

数値解析と超函数論

京大 数解研 森 正武

補間、数値微分、数値積分、フーリエ解析のような数値解析の基礎的な問題を超函数論の立場からながめてみると、統一的な取扱いが可能になる上に、誤差評価などにおいて実用上有効な方法を得ることができる。以下で扱うのはすべて1変数の問題であって、実際には *Cauchy* の積分公式だけから導けるものである。

§ 1. 数値積分 (1) Gauss 型積分公式

$$(1-1) \quad I = \int_a^b f(x) w(x) dx$$

この積分を、数値的に和

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

で近似する。問題は、この公式の分点 a_k と、そこでの重み A_k 、合計 $2n$ 個のパラメータを決定し、その誤差を評価することである。 f は $[a, b]$ を含む適当な複素領域で正則であると仮定する。

$$(1-3) \quad f(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{f(z)}{z-x} dz$$

を(1-1)に代入すれば

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

$$(1-5) \quad \Psi(z) = \int_a^b \frac{w(x)}{z-x} dx$$

が得られる。

$$(1-6) \quad g(x) = \begin{cases} w(x) & ; \quad a < x < b \\ 0 & ; \quad x < a, \quad b < x \end{cases}$$

とおくと、 $-\frac{1}{2\pi i} \Psi(z)$ は超函数 $g(x)$ の定義函数である。(1-3)

を(1-2)に代入すれば

$$(1-7) \quad I_A = \frac{1}{2\pi i} \oint \Psi_A(z) f(z) dz$$

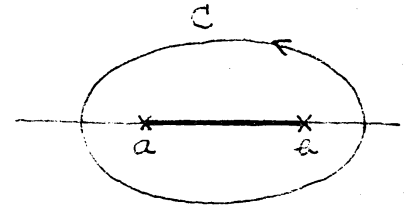
$$(1-8) \quad \Psi_A(z) = \sum_{k=1}^n \frac{A_k}{z-a_k} = \frac{\overset{\text{高々}}{\text{n-1次多項式}} G_n(z)}{\underset{\text{n次多項式}}{F_n(z)}}$$

となる。近似積分による誤差は次式で与えられる。

$$(1-9) \quad \Delta I = I - I_A = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \Phi(z) f(z) dz$$

$$(1-10) \quad \Phi(z) = \Psi(z) - \Psi_A(z)$$

$\Phi(z)$ を近似積分公式 I_A の誤差の特性函数と呼ぶ。これは積分誤差を与える超函数に対応している。 I_A が良い近似公式であるためには $\Phi(z)$ が“小さい”必要がある。したがって、 I を I_A で近似する問題が、超越函数 $F(x)$ を有理函数 $G_n(x)$ で近似する問



※ 1 図
(1-4) の積分路 C

題に置きかえられる。これを超函数で書けば

$$(1-11) \quad g(x) \sim \sum_{k=1}^n A_k \delta(x-a_k)$$

数値解析では、この近似の問題に対して、正則函数として多項式の列 $\{1, z, z^2, \dots, z^{2n-1}\}$ をとり、weak な近似を行う。

$$(1-12) \quad \frac{1}{2\pi i} \oint_C \Phi(z) z^m dz = 0, \quad m=0, 1, \dots, 2n-1$$

この操作は、 $\Phi(z)$ を $1/z$ のべきで展開し $1/z^{2n}$ までの係数を 0 にして、 z 大なるところで

$$(1-13) \quad \Phi(z) = O(z^{-2n-1})$$

とすることに等しい。すなわち、 $z=\infty$ の近傍において超越函数 $\Psi(z)$ を有理函数 $\Psi_A(z)$ で z^{-2n} まで近似する問題になる。これを実行するためには、 $\Psi(z)$ の連分数展開を n 項で打ち切ればよい。こうして得られる公式が Gauss 型公式である。

[例] Legendre-Gauss 公式 $[a, b] = [-1, 1], \quad w(z) = 1$

$$(1-14) \quad \Psi(z) = \log \frac{z+1}{z-1} = \frac{2}{z - \frac{1^2}{3z - \frac{2^2}{5z - \frac{3^2}{7z - \dots}}}}$$

これを n 項目で打ち切った有理函数を $\Psi_A(z)$ とおいて $\Phi(z) = \Psi(z) - \Psi_A(z)$ を計算すると、 z 大なるところで

$$(1-15) \quad \Phi(z) = \frac{2^{2n+1}}{2n+1} \left\{ \frac{(n!)^2}{(2n)!} \right\}^2 z^{-2n-1} + \dots = O(z^{-2n-1})$$

となって、確かに (1-13) を満足する。

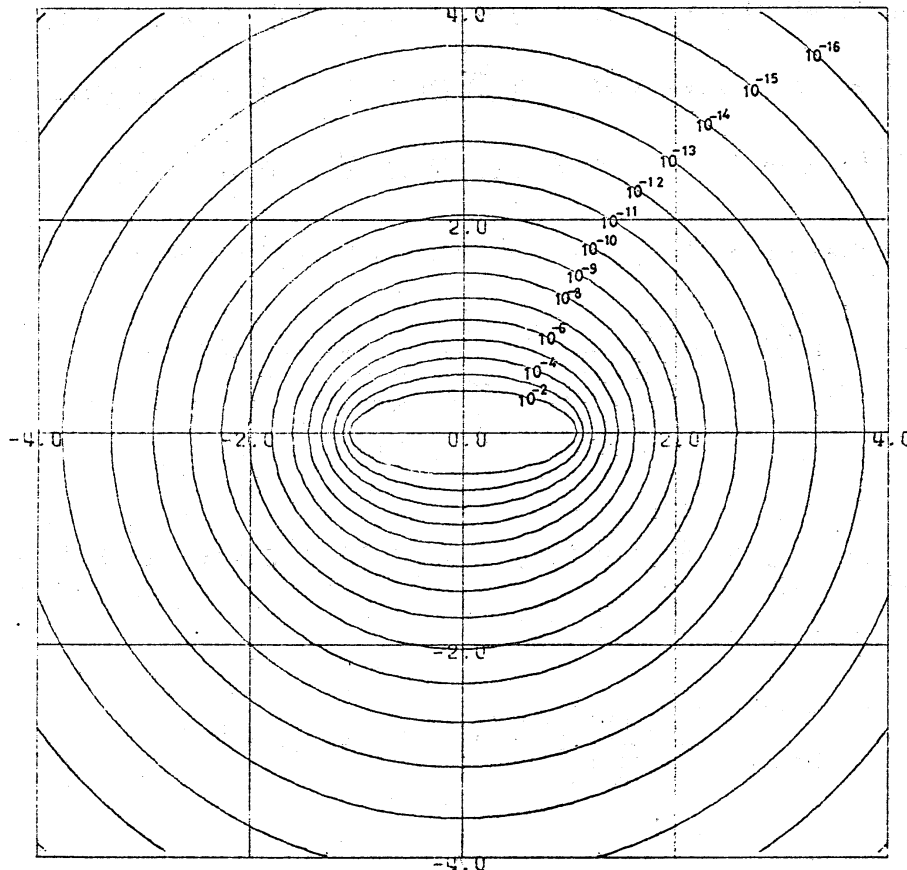
有理函数 $\Psi_n(z)$ の分母の多項式 $F_n(z)$ は

$$(1-16) \quad F_{mn} = \int_a^b F_m(x) F_n(x) w(x) dx = 0, \quad m \neq n$$

を満足する直交多項式である。なぜなら $m < n$ とすると

$$\begin{aligned} F_{mn} &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C F_m(z) F_n(z) \Psi(z) dz \\ &= \frac{1}{2\pi i} \oint_C F_m(z) F_n(z) \Phi(z) dz + \frac{1}{2\pi i} \oint_C F_m(z) G_n(z) dz \end{aligned}$$

が 1 項の integrand は $O(z^{m+n-Ln-1}) =$ 高々 $O(z^{-2})$ であり、 n 2 項の integrand は多項式である。したがって $F_{mn} = 0$ になる。



オ 2 図
Legendre-Gauss
公式 ($n=8$) の
 $|\Psi(z)|$ の等高線図

上述の [例] では、 $F_n(z)$ は n 次 Legendre 多項式 $P_n(z)$ であり

$$(1-17) \quad \Phi(z) = 2Q_n(z)/P_n(z) \quad (= O(z^{-2n-1}), \quad z \rightarrow \infty)$$

また (1-16) の直交関係は

$$(1-18) \quad F_{mn} = \frac{1}{2\pi i} \oint_C F_m(z) \overline{F_n(z)} dz \quad \left(= \frac{1}{2\pi i} \oint_C P_m(z) Q_n(z) dz \right) = 0, \quad m \neq n$$

$$(1-19) \quad \overline{F_n(z)} = \int_a^b \frac{F_n(x)}{z-x} w(x) dx \quad \left(= \int_{-1}^1 \frac{P_n(x)}{z-x} dx = Q_n(z) \right)$$

$n=8$ の場合の Legendre-Gauss 公式の $|\Phi(z)|$ の等高線図を $\circ 2$ 図に示す。

[例] $\int_{-1}^1 \frac{dx}{1+x^2}$ を 8 点公式で計算すると、誤差は (1-9) より

$$(1-20) \quad |\Delta I| = \left| \frac{1}{2\pi i} \oint_C \Phi(z) f(z) dz \right| \leq |\Phi(i) \frac{1}{2i}| + |\Phi(-i) \frac{-1}{2i}| = |\Phi(i)| \simeq 2 \times 10^{-6}$$

実際の誤差は 1.91×10^{-6} 。

§2. 数値積分 (2)

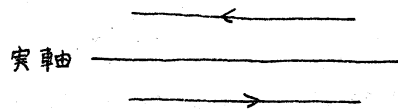
$$(2-1) \quad I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$$

に対する最適公式を求める問題。 $f(z)$ には適当な条件を付しておく。

$$(2-2) \quad \Psi(z) = \begin{cases} -\pi i & ; \Im_m z > 0 \\ \pi i & ; \Im_m z < 0 \end{cases}$$

とすれば

$$(2-3) \quad I = \frac{1}{2\pi i} \int_C \Psi(z) f(z) dz$$



$\circ 3$ 図

(2-3) の積分路 C

積分路 C は $\circ 3$ 図に示す。

(2-1) に台形則を適用すると

$$(2-4) \quad I_A = \sum_{k=-\infty}^{\infty} h f(kh)$$

これに対しては

$$(2-5) \quad \Psi_A(z) = \pi \cot \pi \frac{z}{h}$$

が対応する。

分点密度一定の条件の下で、 $|\Phi(z)|$ の値が実軸から離れるにつれて最も急速に 0 に近づくものを最適公式と定義すると

(2-4) が最適公式である。なぜなら、一般の公式

$$(2-6) \quad I_A = \sum_{k=-\infty}^{\infty} A_k f(a_k)$$

に対して

$$(2-7) \quad \Psi_A(z) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} A_k \left(\frac{1}{z-a_k} + \frac{1}{a_k} \right)$$

とおくと、誤差は次式で与えられる。

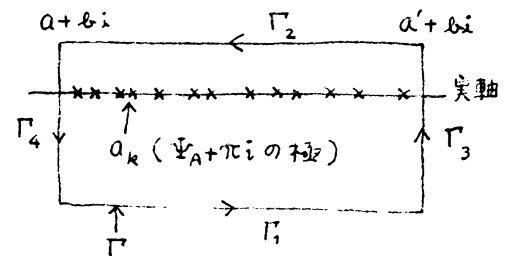
$$(2-8) \quad \Delta I = \frac{1}{2\pi i} \int_C \Phi(z) f(z) dz$$

$$(2-9) \quad \Phi(z) = \begin{cases} -\pi i - \Psi_A(z) & ; \Im_m z > 0 \\ \pi i - \Psi_A(z) & ; \Im_m z < 0 \end{cases}$$

このとき次の積分を考える。

$$(2-10) \quad J = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} \frac{\Psi'_A(z) dz}{\Psi_A(z) + \pi i} = n - m$$

積分路 Γ は第 4 図に示す。 n は Γ 内にある $\Psi_A(z) + \pi i$ の極の数、 m は Γ 内の零点の数である。 n は十分大



第 4 図

(2-10) の積分路 Γ

とすると、 $\Gamma_1, \Gamma_3, \Gamma_4$ 上の積分は Γ_2 上の積分に比較して無視できる。

$$\begin{aligned}
 (2-11) \quad J &= \frac{-1}{2\pi i} \int_{\Gamma_2} \frac{\Psi_A'(z) dz}{\Psi_A(z) + \pi i} = \frac{-1}{2\pi i} \int_{\Gamma_2} \frac{d}{dz} \log \{ \Psi_A(z) + \pi i \} \\
 &= \int_{\Gamma_2} \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial y} \log | \Psi_A(z) + \pi i | dz = \int_{a+bi}^{a'+b'i} \frac{-1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial y} \log | \Phi(z) | dz \\
 &= n - m \leq n
 \end{aligned}$$

$J/(a'-a)$ は Γ_2 に沿う $-\frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial y} \log | \Phi(z) |$ の平均値、すなわち特性函数の exponent の平均値であり、これが最大のものが最適公式である。 J の最大値は n であるが、これは $m=0$ のとき、すなわち $\Phi(z) = -\pi i - \Psi_A(z)$ が Γ 内に零点を持たないとき実現される。一方 (2-5) は Γ 内に零点を持たない。したがって (2-4) が最適公式である。

(2-4) に対する特性函数 $\Phi(z)$ は

$$(2-12) \quad | \Phi(z) | \simeq 2\pi \exp(-2\pi |g_m z| / h), \quad |g_m z| \gg h$$

[例] $\int_{-y}^y e^{-x^2} dx$ を $h=0.5$ で台形則で積分する。

$$(2-13) \quad | \Phi(z) f(z) | \simeq 2\pi \exp\left(-\frac{\pi^2}{h^2}\right) \exp(-x^2) \exp\left(y - \frac{2\pi}{h}\right)^2, \quad z = x + iy$$

鞍点が点 $z = \pm 2\pi i / h$ に現われるから、ここを積分路 C が通るようになると

$$(2-14) \quad | \Delta I | \simeq 2\sqrt{\pi} \exp\left(-\frac{\pi^2}{h^2}\right) \simeq 2.53 \times 10^{-17} \quad (h=0.5)$$

実験値の誤差は 2.53×10^{-17} である。Simpson 則だと 10^{-5} 程度の精度しか得られない。

§ 3. 数値積分 (3) 周期函数 $F(x)$ の近似積分公式

$$(3-1) \quad I = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} F(x) dx$$

を近似する最適な公式

$$(3-2) \quad I_A = \sum_{k=0}^{N-1} A_k F(x_k)$$

を求める問題。 $\zeta = e^{ix}$ とおくと

$$(3-3) \quad I = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\zeta|=1} f(\zeta) \frac{1}{\zeta} d\zeta, \quad f(e^{ix}) = F(x)$$

$$= \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_1} \Psi(z) f(z) dz + \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_2} \Psi(z) f(z) dz$$

$$(3-4) \quad \Psi(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\zeta|=1} \frac{1}{z-\zeta} \frac{1}{\zeta} d\zeta = \begin{cases} 0 & ; |z| < 1 \\ \frac{1}{z} & ; |z| > 1 \end{cases}$$

積分路 Γ_1, Γ_2 はオ 5 図に示す。(3-2) に対応して

$$(3-5) \quad \Psi_A(z) = \sum_{k=0}^{N-1} \frac{A_k}{z-a_k}, \quad a_k = e^{ix_k}$$

結局、単位円周上の超函数の近似の問題になる。

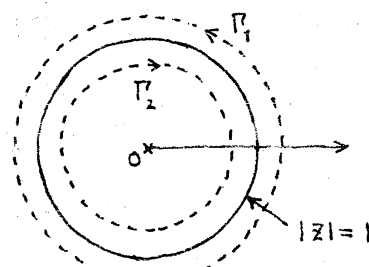
$$(3-6) \quad \frac{1}{\zeta} \sim \sum_{k=0}^{N-1} A_k \delta(\zeta - a_k)$$

正則函数の列として $\{z^{N-1}, z^{N-2}, \dots, z, 1, z^{-1}, \dots, z^{-N+1}\}$ をとり

$$(3-7) \quad \Phi(z) = \Psi(z) - \Psi_A(z)$$

を 0 に近づける。すると次の非線型連立方程式が得られる。

$$(3-8) \quad \sum_{k=0}^{N-1} A_k a_k^m = \delta_m^0, \quad m = N-1, N-2, \dots, -N+1$$



オ 5 図
(3-3) の積分路 Γ_1, Γ_2

対称性から、あらかじめ $a_0 = 1$ ときめておくと、この方程式の解は次のように得られる。

$$(3-9) \quad a_k = e^{\frac{2\pi k}{N}i}, \quad A_k = \frac{1}{N} \quad ; k=0, 1, 2, \dots, N-1$$

したがって、台形則

$$(3-10) \quad I_A = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f(e^{\frac{2\pi k}{N}i}) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} F\left(\frac{2\pi k}{N}\right)$$

が最適の公式である。このときの誤差は

$$(3-11) \quad \Delta I = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_1} \frac{z^{N-1}}{1-z^N} f(z) dz - \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma_2} \frac{z^{N-1}}{1-z^N} f(z) dz$$

(cf. (2-12))

$$[例] \quad \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{dx}{2+\cos x} = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$(0, 2\pi)$ を 16 等分して計算すると、誤差は、台形則で 8.2×10^{-10} , Simpson 則で 1.0×10^{-5} , Gauss 公式で 1.6×10^{-6} 。

§4. 補間多項式

区間 (a, b) 内の n 点 $a_1, a_2, \dots, a_n$ で値が与えられた函数 $f(x)$ を、 $n-1$ 次多項式で補間する問題。

$$(4-1) \quad f(x) \simeq \sum_{k=1}^n A_k(x) f(a_k)$$

これに対応する誤差の特性函数は次式で与えられる。

$$(4-2) \quad \Phi(z, x) = \Psi(z, x) - \Psi_A(z, x)$$

$$(4-3) \quad \Psi(z, x) = \frac{1}{z-x}$$

$$(4-4) \quad \Psi_n(z, x) = \sum_{k=1}^n \frac{A_k(x)}{z - a_k}$$

$$(4-5) \quad \delta(\xi - x) \sim \sum_{k=1}^n A_k \delta(\xi - a_k)$$

正則函数として多項式 $\{1, z, z^2, \dots, z^{n-1}\}$ を選ぶと、 $z = \infty$ の近傍における有理函数近似の問題になり、これから Lagrange の補間多項式が得られる((4-1)の右辺)。

$$(4-6) \quad \Phi(z, x) = \frac{F_n(x)}{F_n(z)(z-x)}$$

$$(4-7) \quad F_n(z) = (z - a_1)(z - a_2) \dots (z - a_n)$$

誤差は

$$(4-8) \quad \varepsilon(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint \Phi(z, x) f(z) dz$$

§ 5. 最小二乗近似多項式

$$(5-1) \quad J = \int_a^b \left\{ f(x) - \sum_{k=0}^{n-1} a_k x^k \right\}^2 w(x) dx$$

$J \rightarrow \min.$ になるように a_k を決定する問題。

$$(5-2) \quad \varepsilon(x) = f(x) - \sum_{k=0}^{n-1} a_k x^k$$

$$(5-3) \quad E(z) = \int_a^b \frac{\varepsilon(x)}{z-x} w(x) dx$$

とすると、 J は

$$(5-4) \quad J = \frac{1}{2\pi i} \oint E(z) \varepsilon(z) dz \quad (\text{cf. (1-18)})$$

と表わされる。 f に対応する正則函数列として $\{1, z, \dots, z^{n-1}\}$ をとって J を0に近づける。これは $E(z)$ の $1/z$ 展開で最初の n 項を0と等置することに等しい。これから normal equation (5-5) が得られる。

$$(5-5) \quad \int_a^b E(z) z^k dz = 0, \quad k=0, 1, \dots, n-1$$

誤差は

$$(5-6) \quad J = \frac{1}{2\pi i} \oint \left(\frac{c}{z^{n+1}} + \dots \right) f(z) dz$$

以上