数値解析（松尾）　配付資料　　2019 年 12 月 2 日

■ 補間型数値積分公式

(1) 積分 $I = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$ に対し，$f(x)$ の Lagrange 補間に基づく積分近似：

$$I_n = \sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k), \qquad w_k = \int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x.$$

定理．上の公式は，$f(x)$ が高々$n-1$ 次多項式のとき,（丸め誤差を除いて）正確な積分値を与える．

[**Newton–Cotes 公式**]　x_k を積分区間の m 等分点に選んだもの．特に $m=1$ のとき「台形則」，$m=2$ のとき「Simpson 則」と呼ぶ．全体の積分区間を小区間に等分割し，各小区間に台形則を用いた「複合台形則」がよく使われる：区間 $[a,b]$ を N 等分し，$\Delta x = (b-a)/(N-1)$ とおくとき，

$$I \simeq \left(\frac{f(a)}{2} + \sum_{k=1}^{N-2} f(a + k\Delta x) + \frac{f(b)}{2} \right) \Delta x.$$

(2) 積分 $I = \int_a^b f(x)w(x)\mathrm{d}x$ （$w(x)$：区間内で有限個の点を除いて正値な連続関数）に対し，

$$I_n = \sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k), \qquad w_k = \int_a^b l_k(x)w(x)\mathrm{d}x.$$

[**Gauss 型公式**]　x_k を積分区間上の直交多項式の零点に選んだもの．
定理．Gauss 型公式は，$f(x)$ が高々$2n-1$ 次多項式のとき,（丸め誤差を除いて）正確な積分値を与える．

【参考】直交多項式
$(f,g)_w = \int_a^b f(x)g(x)w(x)\mathrm{d}x$ とおく．このとき

$$(R_m, R_n)_w = 0 \ (m \neq n); \qquad \deg R_n = n \ (n = 0, 1, 2, \dots)$$

となる多項式の列 $\{R_n\}$ を，区間 (a,b) における重み w に関する直交多項式系と呼ぶ．

表 1: 代表的な直交多項式系

区間	重み	名称	記号	適用例
$(-1,1)$	1	Legendre	$P_n(x)$	電気双極子（電磁気）
$(-1,1)$	$(1-x^2)^{-1/2}$	Chebyshev	T_n	補間（数値解析）
$(0,\infty)$	$\exp(-x)$	Laguerre	L_n	水素原子（量子力学）
$(-\infty,\infty)$	$\exp(-x^2)$	Hermite	H_n	調和振動子 (量子力学)

定理．$R_n(x)$ のすべての零点は，区間 (a,b) 内にある実数で単根．

定理．$n \geq 1$ とする．$p(x)$ を $n-1$ 次以下の任意の多項式とするとき，$(R_n, p)_w = 0$.

注意．直交多項式は，列 $1, x, x^2, x^3, \dots$ を内積 $(\cdot,\cdot)_w$ に関して（Gram–Schmidt）直交化すると得られる．

注意．上記の他にも直交多項式系は豊富な数学的性質を持つ．詳細については『物理のための応用数学』（小野寺，裳華房）,『数値計算法の数理』（杉原・室田，岩波）等を参照のこと．

■ 変数変換型数値積分公式

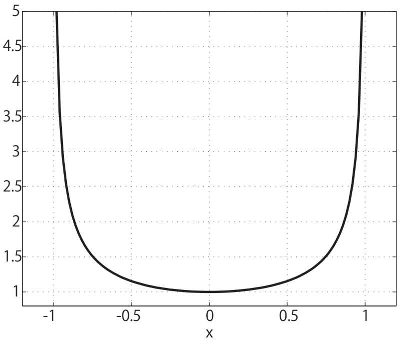
[二重指数関数型公式]　例えば区間 $(-1,1)$ 上の積分の場合，

$$\phi(t) = \tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(t)\right) \quad \text{として複合台形則を適用：} \quad h\sum_{-N_1}^{N_2} f(\phi(kh))\phi'(kh).$$

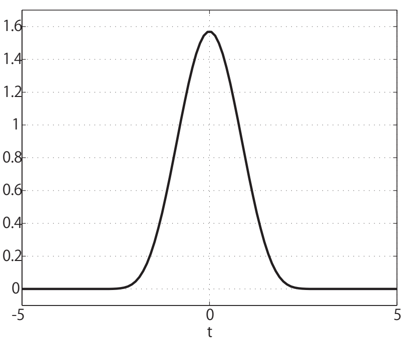
ただし h, N_1, N_2 は被積分関数に応じて適切に定める．通常の補間型公式は被積分関数の特異性に弱いが，変数変換型公式は端点に特異性があっても頑健．

（例）

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}, \qquad f(\phi(t))\phi'(t) = \frac{\frac{\pi}{2}\cosh(t)}{\cosh\left(\frac{\pi}{2}\sinh(t)\right)}.$$

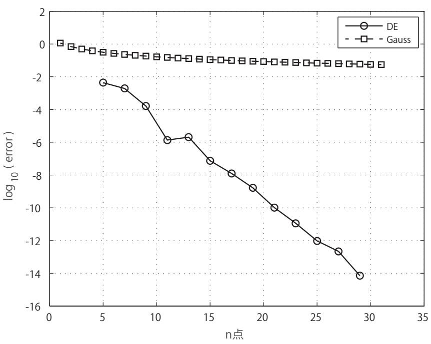


$f(x)$



$f(\phi(t)\phi'(t)$

Gauss 公式と DE 公式の適用結果：



【演習】（自分の興味に従って自習し，理解・実装力を高めることを奨励する）

1. 講義で Gauss–Legendre 公式が $(2n-1)$ 次多項式まで厳密値を与えることを示した．これを一般の場合（他の直交多項式系の場合）にも示せ．

2. 講義で紹介した積分公式を様々な被積分関数に対して適用してみよ．特に (i) 滑らかで特異性もない関数，(ii) 端点特異性を持つ関数，(iii) (i) 同様滑らかだがさらに周期的な関数，などについて試してみよ．((iii) については，複合台形則が非常に良い近似を与える）