

数式処理による数値積分

工学院大数学 牧野潔夫

I. はじめに

理学部以上に工学部では数式処理は普及していない。その原因はいくつかある。以下に考えられるものをあげると

1. 数式処理の教育があまりなされていない。
2. 数式処理のための良い例題集がほとんどない。
3. 工学系で扱う問題のほとんどは数式処理を必要としない。
4. 数式処理言語はむづかしいと思われる。
5. 数式処理は遅いと思われる。

1と2, 3と4は互に関連がある。従って、良い例題を揃えて、できる範囲で学生に教育をしていくのが普及の第一歩であると考えられる。筆者は数年前から工学部の二年生に整数論のやさしい問題を数式処理(おもにREDUCE)で扱い教育してきた([3])。本年度は四年生の卒業研究も担当することになりそこで扱う数学の素材と次の事に留意して決定した。

1. 数学のある分野の体系的理論であるもの。但し教育
(卒業研究)であるのでよく知られていて易しいもの。

2. 工学部の学生になじみのある分野

微分積分学, 線型代数学, 数値計算, 微分方程式,
Fourier 変換, Laplace 変換, 巾級数, ベクトル
解析

3. 数値処理言語で扱うと面倒であるが数式処理言語で扱
うと簡単になるもの

多項式の取り扱い (G.C.D, L.C.M, ...)

有理式の取り扱い (四則, ...)

記号微積分 (代数方程式の重根判定)

行列の取り扱い (四則, 行列式, 固有多項式, ...)

このような観点から卒業研究では「直交多項式と Gauss 型積
分」に決定した。その理由は次のとおりである。

1. 直交多項式は多項式からなる、重みのついた積分を内積
とする、計量線型空間の正規直交基底として定義される
が実際には漸化式で計算できる。多項式の漸化式は数
式処理では楽に扱える。

2. Gauss 型積分にあらわれる直交多項式の根の性質はよく
知られており Durand-Kerner 法以外にも Graeffe の方法
や (初期近似値をうまく与えた) Newton 法で全根を

を求めることができ多種の代数方程式の解法を学ぶことができる。とくに Graeffe の方法は Fortran や C では後で述べるようにプログラムも複雑になるうえ、オーバーフロー、アンダーフローになり易いが、数式処理ではこの困難は全くない。

3. Gauss 型の積分は直交多項式の根より計算される重みとそこでの関数の値の積和で求められるが、与えられた関数の Lagrange 近似多項式の積分によっても計算される。数式処理ではこの近似多項式の適当な点での値やその係数のみでなく多項式そのものが得られる。

4. 1. での直交多項式の生成, 2. での多項式の根の近似計算, 3 での Lagrange 近似多項式の生成 などが数式処理 (REDUCE) では独立に用いることができる。

即ち数式処理が他の言語と較べ優れていることが明瞭になるような計算 (プログラム) を扱うことにした。

II. 直交多項式と積分

V を x の多項式からなる線型空間とし V に次の内積を入れる。

$$(f, g) = \int_a^b f(x) \cdot g(x) \omega(x) dx \quad (1)$$

($a = -\infty$, $b = \infty$ でもよい) ただし $\omega(x)$ は $[a, b]$ で正の値をとる連続関数である。このとき V の基底 $\{1, x, \dots, x^n, \dots\}$ を Schmidt の直交化で直交化した正規直交基底を $\{\phi_0, \phi_1, \dots, \phi_n, \dots\}$ ($\deg \phi_n = n$) とする。

定理 1.

$$\phi_n = k_n x^n + (\text{n-1 次以下の部分}) \quad (2)$$

とすると ϕ_n は次の漸化式を満足する。

$$\phi_{n+1} - (A_n x + B_n) \phi_n + C_n \phi_{n-1} = 0 \quad (3)$$

($n = 0, 1, \dots$) ただし $C_0 = 0$, $A_n = k_{n+1}/k_n$, $C_n = A_n/A_{n-1}$ ($n \geq 1$) である。

証明

$\phi_{n+1} - A_n x \phi_n$ は A_n の定義より n 次式だから $\phi_{n+1} - A_n x \phi_n = \sum_{k=0}^n \alpha_k \phi_k$ とかける。これと ϕ_i との内積を考えると $\alpha_i = -A_n (x \phi_n, \phi_i) = -A_n (\phi_n, x \phi_i) = 0$ ($0 \leq i \leq n-2$). 従って $\alpha_0 = \alpha_1 = \dots = \alpha_{n-2} = 0$

ここで $\alpha_n = B_n$, $\alpha_{n-1} = -C_n$ とおくと (2) が得られる。

更に $C_n = -\alpha_{n-1} = A_{n-1} (x \phi_n, \phi_{n-1}) = A_{n-1} (\phi_n, x \phi_{n-1})$ であり

$$x \phi_{n-1} = k_{n-1} x^n + \dots = (k_{n-1}/k_n) \cdot (k_n x^n + \dots)$$

$$= \phi_n / A_n + (\text{n-1 次以下の部分})$$

であるから $C_n = A_{n-1} (\phi_n, x \phi_{n-1}) = (A_{n-1}/A_n) (\phi_n, \phi_n) = A_{n-1}/A_n$ となる。||

定理 2.

$\phi_n(x)=0$ は (a, b) に n 個の単根をもつ。

証明

$\phi_n(x)=0$ の (a, b) にある根で $\phi_n(x)$ の符号が変化するもの、即ち $\phi_n(x)=0$ の単根もしくは奇数重根を $x_1, x_2, \dots, x_m$ とする (重根は 1 つに数える)。もし $m=n$ なら定理は示された。 $m < n$ とする。 $p(x) = \prod_{i=1}^m (x-x_i)$ とおくと $\phi_n(x)p(x)$ は (a, b) で常に同符号であるから

$$0 \neq \int_a^b p(x) \phi_n(x) \omega(x) dx = (p, \phi_n)$$

一方 $\deg p(x) < n$ より $(p, \phi_n) = 0$ 。これは上の式と矛盾する。 ||

定理 3.

$K_n(x, y) = \sum_{i=0}^n \phi_i(x) \phi_i(y)$ とおくと

$$K_n(x, y) = \frac{k_n}{k_{n+1}} \left[\frac{\phi_n(y) \phi_{n+1}(x) - \phi_n(x) \phi_{n+1}(y)}{x-y} \right] \quad (4)$$

となる。

証明

$\phi_0(x) = k_0$, $\phi_1(x) = k_1 x + \alpha$ とおくと $0 = (\phi_0, \phi_1) = \int_a^b (k_0 x + \alpha) \omega(x) dx = \alpha \int_a^b \omega(x) dx + k_1 \int_a^b x \omega(x) dx$
 であり $1 = (\phi_0, \phi_0) = k_0^2 \int_a^b \omega(x) dx$ であるから
 $\alpha = -k_0^2 k_1 \int_a^b x \omega(x) dx$ となり $\phi_1(x) = k_1 x - k_0^2 k_1 \int_a^b x \omega(x) dx$

故に $K_0(x, y)$ の定義より

$$\begin{aligned} K_0(x, y) &= \phi_0^2(x) \\ &= k_0^2 = \frac{k_0}{k_1} [k_0 k_1 (x-y) / (x-y)] \\ &= \frac{k_0}{k_1} \left[\frac{\phi_0(y)\phi_1(x) - \phi_0(x)\phi_1(y)}{x-y} \right] \end{aligned}$$

となり $n=0$ のとき成立する。

$n \geq 1$ のとき定理 1 より

$$\begin{aligned} & \frac{k_n}{k_{n+1}} \left[\frac{\phi_n(y)\phi_{n+1}(x) - \phi_n(x)\phi_{n+1}(y)}{x-y} \right] \\ &= \frac{k_n}{k_{n+1}} \left[\phi_n(y) \{ (A_n x + B_n) \phi_n(x) + C_n \phi_{n-1}(x) \} \right. \\ & \quad \left. - \phi_n(x) \{ (A_n y + B_n) \phi_n(y) + C_n \phi_{n-1}(y) \} \right] / (x-y) \\ &= \frac{k_n}{k_{n+1}} A_n \phi_n(x) \phi_n(y) + \frac{k_n}{k_{n+1}} \left[\frac{\phi_{n+1}(y)\phi_n(y) - \phi_{n+1}(x)\phi_n(x)}{x-y} \right] \end{aligned}$$

となり $n-1$ まで定理が成立したとすれば $A_n = k_{n+1}/k_n$ であるから上の式より n のときも成立する。||

以下 n を一つ固定し $\phi_n(x) = 0$ の根を $x_1, x_2, \dots, x_n$ とする。

定理 3.

$$f \in C^0[a, b] \text{ とする。 } F(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) \frac{\phi_n(x)}{(x-x_k) \phi_n'(x_k)}$$

とおくと $F(x)$ は $n-1$ 次の多項式で $F(x_i) = f(x_i)$
 $(i=1, 2, \dots, n)$ である。

証明

$\phi_n(x) = 0$ は各 x_k を根にもつから $\phi_n(x)/(x-x_k)$
 は $n-1$ 次の多項式である。従って $F(x)$ も $n-1$ 次
 の多項式である。更に

$$\lim_{x \rightarrow x_i} \frac{\phi_n(x)}{(x-x_k)} = \begin{cases} \phi_n'(x_i) & (i=k) \\ 0 & (i \neq k) \end{cases}$$

であるから

$$\begin{aligned} F(x_i) &= \lim_{x \rightarrow x_i} F(x) = \sum_{k=1}^n \lim_{x \rightarrow x_i} f(x_k) \frac{\phi_n(x)}{(x-x_k)\phi_n'(x_k)} \\ &= \sum_{k=1}^n f(x_k) \delta_{ik} \phi_n'(x_k) / \phi_n'(x_k) \\ &= f(x_i) \end{aligned}$$

これで定理が示された。 ||

$f(x) \in C^0(a, b)$ を $2n-1$ 次の多項式とすると
 $Y(x) = (F(x) - f(x))/\phi_n(x)$ は、分子が $x_1, \dots, x_n$ で
 0 になるから、 $n-1$ 次の多項式である。又

$$\begin{aligned} f(x) &= F(x) - Y(x)\phi_n(x) \\ &= \sum_{k=1}^n f(x_k) \frac{\phi_n(x)}{(x-x_k)\phi_n'(x_k)} - Y(x)\phi_n(x) \end{aligned}$$

となる。従って、

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) w(x) dx &= \sum_{k=0}^n f(x_k) \int_a^b w(x) \frac{\phi_n(x)}{(x-x_k) \phi_n'(x_k)} dx \\ &\quad - \int_a^b r(x) \phi_n(x) w(x) dx \end{aligned}$$

$$\int_a^b w(x) \phi_n(x) / \{(x-x_k) \phi_n'(x_k)\} dx = \lambda_k \quad \text{とおくと}$$

$$\deg r(x) \leq n-1 \quad \text{であるから} \quad \int_a^b r(x) \phi_n(x) w(x) dx = (r, \phi_n) = 0 \quad \text{であるから}$$

$$\int_a^b f(x) w(x) dx = \sum_{k=0}^n \lambda_k f(x_k) \quad (5)$$

となる。 λ_k の別な計算法を考える。

定理 4.

$$\lambda_k = \int_a^b w(x) \frac{\phi_n(x)}{(x-x_k) \phi_n'(x_k)} dx \quad (6)$$

とすると

$$\lambda_k = - \frac{k_{n+1}}{k_n} \frac{1}{\phi_n'(x_k) \phi_{n+1}(x_k)} \quad (7)$$

$$= \frac{1}{\sum_{j=1}^{n-1} \phi_j^2(x_k)} \quad (8)$$

$$= \int_a^b w(x) \left[\frac{\phi_n(x)}{(x-x_k) \phi_n'(x_k)} \right]^2 dx \quad (9)$$

証明

$$\phi_n(x_k) = 0 \text{ により}$$

$$K_n(x, x_k) = \sum_{j=0}^{n-1} \phi_j(x) \phi_j(x_k)$$

$$= \frac{k_n}{k_{n+1}} \left[\frac{-\phi_n(x) \phi_{n+1}(x_k)}{x - x_k} \right]$$

$$\text{故に} \quad \frac{\phi_n(x)}{x - x_k} = \frac{-k_{n+1} K_n(x, x_k)}{k_n \phi_{n+1}(x_k)}$$

従ひ、

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \int_a^b w(x) \frac{\phi_n(x)}{(x-x_k) \phi_n'(x_k)} dx \\ &= \frac{-k_{n+1}}{k_n \phi_n'(x_k) \phi_{n+1}(x_k)} \int_a^b w(x) K_n(x, x_k) dx \end{aligned}$$

$$\text{一般に } \deg p(x) \leq n \text{ のとき } p(x) = \sum_{k=1}^n (p, \phi_k) \phi_k(x)$$

とかけらるから

$$(p, K_n(\cdot, y)) = (p, \sum_{k=1}^n \phi_k(y) \phi_k)$$

$$= \sum_{k=1}^n (p, \phi_k) \phi_k(y)$$

$$= p(y)$$

$p(x)=1$ のとき $(1, K_n(\cdot, y)) = 1$ となるから 任意の y に対して $\int_a^b w(x) K_n(x, y) dx = 1$ 。 $y = x_k$ とおくと上の式より

$$\lambda_k = - \frac{k_{n+1}}{k_n \phi_n'(x_k) \phi_{n+1}(x_k)}$$

$$\begin{aligned} \text{更に } \sum_{j=1}^n \phi_j^2(x_k) &= K_n(x_k, x_k) \\ &= \lim_{x \rightarrow x_k} K_n(x, x_k) \\ &= - \frac{k_n}{k_{n+1}} \phi_n'(x_k) \phi_{n+1}(x_k) \end{aligned}$$

これは λ_k^{-1} であるから $\phi_n(x_k) = 0$ を用いると

$$\lambda_k = 1 / \left(\sum_{j=1}^{n-1} \phi_j^2(x_k) \right)$$

最後の式であるが $f_k(x) = [\phi_n(x) / \{(x - x_k) \phi_n'(x_k)\}]^2$ は $2n-2$ 次式であるから

$$\int_a^b w(x) f_k(x) dx = \sum_{j=1}^n \lambda_j f_k(x_j)$$

となる。一方 $f_k(x_j) = \lim_{x \rightarrow x_j} f_k(x) = \delta_{kj}$ より

$$\lambda_k = \int_a^b w(x) f_k(x) dx$$

となりこれで定理が示された。||

多項式でない $f \in C^0(a, b)$ に対し $\int_a^b f(x) w(x) dx$ を $\sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k)$ で近似する。これが Gauss 型の定積分法である。これは次の様にも考えられる。

$$\rho_k(x) = \phi_n(x) / \{(x - x_k) \phi_n'(x_k)\}$$

とおくと $\rho_k(x)$ は x の $n-1$ 次の多項式である。

$f \in C^0(a, b)$ に対し

$$F(x) = \sum_{k=1}^n f(x_k) \rho_k(x)$$

とおくと定理3より $F(x)$ は $f(x)$ と $x = x_i$ ($1 \leq i \leq n$) で一致する Lagrange 補完である。これを (a, b) で積分すると (6) より $\sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k)$ となる。即ち

$$f \in C^0(a, b) \xrightarrow{\text{Lagrange 補完}} F(x)$$

$$\xrightarrow{\int_a^b} \sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k) : \text{Gauss 型積分}$$

となつてゐる。又 $\int_a^b f(x) w(x) dx$ と $\sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k)$

との誤差は $f^{(n)}(\eta) / (k_n n!)$ ($\exists \eta \in (a, b)$) となることが示される。

$$\sigma_k(x) = \left[1 - (x - x_k) \frac{\phi_n''(x_k)}{\phi_n'(x_k)} \right] \rho_k^2(x),$$

$$\tau_k(x) = (x - x_k) \rho_k^2(x)$$

とおく。 $f \in C^1(a, b)$ に対し

$$G(x) = \sum_{k=1}^n \left\{ f(x_k) \sigma_k(x) + f'(x_k) \tau_k(x) \right\}$$

とおくと $G(x_i) = f(x_i)$, $G'(x_i) = f'(x_i)$ ($1 \leq i \leq n$)

が成立し更に $G(x)$ は x の $2n-1$ 次の多項式である

ことがわかる。つまり $G(x)$ は $f(x)$ の $x = x_i$ ($1 \leq i \leq n$)

で一致する Hermite 補完である。これは (a, b) で積分

すると (9) より $\sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k)$ となることが示される。

即ち

$$f \in C^1(a, b) \xrightarrow{\text{Hermite 補完}} G(x)$$

$$\xrightarrow{\int_a^b} \sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k) : \text{Gauss 型積分}$$

となっている。

つまり与えられた関数 f を直交多項式の零点で Lagrange
又は Hermite 補完して得られた多項式を (a, b) で積分
すると Gauss の積分公式が得られることになる。

Ⅲ. 実際の計算

Ⅱの理論のもとに与えられた関数 $f(x)$ に対し積分

$\int_a^b f(x) \omega(x) dx$ を求めるには以下の順序で計算を行えばよい。

- i) 直交多項式 $\phi_n(x)$ を生成する。
- ii) $\phi_n(x) = 0$ の零点 $x_1, x_2, \dots, x_n$ を求める。
- iii) $x_1, x_2, \dots, x_n$ より重み $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ を計算する。
- iv) $\sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k)$ を求める。

もう少し具体的に $[-1, 1]$ での積分を解説する。直交多項式は Legendre の多項式である。つまり n 次の Legendre 多項式 $P_n(x)$ を生成する必要がある。定理 1 の漸化式を用いればすぐ計算できるが Fortran, C 等の数値処理言語では $P_n(x)$ の次数を考え係数の配列を予めつくっておく必要がある。しかし数式処理ではこの漸化式はそのまゝの形でプログラムできる。ただそのまゝの形だと計算速度は遅いので少しは工夫がいるが式が扱えるのでたいへん都合がよい。

次に $P_n(x) = 0$ を解くのであるが、一般には 5 次以上の代数方程式は四則と中根で解けない。従って数値計算によらざるを得ない。代数方程式の根の数値解法はよく研究されているが、まず与えられた方程式が重根をもつかどうかを判定す

るのがよい。数式処理では一変数関数の微分、多項式の G.C.D. など重根判断に必要な道具はそろっている。次に単根のみをもつ方程式を解くことになるが扱う方程式が前も、などの様な(実根かどうかなど)根かわかっていないときは Durand - Kerner 法がよく用いられる。この方法は全根を同時に求める良い方法である。又扱う方程式が全て単実根のとき Graeffe の方法を用いるのも良い。この方法は次の通りである。

$f_0(x) = x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_0 = 0$ の根を $x_1, x_2, \dots, x_n$ とする。(但し $|x_1| > |x_2| > \dots > |x_n|$ とする。) $f_0(x) = \prod_{j=1}^n (x - x_j)$ であるから $(-1)^n f_0(x) f_0(-x) = \prod_{j=1}^n (x^2 - x_j^2)$ となりこれを $f_1(x^2)$ とおくと $f_1(x)$ は $x_1^2, x_2^2, \dots, x_n^2$ を根にもつ。これをくり返し $f_k(y) = (-1)^n f_k(x) f_k(-x)$ ($y = x^2$) とすると $f_k(x)$ は $x_1^{2^k}, x_2^{2^k}, \dots, x_n^{2^k}$ を根にもつ。 $f_k(x) = x^n + a_{1k}x^{n-1} + \dots + a_{nk}$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) とすると係数 a_{ij} は次の式を満たす。

$$a_{0k} = 1, \quad a_{ik} = (-1)^i a_{ik-1} + 2 \sum_{j=0}^{i-1} (-1)^j a_{jk-1} a_{2i-j-1, k-1} \\ (i = 1, 2, \dots, n-1, \quad 2i-j > n),$$

$$a_{n,k} = (-1)^n a_{n,k-1}^2, \quad a_{Nk} = 0 \quad (N > n)$$

Fortran 等ではこの式をプログラムしなければならないが数式処理では $(-1)^n f(x) f(-x) \rightarrow f(x)$ とくり返すだけでよい。 k を十分大きくとると $|x_1^{2^k}| \gg |x_2^{2^k}| \gg \dots \gg |x_n^{2^k}|$ だから根と係数の関係より

$|x_1| \cong |1 - a_{1k}|^{1/2}$, $|x_i| \cong |1 - a_{ik}/a_{i-1k}|^{1/2^k}$ ($i=2, \dots, n$)
が得られる。

重み λ_k 及び $\sum_{k=1}^n \lambda_k f(x_k)$ の計算はほとんど問題がない。実際 (9) は ϕ_n がより具体的に決まれば母関数などを用いて更に単純な形になる。

たとえば $\phi_n(x) = P_n(x)$ のときは $\lambda_k = 2(1-x_k^2)/[nP_{n-1}(x_k)]^2$ となることが示される。

IV. まとめ

以上のことを通じて数式処理の特長が次のようにわかった。

- ・特別な工夫をしないで *bignum*, *bigfloat* の計算ができる。
- ・多項式, 有理式が扱えるのでプログラムが簡単になる。
- ・同じハードで同じ計算を行うと遅い。ただし開発期間を含めれば速いと思われる。

参考文献

- [1] 一松、宇野、山内 「電子計算機のための数値計算法」 I, II, III 培風館
- [2] 長嶋秀世 「数値計算法」 槇書店
- [3] 牧野潔夫 「数式処理を用いた数学及び情報教育」

計算機教育シンポジウム報告書 情報処理学会