数値積分

定積分

$$I = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x \tag{1}$$

に対し，適当な「分点」 x_k $(k = 1, \ldots, n)$ と「重み」 w_k $(k = 1, \ldots, n)$ を定めて，

$$I_n = \sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k) \tag{2}$$

を近似値とする．分点と重みは（被積分関数 f とは独立に）予め定めておく．

■ 補間型公式

積分 $I = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$ に対し，何らかの基準で分点 x_k $(k = 1, \ldots, n)$ を定め，その点に関する $f(x)$ の Lagrange 補間

$$f(x) \approx \sum_{k=1}^{n} l_k(x) f(x_k) \tag{3}$$

を考える．ここで

$$l_k(x) = \frac{\prod_{j \neq k}(x - x_j)}{\prod_{j \neq k}(x_k - x_j)} \qquad (k = 1, \ldots, n) \tag{4}$$

である．式 (3) の右辺の積分から，数値積分公式

$$I_n = \sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k), \qquad w_k = \int_a^b l_k(x)\mathrm{d}x \tag{5}$$

が導かれる．これを補間型数値積分公式という．
定理．上の公式は，$f(x)$ が高々$n-1$ 次多項式のとき，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，

$$I \simeq \left(\frac{f(a)}{2} + \sum_{k=1}^{N-2} f(a + k\Delta x) + \frac{f(b)}{2} \right) \Delta x. \tag{6}$$

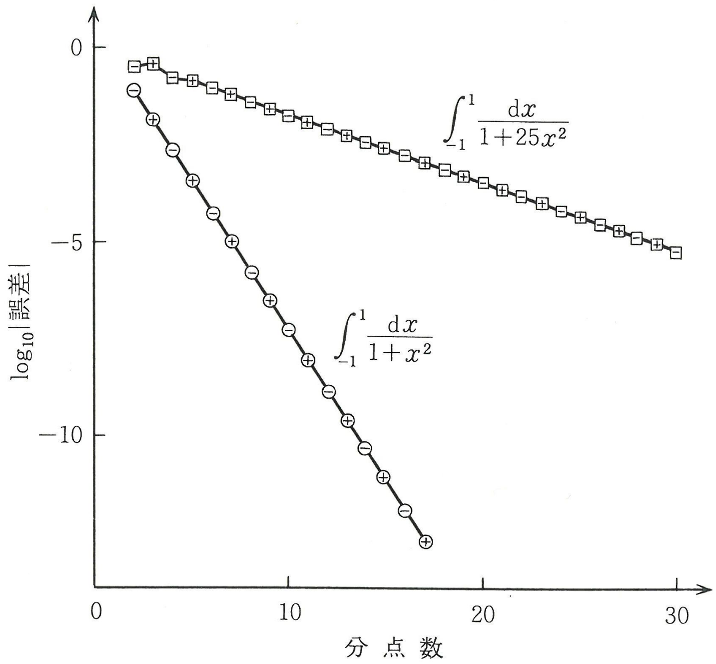

図 1: Gauss 公式による数値積分誤差 ($\circ : \int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}x}{1+x^2}$, $\square : \int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}x}{1+25x^2}$)

[**Gauss 公式**]　分点 x_k を積分区間上の直交多項式の零点に選んだ補間型公式を Gauss 公式あるいは Gauss–Legendre 公式という.

定理. Gauss 公式は，$f(x)$ が高々$2n-1$ 次多項式のとき，正確な積分値を与える.

【参考】Gauss 型公式

重み関数 $w(x)$(区間内で有限個の点を除いて正値な連続関数）を含む積分

$$I = \int_a^b f(x)w(x)\mathrm{d}x \tag{7}$$

に対して，分点 x_k を積分区間上の w に関する直交多項式の零点に選び,

$$I_n = \sum_{k=1}^{n} w_k f(x_k), \qquad w_k = \int_a^b l_k(x)w(x)\mathrm{d}x \tag{8}$$

とする．これは Gauss 型公式と呼ばれる.

定理. Gauss 型公式は，$f(x)$ が高々$2n-1$ 次多項式のとき，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)

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.

■ 変数変換型数値積分公式

$$I = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \int f(\phi(t))\phi'(t)\mathrm{d}t \tag{9}$$

[**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.

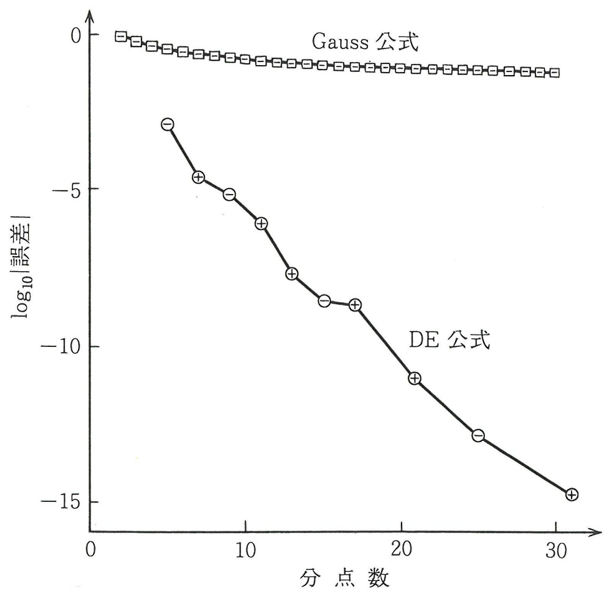

図 2: DE 公式 (○) と Gauss 公式 (□) による $\int_{-1}^{1} \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{1-x^2}}$ の数値積分誤差

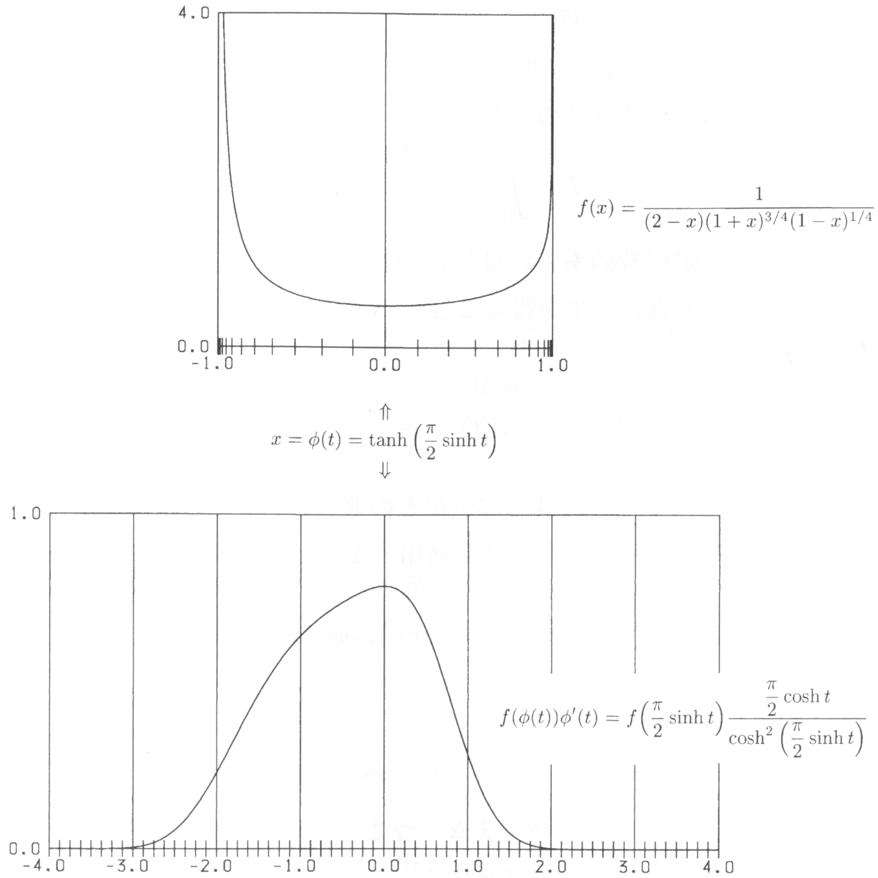

図 5.6 (5.7.27) に対する二重指数関数型変換

（『数値解析』（森正武，共立出版）より）

以上 (2013-10-07)