数値解析（松尾）　配付資料　　2012年12月21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

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

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．

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)

表 1: 代表的な直交多項式系

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 $1,x,x^2,x^3,\ldots$ 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.（下図は『数値解析』（森，共立出版））

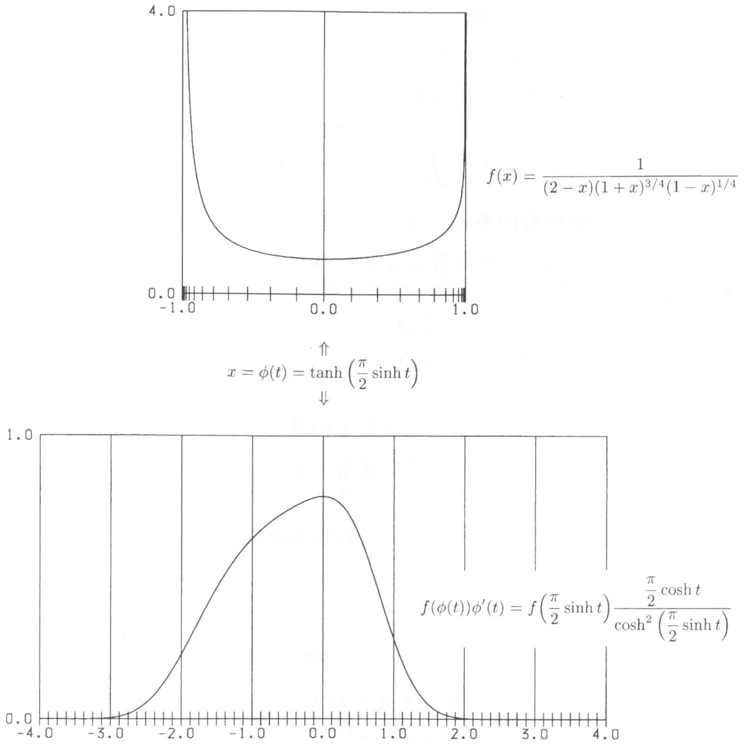

図 **5.6**　(5.7.27) に対する二重指数関数型変換

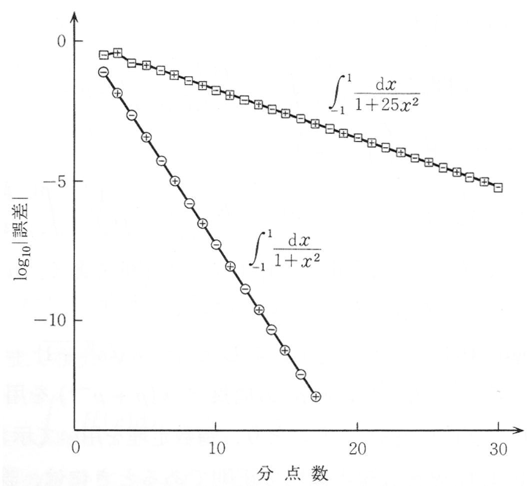

図 11.1　Gauss 公式による数値積分誤差

$$\left(\circ:\int_{-1}^{1}\frac{dx}{1+x^2},\quad \square:\int_{-1}^{1}\frac{dx}{1+25x^2}\right)$$

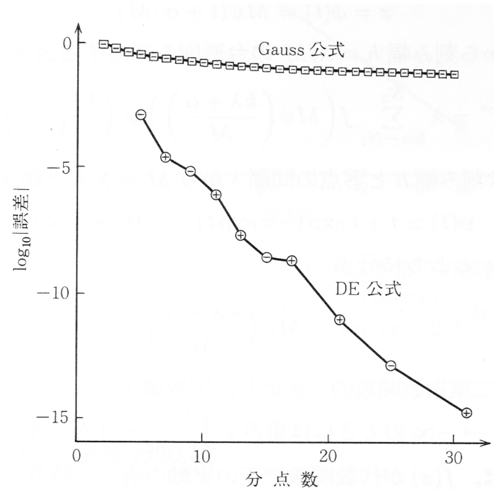

図 11.4　DE 公式と Gauss 公式による $\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$ の数値積分誤差

（○: DE 公式，□: Gauss 公式）

（上の２枚は『数値計算法の数理』（杉原・室田，岩波））