

情報数理 1 講義メモ (第 8-10 回)

野呂 正行

1 直交多項式

区間の等分点での補間多項式近似による数値積分は n 点での値を用いる公式は $n - 1$ 次の公式であった. 後に, 分点を工夫することにより n 点公式で $2n - 1$ 次のもの (Gauss 型公式) を紹介する. 本節では, その準備として直交多項式について解説する.

$w(x)$ を (a, b) 上非負連続で, 任意の $k \in \mathbf{Z}_{\geq 0}$ に対し $\int_a^b x^k w(x) dx < \infty$ であるような実数値関数とする. このような $w(x)$ を重みと呼ぶ.

$\mathbf{R}[x]$ の内積を

$$(f, g) = \int_a^b f(x)g(x)w(x)dx$$

で定義する. $V_n = \{f \in \mathbf{R}[x] \mid \deg f \leq n\}$ とする.

定義 1.1 $\{\phi_n(x)\}_{n=0,1,\dots} \subset \mathbf{R}[x] \setminus \{0\}$ が

$$\deg \phi_n = n, \quad (\phi_n, \phi_m) = 0 \quad (n \neq m)$$

を満たすとき, $\{\phi_n(x)\}$ を重み $w(x)$ の直交多項式系という.

Gram-Schmidt の直交化により次の定理が成り立つ.

定理 1.2 任意の重み $w(x)$ に対し直交多項式系が存在する.

$\deg \phi_i = i$ より次は明らかである.

定理 1.3 $V_n = \langle \phi_0, \dots, \phi_n \rangle_{\mathbf{R}}$.

系 1.4 多項式 f が $\deg f \leq n - 1$ ならば $(\phi_n, f) = 0$.

定理 1.5 $n \geq 1$ のとき $\phi_n(x)$ は区間 (a, b) 内に n 個の相異なる実根をもつ.

証明の概略を述べる. まず, $(\phi_0, \phi_n) = \int_a^b \phi_n(x)w(x)dx = 0$ より ϕ_n は少なくとも 1 つ実根をもつ. 根が k 個 ($k < n$) なら, ϕ_n が (a, b) で定符号の真の因子 ψ を持つことになるが, これが矛盾であることを直交性により示す. 最後に, 重根を持たないことを同様の方

法でしめす.

定理 1.6 ϕ_n は定数倍を除いて一意的.

系 1.7 $\{\phi_n\} \subset \mathbf{R}[x]$ ($\deg \phi_n = n, n = 1, 2, \dots$) が直交多項式系 $\Leftrightarrow (x^k, \phi_n) = 0$ ($k = 0, \dots, n-1$).

各 ϕ_n をモニックとすると, $\deg(\phi_{n+1} - x\phi_n) \leq n$ より $\deg(\phi_{n+1} - x\phi_n) = c_n\phi_n + \dots + c_0\phi_0$ と書ける. ここで, 直交性を用いると $c_i = 0$ ($i \leq n-2$) が言えるので, $\phi_{n+1} = (x + c_n)\phi_n + c_{n-1}\phi_{n-1}$ の形の漸化式を得る. すなわち,

定理 1.8 直交多項式系は隣接 3 項間漸化式を満たす.

1.1 直交多項式の例

1.1.1 $w(x) = 1, (a, b) = (-1, 1)$

部分積分を繰り返すことで次の定理を得る.

定理 1.9 $\phi_n(x) = \frac{d^n}{dx^n}((x^2 - 1)^n)$ とおけば $\deg \phi_n = n$ で

$$(x^k, \phi_n) = 0 \quad (k = 0, \dots, n-1), \quad (x^n, \phi_n) = 2^{2n+1} \cdot \frac{(n!)^3}{(2n+1)!}.$$

定義 1.10 $P_n(x) = \frac{1}{n!2^n} \frac{d^n}{dx^n}((x^2 - 1)^n)$ ($n = 0, \dots$) をルジャンドル多項式と呼ぶ.

定理 1.9 から次がわかる.

定理 1.11 $\{P_n(x)\}$ は $w(x) \equiv 1, (a, b) = (-1, 1)$ に対する直交多項式系で $(P_n, P_n) = \frac{2}{2n+1}$.

定理 1.12 P_n は

$$(1 - x^2)P_n'' - 2xP_n' + n(n+1)P_n = 0$$

を満たす.

この定理の証明法はいろいろあるが, 例えば $(1 - x^2)P_n'' - 2xP_n'$ が ϕ_i ($i = 0, \dots, n-1$) と直交することを示すことにより証明できる.

1.1.2 $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, (a, b) = (-1, 1)$

まず, 任意の非負整数 k に対し $\int_{-1}^1 x^k w(x) dx < \infty$ であることに注意する.

$$(\phi_n, \phi_m) = \int_{-1}^1 \phi_n(x)\phi_m(x) \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx$$

において, $x = \cos t$ なる変数変換により

$$(\phi_n, \phi_m) = \int_0^\pi \phi_n(\cos t) \phi_m(\cos t) dt.$$

$$\int_0^\pi \cos nt \cos mt dt = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ \pi & n = m = 0 \\ \frac{\pi}{2} & n = m, n \neq 0 \end{cases}$$

より $\cos nt$ を $\cos t$ の多項式で表現し, $\cos t$ を x とおいたものを $\phi_n(x)$ とおけば直交多項式の条件が満たされることがわかる.

定理 1.13 n 次多項式 $T_n(x)$ が存在して $\cos nt = T_n(\cos t)$. T_n は

$$T_0 = 1, T_1 = x, T_{n+1} = 2xT_n - T_{n-1} \quad (n \geq 1)$$

を満たす.

定義 1.14 $T_n(x)$ をチェビシェフ多項式と呼ぶ.

$T_n(x) = \cos(n \cdot \arccos x)$ より $-1 \leq x \leq 1$ で $|T_n(x)| \leq 1$ で, 定理 1.5 より $T_n(x)$ は $(-1, 1)$ に n 実根をもつ. これらの根は具体的に計算できる. すなわち, $\arccos x$ の値を主値にとれば $0 \leq \arccos x \leq \pi$ より $0 \leq n \cdot \arccos x \leq n\pi$. 区間 $(0, n\pi)$ での \cos の零点はちょうど n 個あって $k\pi + \frac{\pi}{2}$ ($k = 0, \dots, n-1$) より, $n \cdot \arccos x = (k + \frac{1}{2})\pi$ から

$$x = \cos\left(\frac{1}{n}\left(k + \frac{1}{2}\right)\pi\right), \quad (k = 0, \dots, n-1).$$

1.1.3 その他の直交多項式系

有名な直交多項式系を表にまとめておく.

記号	名前	(a, b)	重み	(ϕ_n, ϕ_n)
P_n	ルジャンドル	$(-1, 1)$	1	$\frac{2}{2n+1}$
T_n	チェビシェフ	$(-1, 1)$	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	$\frac{\pi}{2} (n \neq 0), \pi (n = 0)$
L_n	ラゲール	$(0, \infty)$	e^{-x}	1
H_n	エルミート	$(-\infty, \infty)$	e^{-x^2}	$\sqrt{\pi} 2^n n!$

表 1 主な直交多項式

1.2 応用：最小二乗近似

区間 $[a, b]$ 上の実数値連続関数の空間において, 内積 $(f, g) = \int_a^b f(x)g(x)dx$, L^2 -ノルム $\|f\|_2 = \sqrt{(f, f)}$ を考える.

直交多項式	3 項間漸化式	ϕ_0, ϕ_1
P_n	$nP_n - (2n-1)xP_{n-1} + (n-1)P_{n-2} = 0$	$P_0 = 1, P_1 = x$
T_n	$T_n - 2xT_{n-1} + T_{n-2} = 0$	$T_0 = 1, T_1 = x$
L_n	$nL_n + (x-2n+1)L_{n-1} + (n-1)L_{n-2} = 0$	$L_0 = 1, L_1 = 1-x$
H_n	$H_n - 2xH_{n-1} + 2(n-1)H_{n-2} = 0$	$H_0 = 1, H_1 = 2x$

表 2 隣接 3 項間漸化式

定理 1.15 高々 n 次式 f_n で $\|f - f_n\|_2 = \sqrt{\int_a^b |f(x) - f_n(x)|^2 dx}$ を最小にするものは, $\{\phi_n\}$ を $w(x) \equiv 1, (a, b)$ に対する直交多項式系とすると,

$$f_n = \sum_{i=0}^n \frac{(f, \phi_i)}{(\phi_i, \phi_i)} \phi_i$$

により与えられる (L^2 -ノルムによる最小二乗近似).

この定理は, f_n を直交多項式の線形和として表し, 各係数に関する平方完成を行うことで証明できる.

2 Gauss 型積分公式

区間 (a, b) , 重み $w(x)$ の直交多項式系を $\{\phi_n(x)\}$ とする. $I(f) = \int_a^b f(x)w(x)dx$ に対する, 直交多項式系を用いた積分公式を与える.

定義 2.1 (Gauss 型積分公式) ϕ_n の n 個の単根 x_1, \dots, x_n ($a < x_1 < \dots < x_n < b$) に対する $f(x)$ の補間多項式 $f_{n-1}(x)$ により $I_n(f) = \int_a^b f_{n-1}(x)w(x)dx$ と定義する.

一般論より,

$$I_n(f) = \sum_{i=1}^n \alpha_i f_i, \quad f_i = f(x_i), \quad \alpha_i = \int_a^b \frac{\phi_n(x)}{x - x_i} w(x) dx$$

で, 誤差は

$$I(f) - I_n(f) = \int_a^b f[x_1, \dots, x_n, x] \phi_n(x) w(x) dx$$

で与えられる.

m 多項式 $f(x)$ に対しては $f[x_1, \dots, x_n, x]$ は $m - n$ 次の多項式となることと, $\{\phi_n\}$ の直交性を用いて次の定理を得る.

定理 2.2 $I_n(f)$ はちょうど $2n - 1$ 次の公式である. すなわち, 次数 $2n - 1$ 以下の任意の多項式 $f(x)$ に対し $I(f) = I_n(f)$ で, 次数 $2n$ のある多項式 $f(x)$ に対し $I_n(f) \neq I(f)$.

この定理と

定理 2.3 n 点積分公式は常に $2n - 1$ 次以下である.

を合わせれば, Gauss 型公式 $I_n(f)$ が最良の次数を与えることがわかる. 以下で, 積分公式に必要な各データを計算するための方法を解説する.

2.1 ϕ_n の根の計算

- P_n の根

$x_k^{(0)} = \cos\left(\frac{k-\frac{1}{2}}{n+\frac{1}{2}}\pi\right)$ ($k = 1, \dots, n$) を初期値とした Newton 法で計算できる. あるいは, P_n の根が P_{n-1} の根で分離されることを用いて二分法で初期値を求めたあと, Newton 法を適用するという方法も可能である.

- T_n の根

$\cos\left(\frac{2k+1}{2n}\pi\right)$ ($k = 0, \dots, n-1$) で与えられる.

2.2 α_i の計算

ϕ_k をモニックとする. $\lambda_k = (\phi_k, \phi_k)$, $a_k = (\phi_k, x\phi_k)$ とおく.

補題 2.4

$$\phi_{n+1} = \left(x - \frac{a_n}{\lambda}\right)\phi_n - \frac{\lambda_n}{\lambda_{n-1}}\phi_{n-1}.$$

補題 2.5

$$\psi_k(x, y) = \frac{\phi_k(x)\phi_{k-1}(y) - \phi_{k-1}(x)\phi_k(y)}{\lambda_{k-1}(x-y)}$$

とおくと

$$\psi_{k+1}(x, y) = \frac{\phi_k(x)}{\phi_k(y)} + \psi_k(x, y). \quad (1)$$

系 2.6

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{\phi_k(x)\phi_k(y)}{\lambda_k} = \frac{1}{\lambda_{n-1}} \frac{\phi_n(x)\phi_{n-1}(y) - \phi_{n-1}(x)\phi_n(y)}{x-y}. \quad (2)$$

補題 2.7

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{\phi_k(x_i)\phi_k(x_j)}{\lambda_k} = \begin{cases} 0 & (i \neq j) \\ \frac{1}{\lambda_{n-1}} \phi_{n-1}(x_i)\phi'_n(x_i) & (i = j) \end{cases}.$$

これらにより次の定理が得られる.

定理 2.8

$$\alpha_i = \left(\sum_{k=0}^{n-1} \frac{\phi_k(x_i)^2}{\lambda_k}\right)^{-1} = \frac{\lambda_{n-1}}{\phi_{n-1}(x_i)\phi'_n(x_i)}.$$

例 2.9 ($w(x) \equiv 1$, $(a, b) = (-1, 1)$ の場合) $\phi_n = c_n P_n$ モニックとすると, $c_n = \frac{2^n (n!)^2}{(2n)!}$ となる. この ϕ_n に対し,

$$\alpha_i = \frac{(\phi_{n-1}, \phi_{n-1})}{\phi_{n-1}(x_i) \phi'_n(x_i)} = \frac{c_{n-1}^2 (P_{n-1}, P_{n-1})}{c_{n-1} c_n P_{n-1}(x_i) P'_{n-1}(x_i)}.$$

$(P_{n-1}, P_{n-1}) = \frac{2}{2n-1}$, $\frac{c_{n-1}}{c_n} = \frac{2n-1}{n}$ より

$$\alpha_i = \frac{2}{n} \cdot \frac{1}{P_{n-1}(x_i) P'_{n-1}(x_i)}.$$

さらに, 公式

$$(1-x^2)P'_n = -n(xP_n - P_{n-1})$$

を使えば

$$(1-x_i^2)P'_n(x_i) = nP_{n-1}(x_i)$$

より

$$\alpha_i = \frac{2(1-x_i)^2}{n^2 P_{n-1}(x_i)^2}.$$

よって

$$I_n(f) = \frac{2}{n^2} \sum_{i=1}^n \frac{1-x_i^2}{P_{n-1}(x_i)^2} f(x_i).$$

一般の (a, b) 上の積分については変数変換

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}$$

により

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{b+a}{2}\right)dt$$

となるので, P_n を用いて計算することができる.