計算情報学Ⅰ

名古屋大学　情報文化学部
自然情報学科３年
第９回

鈴木泰博
情報文化学部・大学院情報科学研究科
複雑系科学専攻

Science of
interactions

Agenda
計算情報学 Ｉ 第９回

1. 前回のつづき(ラグランジュ補間）
2. 数値積分とは
3. 離散近似
4. 台数公式
5. シンプソンの公式
6. ロンバーグ積分法
7. チェックテスト（第2回）について

Science of interactions

ラグランジュ補間

一般にN＋1の場合関数 $l_j(x),(j=1,2,3,\ldots N)$**を以下のように定義する。**

$$\boxed{l_j(x)=\frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{j-1})(x-x_{j+1})\cdots(x-x_N)}{(x_j-x_0)(x_j-x_1)\cdots(x_j-x_{j-1})(x_j-x_{j+1})\cdots(x_j-x_N)}}$$

ここで$l_j(x)$**は、**

$$l_j(x)=\begin{cases}1 & (i=j)\\ 0 & (i\neq j)\end{cases}$$

を満たす。そこで、$P_N(x)$**を、** $P_N(x)=\sum_{j=0}^{N} y_j l_j(x)$ **と定義すると、高々N次の多項式となり、**

$P_N(x_j)=y_j$ **を満たす。この多項式をラグランジュの補間多項式とよぶ。**

⇒例を考えるとわかります。

ラグランジュ補間

$$P_N(x) = \sum_{j=0}^{N} y_j l_j(x)$$

m=3の場合

$$p_3(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} f_1 + \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} f_2 + \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} f_3$$

演習 $P_3(x)$**が**(x_1,f_1), (x_2,f_2),(x_3,f_3)**を通ることを確かめよ。**

演習
ラグランジュ補間

演習: 以下のx_kとf_kに対する補間多項式を求めよ。

x_k	0	1	2
f_k	1	0	1

ヒント： m=3の場合のラグランジュ多項式

$$p_3(x) = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} f_1 + \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} f_2 + \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} f_3$$

Science of interactions

解答
ラグランジュ補間

演習: 以下のx_kとf_kに対する補間多項式を求めよ。

x_k	0	1	2
f_k	1	0	1

$$p_3(x)=\frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)}f_1+\frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}f_2+\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}f_3$$

より、

$$p_3(x)=\frac{(x-1)(x-2)}{(0-1)(0-2)}1+\frac{(x-0)(x-2)}{(1-0)(1-2)}0+\frac{(x-0)(x-1)}{(2-0)(2-1)}1$$

$$=\frac{1}{2}(x-1)(x-2)+\frac{1}{2}x(x-1)=\boxed{(x-1)^2}$$

Science of interactions

ラグランジュ補間の誤差

$$f(x) - P(x) = \frac{1}{(n+1)!}\pi(x) f^{n+1}(\xi)$$

$$\text{where}, \pi(x) = \prod_{k=0}^{n}(x - x_k)$$

証明の概略

$$H(x) = f(x) - P(x) - \pi(x)G(x)$$

$$\text{where}, G(x) = \frac{f(x) - P(x)}{\pi(x)}$$

とおくと、

$$H(x) = 0$$

$$H(x_k) = f(x_k) - P(x_k) - \pi(x_k)G(x_k) = 0$$

$H(x)$**は**$x, x_0, \ldots, x_n$**の n+2の点で**0**となる。**

ラグランジュ補間の誤差（つづき）

ロルの定理より

H’(z)はn+1の異なる点で0となる
H’’(z)はnの異なる点で0となる
H’’’(z)はn-1の異なる点で0となる。
…
$H^{(n+1)}(\xi)=0$なるξが$x, x_0, x_1, \ldots, x_n$の区間内に存在する。

$$H(x) = f(x) - P(x) - \pi(x)G(x)$$
$$\text{where}, G(x) = \frac{f(x) - P(x)}{\pi(x)}$$

$H^{(n+1)}(\xi) = f^{(n+1)}(\xi) - \pi^{(n+1)}(\xi)G(x)=0$
また、P(x)はn次多項式だから0となり、
$\pi^{(n+1)}(\xi)=(n+1)!$より、

$$G(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)$$

$$H(x) = f(x) - P(x) - \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)\pi(x) = 0$$

$$f(x) - P(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi)\pi(x)$$

ルンゲの現象

Science of interactions

一般の場合
n点の補間

$$P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n$$

命題: n点を通るn次多項式は唯一である。

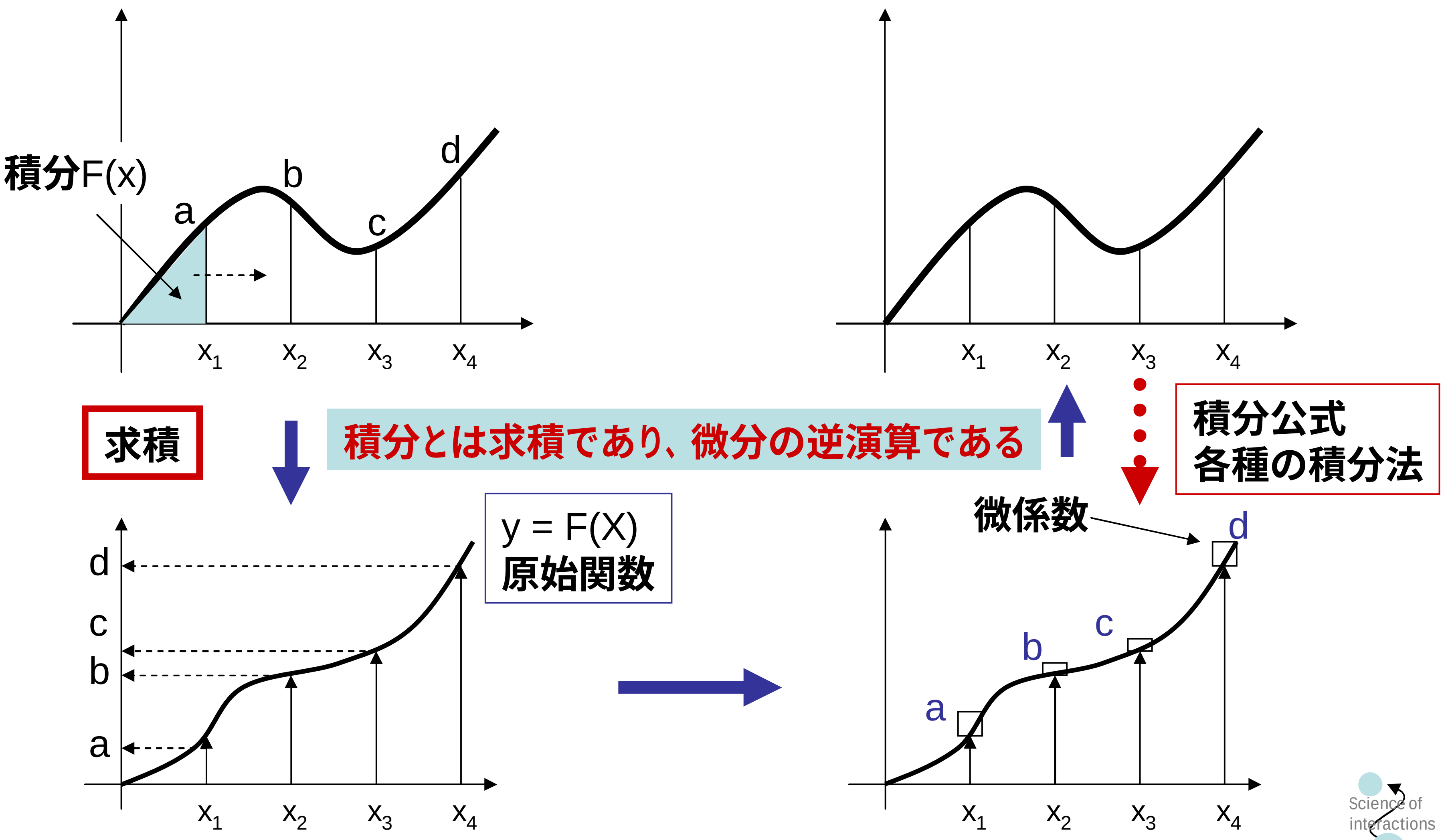
証明: P(x)以外に与えられたn+1点を通るn次以下の多項式をQ(x)とする。すると、P(x)とQ(x)の差は、D(x)=P(x) -Q(x)となり、高々n次の多項式となる。

$$D(x_k)=P(x_k)-Q(x_k)=f_k - f_k = 0,\ k=0,1,2,\ldots,n$$

となるので、D(x)はn+1の零点を持つ。しかし、代数学の基本定理より高々n次の多項式はnの零点しか持たない。よって、恒等的にD(x)=0となるから、$P(x_k)-Q(x_k)=0$より、P(x)=Q(x).

別証明：P(x)の係数行列はn次正方行列となる。この行列はVandermonde行列式となるため、正則となり係数は一意に決まる。

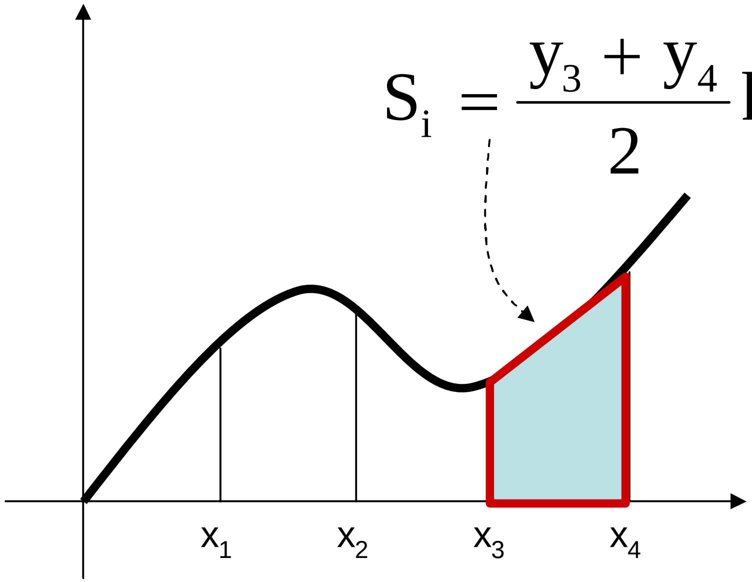
積分とはナニカ？



Science of interactions

台形公式

$$S_i = \frac{y_3 + y_4}{2} h$$



$$S = \sum_n S_i$$

$$= \left(\frac{y_0 + y_1}{2} + \frac{y_1 + y_2}{2} + \frac{y_2 + y_3}{2} + \cdots \frac{y_{n-1} + y_n}{2} \right) h$$

$$= \left(\frac{y_0}{2} + y_1 + y_2 + \cdots y_{n-1} + \frac{y_n}{2} \right) h$$

例: y = 1/x

Science of interactions

台形公式
～誤差と分割数の関係

台形公式＝折れ線補間…つまり1次のラグランジュ補間

被積分関数F(x)**に対して台形公式では**(x_k, f_k), (x_{k+1}, f_{k+1})**を結んだ折れ線の面積計算しているから、**

$$F(x) = \frac{x - x_{j+1}}{x_j - x_{j+1}} f_j + \frac{x - x_j}{x_{j+1} - x_j} f_{j+1}$$

となる。F(x)**の誤差はラグランジュ補間の誤差式より、**

$$f(x) - F(x) = \frac{f''(\xi)}{2}(x - x_j)(x - x_{j+1})$$

これより、誤差は

$$|\ f(x) - F(x)| \leq \frac{1}{2} \max_{x_j \leq \xi \leq x_{j+1}} |\ f''(\xi)| \bullet |(x - x_j)(x - x_{j+1})|$$

と評価できる。

Science of interactions

台形公式の誤差の評価

$$\left|\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx - \int_{x_j}^{x_{j+1}} F(x)dx\right| \le \int_{x_j}^{x_{j+1}} |f(x)-F(x)|\,dx$$

$$\le \frac{1}{2}\max|f''(\xi)| \int_{x_j}^{x_{j+1}} |(x-x_j)(x-x_{j+1})|\,dx$$

$$x_j = a$$
$$x_{j+1} = a+h = b$$
$$x = a+sh$$
$$h = \frac{b-a}{N}$$

とおくと

$$\int_{x_j}^{x_{j+1}} |(x-x_j)(x-x_{j+1})dx$$

$$= \int_0^1 |(a+sh-a)(a+sh-(a+h))|\,hds \ldots dx = (a+sh)ds$$

$$= \int_0^1 |s(s-1)h^3|\,ds$$

$$= \frac{h^3}{6}$$

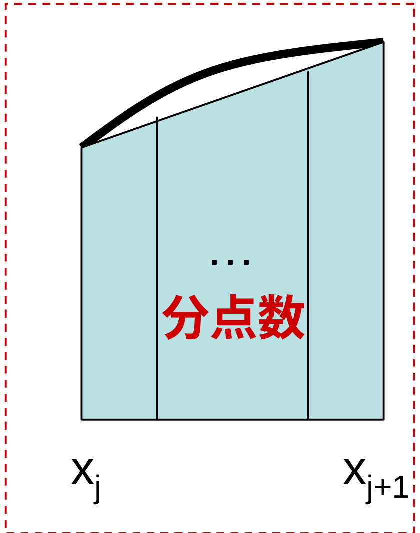
$$\left|\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx - \int_{x_j}^{x_{j+1}} F(x)dx\right| \le \int_{x_j}^{x_{j+1}} |f(x)-F(x)|\,dx$$

$$\le \frac{1}{2}\max|f''(\xi)| \int_{x_j}^{x_{j+1}} |(x-x_j)(x-x_{j+1})|\,dx = \boxed{\frac{h^3}{12}\max|f''(\xi)|}$$

Science of interactions

台形公式の誤差の評価

$$|f(x)-F(x)| \le \frac{1}{2} \max_{x_j \le \xi \le x_{j+1}} |f''(\xi)| \bullet |(x-x_j)(x-x_{j+1})|$$



例 F(x)=exp(x)

より、この積分における誤差は、

$$\left| \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx - \int_{x_j}^{x_{j+1}} F(x)dx \right| \le \int_{x_j}^{x_{j+1}} |f(x)-F(x)|\,dx$$

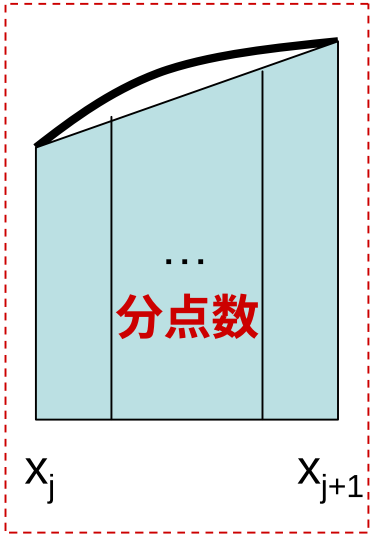
$$\le \frac{1}{2} \max |f''(\xi)| \int_{x_j}^{x_{j+1}} |(x-x_j)(x-x_{j+1})|\,dx$$

$$= \frac{h^3}{12} \max |f''(\xi)| \le \frac{1}{12} N \left(\frac{b-a}{N} \right)^3 \max |f''(\xi)|$$

$$= \frac{(b-a)^3}{12N^2} \max |f''(\xi)|$$

台形公式を用いる場合、区間の分点数をふやしていくと、誤差は1/N²に比例して小さくなる。つまり、Nを前の分点数の2倍(e.g.2,4,8,..)にしていくと効率がよくなる。

ニュートン・コーツの公式 (Newton -Cotes)



台形公式＝1次のラグランジュ補間

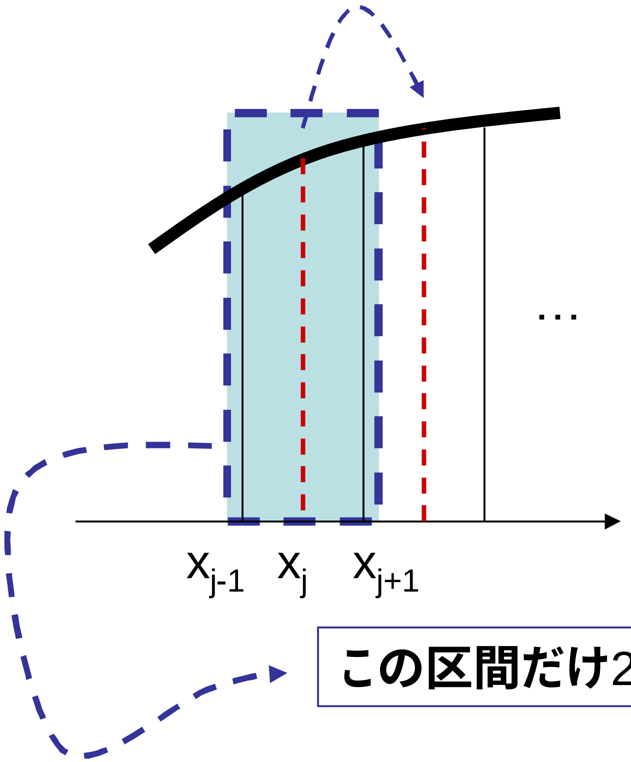
では、さらに高次のラグランジュ補間を用いたら？
→ニュートン･コーツの公式

次数	α_0	α_1	α_2	α_3	α_5	誤差
1	1/2	1/2				$O(h^3)$
2	1/3	4/3	1/3			$O(h^5)$
3	3/8	9/8	9/8	3/8		$O(h^5)$
4	14/45	64/45	24/45	64/45	14/45	$O(h^7)$

Science of interactions

シンププソンの公式

1つ飛ばし (2n) でスライドしてゆく



それらをすべて足し合わせることにより、積分を行う。
⇒**シンプソンの公式**

この区間だけ2次のラグランジュ補間を行う。

⇒ニュートン･コーツは積分区間全体をN分点するのに対し、シンプソンの公式では、2hの区間で積分区間を区切って、その部分の面積を2次のラグランジュ補間を用いて求め、足し合わせる。

シンプソンの公式

$$P_2(x) = f_0 \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f_1 \frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f_2 \frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}$$

$$\int_a^b P_2(x) \approx \alpha_0 f_0 + \alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2$$

$$\alpha_0 = \frac{1}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} \int_a^b (x-x_1)(x-x_2)dx$$

$$x_0 = a$$
$$x_1 = a + h$$
$$x_2 = a + 2h = b$$
$$x = a + sh \to dx = hds$$
$$h = \frac{b-a}{2}$$

$$\alpha_0 = \frac{1}{(a-(a+h))(a-(a+2h))} \int_0^2 (a+sh-(a+h))(a+sh-(a+2h))hds$$

$$= \frac{1}{2h^2} \int_0^2 (s-1)(s-2)h^3 ds = \frac{1}{3}h$$

$$\alpha_1 = \frac{4}{3}h, \alpha_2 = \frac{1}{3}h$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2)$$

$$= \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \cdots f_{2n})$$

例：シンプソンの公式

Science of interactions

シンプソンの公式の誤差

$$| f(x) - F(x) | \le \frac{1}{3!} \max_{x_j \le \xi \le x_{j+1}} | f^{(3)}(\xi) | \bullet | (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) |$$

$$\left| \int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx - \int_{x_j}^{x_{j+1}} F(x)dx \right| \le \int_{x_j}^{x_{j+1}} | f(x) - F(x) | dx$$

$$\le \frac{1}{3!} \max | f^{(3)}(\xi) | \int_{x_j}^{x_{j+1}} | (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2) | dx$$

$$= \frac{1}{3!} \max | f^{(3)}(\xi) | \boxed{\int_0^2 | s(s-1)(s-2) | h^4 ds}$$

ここは$h^4/2$になる

$$x_0 = a$$
$$x_1 = a + h$$
$$x_2 = a + 2h = b$$
$$x = a + sh \to dx = hds$$
$$h = \frac{b-a}{2}$$

$$= \frac{h^4}{12} \max | f^{(3)}(\xi) | \le \frac{h^4}{12} N \max | f^{(3)}(\xi) |$$

$$= \frac{(b-a)^4}{12N^3} \max | f^{(3)}(\xi) |$$

“定数の大きさ”や“不等式による”評価であるため、一般にはシンプソンの公式の方が必ず台形公式より良いとも言えない(最もよい評価でシンプソンの公式の誤差は、$O(h^5)$)。

台形公式とシンプソンの公式の関係

分点数N=2^nとする。このとき台形公式による積分近似値をT_n,シンプソンの公式による積分近似値をS_nとする。すると、T_nとS_nの間には以下の関係が成立する。

$$S_{n+1} = \frac{4}{3}T_{n+1} - \frac{1}{3}T_n$$

$$= \frac{4h}{3}\left\{\frac{1}{2}\ f(a) + \ f(a+h) + \ f(a+2h) + \cdots f(b-h) + \frac{1}{2}\ f(b)\right\}$$

$$- \frac{2h}{3}\left\{\frac{1}{2}\ f(a) + \ f(a+2h) + \ f(a+4h) + \cdots f(b-2h) + \frac{1}{2}\ f(b)\right\}$$

$$= \frac{h}{3}\left\{f(a) + 4f(a+h) + 2f(a+sh) + \cdots + 2f(b-2h) + 4f(b-h) + \ f(b)\right\}$$

$$= S_{n+1}$$

ロンバーグ積分法

分割数を N=2^n (n=0,1,2,…)とし、各nに対して台形公式によって計算された積分近似値を$T_n^{(0)}$とする。そして、以下の漸化式により $T_n^{(k)}$ (k=1,2,3,…)を計算する。

$$
\begin{array}{llllll}
T_0^{(0)} & & & & & \\
T_1^{(0)} & T_1^{(1)} & & & & \\
T_2^{(0)} & T_2^{(1)} & T_2^{(2)} & & & \\
\vdots & & & & & \\
T_{n-1}^{(0)} & T_{n-1}^{(1)} & T_{n-1}^{(2)} & \cdots & T_{n-1}^{(k-1)} & \\
T_n^{(0)} & T_n^{(1)} & T_n^{(1)} & \cdots & T_n^{(2)} & T_n^{(k)}
\end{array}
$$

$$
T_n^{(k)} = \frac{4^k T_n^{(k-1)} - T_{n-1}^{(k-1)}}{4^k - 1}
$$

チェックテスト（第２回）の説明

- 配点２０点（満点）
- 時間６０分
- 持ち込み不可・再試験はなし
- 欠席の場合は零点と評価し最終試験の際に調整（次のスライドで詳説）
- 出題範囲は以下の通り；
  - 逐次法、ニュートン法
    - Aitkenなどの加速法は出題範囲に含まない
  - 補間と誤差評価
    - 最小２乗法は出題範囲に含まない
  - 数値積分