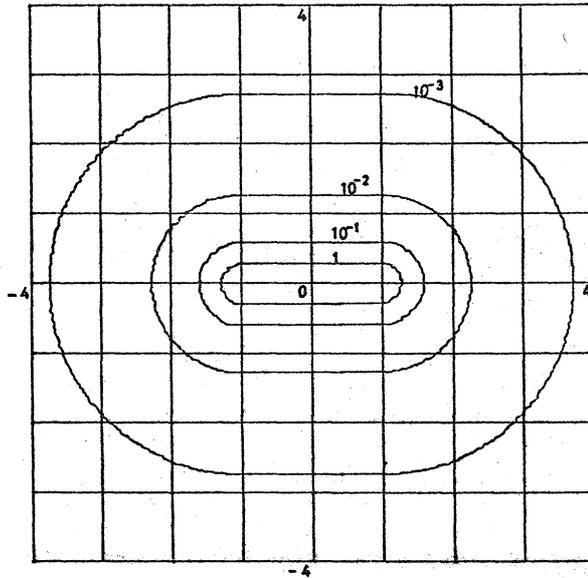
$\Phi_n(z)$ は

$$\Phi_n(z) = \Phi^j(z), \quad x_{j-1} \leq x \leq x_j \quad (j=2, 3, \dots, n) \quad (8-3)$$

となる。いま、区間 $[-1, 1]$ を $n-1$ 等分し、端点 ± 1 を含めた n 個の等分点を標本点にとる場合を考える。このとき、きし $h = x_j - x_{j-1}$ を十分小さくとれば $|z|$ が大のとき近似的に次式が成立する。

$$\Phi_n^{\max}(z) \equiv \max_{-1 \leq x \leq 1} |\Phi_n(z)| \sim \begin{cases} \frac{h^2}{4|z-1|^3} & ; \operatorname{Re} z \geq 1 \\ \frac{h^2}{4|9z|^3} & ; | \operatorname{Re} z | \leq 1 \\ \frac{h^2}{4|z+1|^3} & ; \operatorname{Re} z \leq -1 \end{cases} \quad (8-4)$$

オ 6 図に $n=8$ のときの $\Phi_n^{\max}(z)$ の等高線図を示す。



オ 6 図 折れ線近似の $\Phi_n^{\max}(z)$

§9 公式の収束について

数値計算に適した公式とは、広い範囲の f に対して $T[f] \sim T_n[f]$ の成立するものであろう。 $T \sim T_n$ とは可なり $\Psi(z) \sim \Psi_n(z)$ ということである。したがって、 $T \sim T_n$ の問題は、複素平面内における与えられた関数 $\Psi(z)$ の $\Psi_n(z)$ による近似の問題になる。これは前述したように、hyperfunction の近似の問題である。

$T \sim T_n$ の意味は、最も強く解釈すれば

$$\max_{z \notin K} |\Psi(z) - \Psi_n(z)| \rightarrow 0 \quad (9-1)$$

であろう。しかし、数値計算で使われる公式に対しては、ふつう $O(K)$ の適当なクラスに属する任意の関数 f に対して

$$\frac{1}{2\pi i} \oint \{\Psi(z) - \Psi_n(z)\} f(z) dz = \frac{1}{2\pi i} \oint \Phi_n(z) f(z) dz \rightarrow 0 \quad (9-2)$$

を要請すれば十分のことが多い。 f を多項式によって近似することができるような場合には、「 n 次の公式」は

$$\frac{1}{2\pi i} \oint \Phi_n(z) z^k dz = \frac{1}{2\pi i} \oint \{\Psi(z) - \Psi_n(z)\} z^k dz = 0, \quad k=0, 1, \dots, n-1 \quad (9-3)$$

すなわち

$$T_n[x^k] = T[x^k], \quad k=0, 1, \dots, n-1 \quad (9-4)$$

なる連立方程式を解くことによって構成される。この公式作

成のアルゴリズムは、また、 $\Phi_n(z)$ を $1/z$ のべきに展開して、
 $1/z^n$ までのべきの係数を 0 とおくことに等しい。なぜなら、
 このとき $\Phi_n(z)$ は

$$\Phi_n(z) \sim \frac{C_n}{z^{n+1}} + \frac{C_{n+1}}{z^{n+2}} + \dots \quad (9-5)$$

となるが、このような $\Phi_n(z)$ に対しては

$$\frac{1}{2\pi i} \oint \Phi_n(z) z^k dz = 0, \quad k=0, 1, 2, \dots, n-1 \quad (9-6)$$

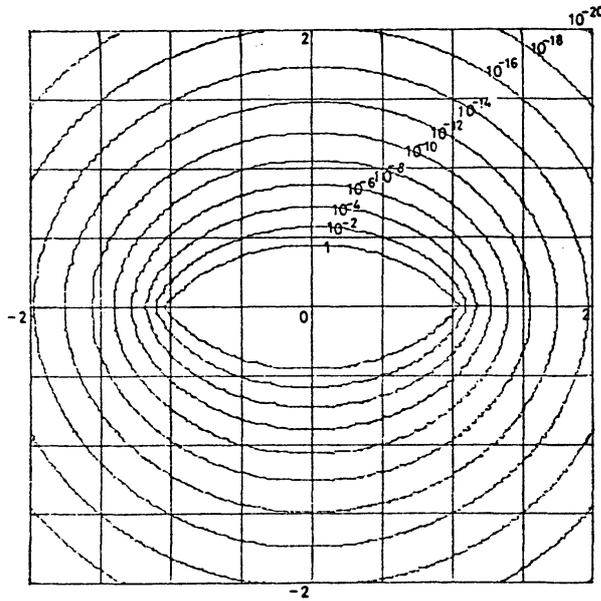
が成立するからである。

数値計算の公式としては、標本点や展開の項数などを増すとき、確実に真の値に近づくことが一般に保証されているものが望ましい。これは、任意の解析関数 $f(z)$ に対して $n \rightarrow \infty$ のとき $E_n[f] \rightarrow 0$ が成立するということであり、そのためには区間 K を除く全平面において

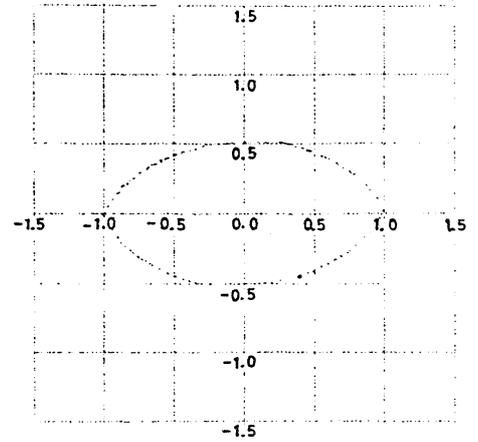
$$n \rightarrow \infty \text{ のとき } \text{---} \text{ 様} \text{---} \quad |\Phi_n(z)| = |\Psi(z) - \Psi_n(z)| \rightarrow 0 \quad (9-7)$$

が成立している必要がある。

ところがよく使われる公式でこの条件が満足されないものも存在する。その典型的な例は、標本点を等間隔にとった多項式補間である。オ 7 回、区間 $K = [-1, 1]$ を 31 等分して端点を含むその 32 個の等分点を標本点とする Lagrange 補間公式



オ7図 等間隔 Lagrange 補間の $\Phi_{32}^{max}(z)$



オ8図 $\frac{1}{4} \left| \frac{(z+1)^{z+1}}{(z-1)^{z-1}} \right| = 1$

の $\Phi_n^{max}(z) = \max_{-1 \leq x \leq 1} |\Phi_n(z)|$ の等高線図である。複素平面上の区
 間 $K = [-1, 1]$ の近くで $\Phi_n^{max}(z)$ の値は n と共に増大する。その
 時の事情がオ7図に現われている。 $\Phi_n^{max}(z) = 1$ なる曲線は
 $n \rightarrow \infty$ の極限で

$$\left| \frac{(z+1)^{z+1}}{(z-1)^{z-1}} \right| = 4 \tag{9-8}$$

であることが示される⁽²⁾。オ8図にこの曲線を示した。オ7
 図の $\Phi_n^{max}(z) = 1$ の等高線は、ほぼこの曲線に近い。これから
 わかるように、この曲線の内側、すなわち

$$\left| \frac{(z+1)^{z+1}}{(z-1)^{z-1}} \right| < 4$$

を満足する範囲に極を持つ関数、例えば

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

に対して等間隔に標本点をとって多項式補間を行うと、その誤差は留数定理を使えば

$$\left| \frac{1}{2\pi i} \oint \Phi_n(z) \frac{1}{1+25z^2} dz \right| = \left| \frac{1}{10} \left\{ \Phi_n\left(\frac{1}{5}i\right) - \Phi_n\left(-\frac{1}{5}i\right) \right\} \right| \leq \frac{1}{5} \Phi_n^{\max}\left(\frac{1}{5}i\right) \quad (9-9)$$

となるが、 n が増すとともにその値は著しく大きくなってゆく。この現象は補間多項式 $f_n(x)$ の端点 ± 1 付近における誤差の増大に対応しており、これを Runge の現象という。

等間隔な n 個の標本点を持つ Lagrange 補間公式 $f_n(x)$ は、 $f(x)$ が $n-1$ 次までの多項式の時には $f(x)$ に正確に一致する。したがって、この公式は (9-2) は成立するが (9-1) は成立しない一つの例である。また、Newton-Cotes 積分公式は、等間隔な標本点を持つ Lagrange 補間公式を積分したものであるから、やはり上述したものに類似の不都合を生ずる。

それに対して、才 9 図にみられるように、Chebyshev 補間における $\Phi_n^{\max}(z)$ の収束は $n \rightarrow \infty$ のとき $z \in [-1, 1]$ において一様である。なぜなら、Chebyshev 補間においては $z = \cos \theta$ とおくと

$$\begin{aligned} \Phi_n^{\max}(z) &= \frac{1}{\left\{ \min_{z \in K} |z-x| \right\} |T_n(z)|} = \frac{1}{\left\{ \min_{z \in K} |\cos \theta - x| \right\} |\cos n\theta|} \\ &= \frac{2}{\left\{ \min |\cos \theta - x| \right\} |e^{in\theta} + e^{-in\theta}|} \end{aligned} \quad (9-10)$$

であるが、 z が区間 $K = [-1, 1]$ から少しでも外れると θ は複素数

$$\theta = \varphi + i\psi, \quad \psi \neq 0 \quad (9-11)$$

になる。したがって、 $z \notin K$ に対して

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Phi_n^{\max}(z) = \frac{2}{\{\min |z-x|\}}$$

$$\times \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|e^{i\eta\psi} e^{-n\psi} + e^{-i\eta\psi} e^{n\psi}|} = 0 \quad (9-12)$$

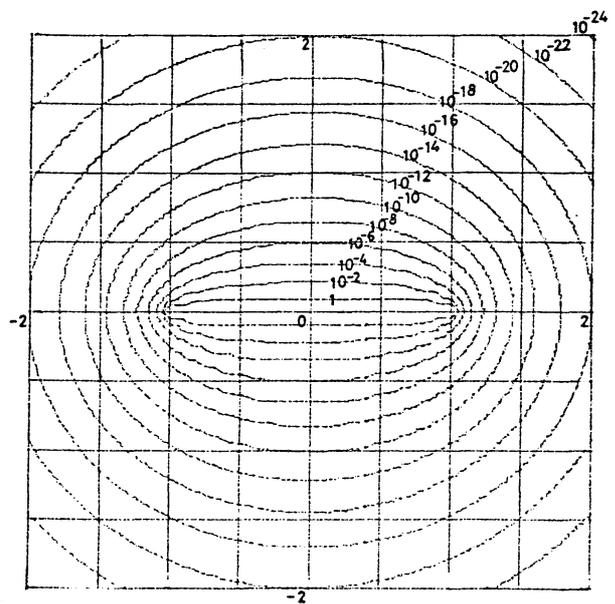


図9回 Chebyshev 補間の $\Phi_{32}^M(z)$

となり、 $\Phi_n^{\max}(z)$ は $[-1, 1]$ を除く全平面で一様に 0 に近づく。

Chebyshev 補間においては、補間に対する情報を多く必要とする端点の近くに多くの標本点が分布しているが、等間隔に標本点をとる補間では端点付近で情報が不足しており、ここに不自然さがあるわけである。

§10 鞍点法および留数定理による誤差の計算

誤差を表わす複素積分

$$E_n[f] = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \Phi_n(z) f(z) dz \quad (10-1)$$

を鞍点法で近似的に計算する公式を導びいておく。いま (10-1) の被積分関数を

$$F(z) = \Phi_n(z) f(z) = e^{\varphi(z)} \quad (10-2)$$

とおく。ただし $\varphi(z)$ は

$$\varphi(z) = \log \Phi_n(z) f(z) \quad (10-3)$$

である。鞍点法は、複素積分 (10-1) の積分路 C を $F(z)$ の鞍点を通るようにとってこれを近似的に計算する方法である。

$F(z)$ の鞍点 z_0 は

$$F'(z_0) = \varphi'(z_0) e^{\varphi(z_0)} = 0 \quad (10-4)$$

によって定められる。実際には $F'(z) = 0$ あるいは $\varphi'(z) = 0$ のうち簡単な方を解けばよい。つぎに鞍点 z_0 のまわりで $\varphi(z)$ を Taylor 展開し、ある項で打ち切ると近似的に

$$\varphi(z) \sim \varphi(z_0) + \frac{1}{2} \varphi''(z_0) (z - z_0)^2 \quad (10-5)$$

が成立する。ここで $\varphi'(z_0) = 0$ を用いた。このとき

$$|F(z)| \sim e^{\operatorname{Re} \varphi(z_0)} e^{\frac{1}{2} \operatorname{Re} \{ \varphi''(z_0) (z - z_0)^2 \}} \quad (10-6)$$

であるから、積分路 C を $-\frac{1}{2} \operatorname{Re} \{ \varphi''(z_0) (z - z_0)^2 \}$ が最大になる方向にとると、その方向において

$$\begin{aligned} |F(z)| &\sim e^{\log |\Phi_n(z_0) f(z_0)|} e^{-\frac{1}{2} |\varphi''(z_0)| |z - z_0|^2} \\ &= |\Phi_n(z_0) f(z_0)| e^{-\frac{1}{2} |\varphi''(z_0)| r^2}, \quad r = |z - z_0| \end{aligned} \quad (10-7)$$

となる。したがって、その方向においては $|F(z)|$ の値は鞍点 z_0 で極大値をとり、 z_0 を離れると急激に小さくなる。これゆえ、誤差は近似的に

$$|E_n[f]| \sim \frac{1}{2\pi} |\Phi_n(z_0) f(z_0)| \times 2 \int_0^\infty e^{-\frac{1}{2} |\varphi''(z_0)| r^2} dr$$

$$= \frac{|\Phi_n(z_0) f(z_0)|}{\sqrt{2\pi} |\varphi''(z_0)|} \quad (10-8)$$

で与えられる。ふつう鞍点は区間 $[a, b]$ からかなり離れて存在し $\varphi''(z_0)$ は n にほとんど依存しないと考えられる。したがって、最大誤差を与える近似公式として次式を得る。

$$E_n^{\max} [f] = \frac{|\Phi_n^{\max}(z_0) f(z_0)|}{\sqrt{2\pi} |\varphi''(z_0)|} \quad (10-9)$$

誤差の特性関数 $\Phi_n(z)$ は、 n が大であれば一般にその変化は急激になり、鞍点法は特に効果的になる。

つきに、 $f(z)$ が z_0 に極を持ち、そこでの留数は R_0 であるとする。このとき、積分路 C をこの極を越えて弧が十分遠ざけると、留数定理から直ちに次の誤差式を得る。

$$E_n [f] = \Phi_n(z_0) R_0 \quad (10-10)$$

鞍点あるいは極が2個以上存在するときにはその分だけ (10-9) あるいは (10-10) を加え合せればよい。しかし、誤差に主として寄与する鞍点や極は、ふつう唯一鞍点あるいは複素共役な唯一組の場合が多い。

§11 多項式近似の誤差評価の数値例

つきに、Chebyshev補間によって関数を多項式近似したときの誤差を、実際に (2-12) の近似計算から推定する例を示す。いずれの場合も標本点数は $n=8$ 、すなわち7次多項式近似をとり

あげる。近似の適用区間が $[-1, 1]$ 以外るときには、まずその区間を $[-1, 1]$ に変換すれば、結局問題は、補間による近似式

$$f(x) \sim C_0 T_0(x) + C_1 T_1(x) + \dots + C_n T_n(x), \quad -1 \leq x \leq 1$$

の誤差を求めることに帰着される。

$$[\text{例 1}] \quad 10^t \sim a_0 + a_1 t + \dots + a_n t^n, \quad 0 \leq t \leq 1 \quad (11-1)$$

区間を $[-1, 1]$ に直すため、変数変換 $t = \frac{1}{2}(x+1)$ を行くと、近似の対象の関数は

$$f(x) = 10^{\frac{1}{2}(x+1)} = e^{\frac{1}{2}(x+1)\log_e 10} \quad (11-2)$$

となる。Chebyshev 補間に対しては、 n が大であると仮定すれば

$$\Phi_n(z) \sim T_n(x) / 2^{n-1} z^{n+1} \quad (11-3)$$

が成立するから

$$\begin{aligned} F(z) = \Phi_n(z) f(z) &\sim \frac{T_n(x)}{2^{n-1} z^{n+1}} e^{\frac{1}{2}(z+1)\log_e 10} \\ &= \frac{\sqrt{10} T_n(x)}{2^{n-1}} e^{(\frac{1}{2}\log_e 10)z - (n+1)\log_e z} \end{aligned} \quad (11-4)$$

となる。したがって $g(z)$ は次のような関数である。

$$g(z) = \frac{\log_e 10}{2} z - (n+1)\log_e z \quad (11-5)$$

$g'(z) = 0$ より、鞍点の近似的な位置

$$z_0 = \frac{2(n+1)}{\log_e 10} \quad (11-6)$$

が得られる。 $n=8$ のとき $z_0 \sim 7.8$ で、(11-3) の仮定は成立する。

$$g''(z_0) = \frac{(n+1)}{z_0^2} = \frac{(\log_e 10)^2}{4(n+1)} \quad (11-7)$$

であるから、これらを (10-9) に代入すれば

$$E_n^{\max}[f] \sim \frac{4.36\sqrt{n+1}}{\{0.64 \times (n+1)\}^{n+1}} \quad (11-8)$$

となり、特に $n=8$ とおくと

$$E_8^{\max} [f] \sim 2 \times 10^{-6} \quad (11-9)$$

を得る。なお、変形ベッセル関数 I_k で表わされる Chebyshev 展開

$$f(x) = 10^{\frac{1}{2}(x+1)} = \sqrt{10} e^{ax} \sim \sqrt{10} \left\{ I_0(a) + 2 \sum_{k=1}^{\frac{1}{2}n} I_k(a) T_k(x) \right\}, \quad a = \frac{1}{2} \log e 10 \quad (11-10)$$

の誤差も、これとほとんど同じである。

$$[例2] \quad \sin \frac{\pi}{2} t \sim a_0 + a_1 t + \dots + a_n t^n, \quad -1 \leq t \leq 1 \quad (11-11)$$

この例では変数変換は不要である。

$$f(x) = \sin \frac{\pi}{2} x \quad (11-12)$$

$$F(z) = \Phi_n(z) \sin \frac{\pi}{2} z \sim \frac{T_n(z)}{2^{n-1} z^{n+1}} \frac{e^{\frac{\pi}{2} i z} - e^{-\frac{\pi}{2} i z}}{2i}$$

$$\sim \frac{1}{2^{n+1}} T_n(z) e^{-\frac{\pi}{2} i z - (n+1) \log z}, \quad \Im_m z > 0 \quad (11-13)$$

であるから、 $\varphi(z)$ は $\Im_m z > 0$ で次のようになる。

$$\varphi(z) = -\frac{\pi}{2} i z - (n+1) \log z \quad (11-14)$$

$\varphi'(z) = 0$ より鞍点の位置の近似値

$$z_0 = \frac{2(n+1)}{\pi} i \quad (11-15)$$

が求められ、また

$$\varphi''(z_0) = \frac{(n+1)}{z_0^2} = \frac{\pi^2}{4(n+1)} \quad (11-16)$$

である。これらを (10-9) に代入し、下半平面 $\Im_m z < 0$ に対称的に存在する鞍点も考慮に入れれば

$$E_n^{\max} [f] \sim \frac{8\sqrt{n+1}}{\sqrt{2\pi^3}} \left\{ \frac{\pi e}{4(n+1)} \right\}^{n+1} \quad (11-17)$$

となる。特に $n=8$ とすれば

$$E_8^{\max} [f] \sim 7 \times 10^{-6} \quad (11-18)$$

が得られる。

$$[例3] \Gamma(2+t) \sim a_0 + a_1 t + \dots + a_n t^n, \quad -0.5 \leq t \leq 0.5 \quad (11-19)$$

変数変換 $t = \frac{1}{2}x$ を行うと

$$f(x) = \Gamma(2 + \frac{1}{2}x) \quad (11-20)$$

となる。Gamma関数の公式 $\Gamma(s+1) = s\Gamma(s)$ より

$$\Gamma(2 + \frac{1}{2}x) = \frac{1}{2 + \frac{1}{2}x} \Gamma(3 + \frac{1}{2}x) = \frac{2}{x+4} \Gamma(3 + \frac{1}{2}x) \quad (11-21)$$

が得られる。したがって

$$F(x) = \Phi_n(x) f(x) = \Phi_n(x) \frac{2}{x+4} \Gamma(3 + \frac{1}{2}x) \quad (11-22)$$

である。まず、積分路 C を実軸の真の方向へ拓げてゆくと、 $x = -4$ の極からの寄与を考慮に入れる必要が生じてくる。関数 $\Gamma(3 + \frac{1}{2}x)$ は、 $x = -4$ 以外にも $x = -6, -8, \dots$ に極をもっているが、さらに積分路を拓げるときこれらの極からの寄与が無視できることは $|\Phi_n(x)|$ の急激な減少から容易にわかる。つぎに、 $|\Gamma(2 + \frac{1}{2}x + \frac{1}{2}iy)|$ は $|y| \rightarrow$ 大のとき単調に減少するから、積分路 C を実軸から遠ざけることは無条件に可能である。また、 $x \rightarrow$ 大のとき、 $\Gamma(2 + \frac{1}{2}x)$ は急激に増大するが、例えば積分路 C を実軸を $x=6$ なる点で横断させれば、ここでは

$$|\Phi_n(6) f(6)| = |\Phi_n(6) \Gamma(5)| = 24 \times |\Phi_n(5)| \ll 2 \times |\Phi_n(-4)|$$

であり、この寄与は無視できる。結局、積分路 C を拓げて

$[-1, 1]$ から遠ざけ σ 10 回のようにとれば、誤差は (10^{-10}) より

$$E_n^{\max}[f] = \max_{-1 \leq x \leq 1} |E_n[f]| \sim \Phi_n^{\max}(-4) \times 2 \times \Gamma(1) = 2 \Phi_n^{\max}(-4) \quad (11-23)$$

となることがわかる。

特に $n=8$ として γ 5 回

を参照すれば

$$E_{\epsilon}^{\max}[f] \sim 1.0 \times 10^{-7} \quad (11-24)$$

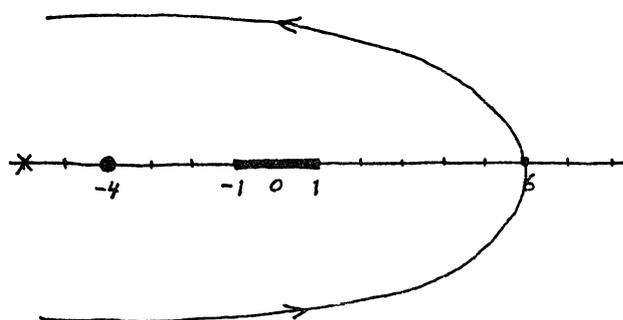
が得られる。実際の計

算誤差は

$$E_{\text{obs}} \sim 0.8 \times 10^{-7} \quad (\text{戸田・高山}^{13}) \quad (11-25)$$

である。ただしこれは最良化を行った値である。

最後に、この仕事の基本的な部分に関してさまざま御教示下さった高橋秀俊先生にお礼申し上げます。



γ 10 回 積分路 C

§ 12 文献

1. 高橋・森: 解析関数の数値積分の誤差評価: 京都大学数理解析研究所講究録 115 (1971) 222-269.
2. H. Takahasi and M. Mori: *Error Estimation in the Numerical Integration of Analytic Functions: Report of the Computer Centre, Univ. of Tokyo*, 3 (1970) 41-108.
3. H. Takahasi and M. Mori: *Estimation of Errors in the Numerical Quadrature of Analytic Functions: Applicable Analysis*, 1 (1971) 201-229.
4. 佐藤: 超円数の理論: 数学 10 (1958) 1-27.
5. H. Bremermann: *Distributions, Complex Variables, and Fourier Transforms*, p. 43, Addison-Wesley.
6. 森口・宇田川・一松: 数学公式 II, p. 126, 岩波.
7. 一松: 近似式, p. 62, 竹内書店.
8. 同上, p. 67.
9. G. Szegő: *Orthogonal polynomials*, p. 199, AMS.
10. 山内・森口・一松編: 電子計算機のための数値計算法 I, p. 74, 培風館.
11. Lanczos: *Applied Analysis*, p. 378, Prentice-Hall.
12. 同上, p. 356
13. 阿田・高山: オ13回プログラミングシンポジウム報告集 (1972), p. 296, 情報処理学会.