

Gauss 型数值积分公式

n 点 正交多项式插值

$$f(x) \approx f_n(x) = \sum_{i=1}^n f(x_i) \frac{R_n(x)}{R_n'(x_i)(x-x_i)}$$

$x_i = x_i^{(n)}$: 正交多项式 $R_n(x)$ 的 n 个零点

↓

Gauss 型数值积分公式

$$\int_a^b f(x)w(x)dx \approx \int_a^b f_n(x)w(x)dx = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

with

$$w_i = \int_a^b \frac{R_n(x)w(x)}{R_n'(x_i)(x-x_i)} dx \quad (i=1, \dots, n)$$

w_i 和 x_i 由以下公式计算得到:

$$w_i = \frac{\gamma_{n-1} \|R_{n-1}\|^2}{R_n'(x_i) R_{n-1}(x_i)} \quad (i=1, \dots, n)$$

"Christoffel 数"
(日本 is 一般的に知られる)

Christoffel - Darboux 恒等式

$$\sum_{k=0}^m \frac{R_k(x)R_k(y)}{\|R_k\|^2} = \frac{1}{\gamma_m \|R_m\|^2 (x-y)} \begin{vmatrix} R_{m+1}(x) & R_m(x) \\ R_{m+1}(y) & R_m(y) \end{vmatrix}$$

$x = y = x_i^{(n)}$ とする, $w(x)$ を持つ (a, b) 上の正交多項式

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{R_k(x_i)}{\|R_k\|^2} (R_k, 1) = -\frac{R_{n+1}(x_i)}{\gamma_n \|R_n\|^2} \int_a^b \frac{R_n(x)}{x-x_i} w(x) dx$$

$$L_0 = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{\|R_k\|^2} \delta_{k0} \|R_0\|^2 = 1$$

$$L_0 = -\frac{R_n'(x_i) R_{n+1}(x_i)}{\gamma_n \|R_n\|^2} w_i$$

したがって,

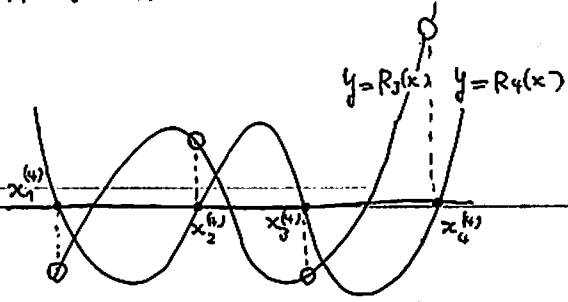
$$w_i = -\frac{\gamma_n \|R_n\|^2}{R_n'(x_i) R_{n+1}(x_i)}$$

さらに恒等式

$$R_{n+1}(x) = (\gamma_n x - \alpha_n) R_n(x) - \beta_n R_{n-1}(x)$$

$$\text{よって, } R_{n+1}(x_i) = -\beta_n R_{n-1}(x_i) \text{ となる。}$$

(注) $R'_m(x_i^{(m)}) R_{m-1}(x_i^{(m)}) > 0$ $\omega_i^{(m)} > 0$



$$\begin{aligned} \omega_i &= \frac{\gamma_m \|R_m\|^2}{|P'_m(x_i) P_{m-1}(x_i)|} \\ &= \frac{\gamma_{m-1} \|R_{m-1}\|^2 \cdot \gamma_m \|R_m\|^2}{|P'_m(x_i) P_{m-1}(x_i)|} \\ &= \frac{\gamma_{m-1} \|R_{m-1}\|^2}{|P'_m(x_i) P_{m-1}(x_i)|} \end{aligned}$$

Gauss-Legendre 节点 ($w(x) = 1, (a, b) = (-1, 1), R_n = P_n$ (Legendre 节点) 节点)

$\gamma_{m-1} = \frac{2m-1}{n}, \|R_{m-1}\|^2 = \frac{2}{2m-1}$ 代入得

$$\omega_i = \frac{\frac{2m-1}{n} \cdot \frac{2}{2m-1}}{|P'_m(x_i) P_{m-1}(x_i)|} = \frac{2}{n |P'_m(x_i) P_{m-1}(x_i)|}$$

$(a, b) = (-1, 1), w(x) = 1, \dots$ Gauss-Legendre 节点

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{i=1}^m \omega_i f(x_i)$$

x_1, \dots, x_m : Legendre 节点 $P_n(x)$ 节点

$$\omega_i = \frac{2}{n |P'_m(x_i) P_{m-1}(x_i)|} = \frac{2(1-x_i^2)}{\{n P_{m-1}(x_i)\}^2} \quad (i=1, \dots, n)$$

* ω_i 与 x_i 的平方成反比

$$(1-x^2) P'_m(x) = -n \{x P_m(x) - P_{m-1}(x)\}$$

代入得

* x_i ($i=1, \dots, n$) 的计算

$$x_i \approx \cos\left(\frac{\pi(i-0.25)}{n+0.5}\right) \rightarrow \text{用 Newton 法计算}$$

m点 Gauss 型 数値積分公式

$$I(f) \equiv \int_a^b f(x) w(x) dx$$

$$\approx I_m(f) \equiv \sum_{i=1}^m w_i f(x_i)$$

↓

f が $(2m-1)$ 次以下の多項式 ならば, $I(f) = I_m(f)$. (数値積分公式の積分の厳密値と等しい)

m点 Lagrange 補間

$$f(x) \approx L_m f(x) \equiv \sum_{i=1}^m f(x_i) \frac{W_m(x)}{W_m'(x_i)(x-x_i)}, \quad W_m(x) \equiv \prod_{i=1}^m (x-x_i).$$

m点 補間型 数値積分公式

$$I(f) \approx I_m(f) \equiv \int_a^b L_m f(x) w(x) dx = \sum_{i=1}^m w_i f(x_i), \quad w_i \equiv \int_a^b \frac{W_m(x) w(x)}{W_m'(x_i)(x-x_i)} dx.$$

f が $m-1$ 次以下の多項式 ならば $f(x) = L_m f(x)$

$$\rightarrow I(f) = I_m(f).$$

$r < n$, $W_m(x) = R_n(x)$ (n 次互素多項式) の場合.

$f(x) \approx R_n(x)$ と割り算 $f(x) \div R_n(x) = q(x)$, 剰余 $r(x)$ とすると,

$$f(x) = q(x) R_n(x) + r(x), \quad 0 \leq \deg q, \deg r \leq n-1.$$

$$I(f) = \underbrace{\int_a^b q(x) R_n(x) w(x) dx}_0 + \int_a^b r(x) w(x) dx$$

($\because \deg q < n$)

$$= \sum_{i=1}^m w_i r(x_i) \quad (\because \deg r \leq n-1)$$

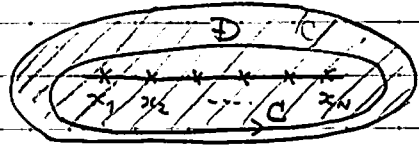
$$= \sum_{i=1}^m w_i f(x_i) = I_m(f).$$

☒

< 複素関数論 による理論誤差解析 >

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

$f(z)$: 領域 D ($\supset [a, b]$) 上正則.



Cauchy の積分公式より

$$f(x) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z-x} dz$$

$C: [a, b]$ を正方向に周回, D は全平面閉積分路

$$I = \int_a^b \left[\frac{1}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{z-x} dz \right] w(x) dx = \frac{1}{2\pi i} \oint_C f(z) \left\{ \int_a^b \frac{w(x)}{z-x} dx \right\} dz$$

$$\therefore I = \frac{1}{2\pi i} \oint_C f(z) \Psi(z) dz, \quad \Psi(z) \equiv \int_a^b \frac{w(x)}{z-x} dx \quad \text{--- (1)}$$

一方, 数値積分公式

$$I \approx I_m = \sum_{j=1}^n w_j f(x_j)$$

すなわち, 留数定理より次のように複素積分表示できる:

$$I_m = \frac{1}{2\pi i} \oint_C f(z) \Psi_m(z) dz, \quad \Psi_m(z) \equiv \sum_{j=1}^n \frac{w_j}{z-x_j} \quad \text{--- (2)}$$

(1)-(2) より

$$\Delta I_m \equiv I - I_m = \frac{1}{2\pi i} \oint_C f(z) \Phi_m(z) dz$$

$$\Phi_m(z) \equiv \Psi(z) - \Psi_m(z) \quad \dots \text{数値積分誤差の特性関数}$$

$f(z), \Phi_m(z)$ の複素平面上の正則性から, 数値積分誤差の見積りを行うことができる.

補間から得られる数値積分公式の誤差

$$\text{補間誤差 } f(x) - \sum_{j=1}^n f(x_j) \frac{W_n(x)}{W_n'(x_j)(x-x_j)} = \frac{W_n(x)}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z-x)W_n(z)} dz$$

$$\downarrow \quad (W_n(z) = \prod_{k=1}^n (z-x_k))$$

$$\int_a^b f(x) w(x) dx - \sum_{j=1}^n f(x_j) \int_a^b \frac{W_n(x) w(x)}{W_n'(x_j)(x-x_j)} dx = \int_a^b \left[\frac{W_n(x)}{2\pi i} \oint_C \frac{f(z)}{(z-x)W_n(z)} dz \right] w(x) dx$$

$$= \int_a^b \frac{W_n(x)}{2\pi i} \left\{ \oint_C \frac{f(z)}{(z-x)W_n(z)} dz \right\} w(x) dx$$

$$\therefore \Delta I_n \equiv I - I_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_C f(z) \Phi_n(z) dz$$

$$\Phi_n(z) = \frac{1}{W_n(z)} \int_a^b \frac{W_n(x) w(x)}{z-x} dx$$

誤差の特性関数に対する
この形の表式

一般の数値積分公式に対しては, $\Phi_n(z) = O(|z|^{-n-1})$ ($z \rightarrow \infty$),

Gauss型公式の場合 ($W_n(z) = R_n(z)$),

$$\Phi_n(z) = \frac{1}{R_n(z)} \int_a^b \frac{1}{z} \left(1 - \frac{x}{z}\right)^{-1} R_n(x) w(x) dx$$

$$= \frac{1}{R_n(z)} \int_a^b \left\{ \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{z^{k+1}} \right\} R_n(x) w(x) dx$$

$$= \frac{1}{R_n(z)} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{z^{k+1}} \int_a^b x^k R_n(x) w(x) dx$$

$\{R_n(x)\}$ の直交性より $k \leq n-1$ に対しては 0,

$$\therefore \Phi_n(z) = O(z^{-2n-1}) \quad (z \rightarrow \infty)$$

$f(z)$ が z に対して $2m-1$ 次多項式ならば, $f(z)\Phi_n(z) = O(|z|^{-2})$ ($z \rightarrow \infty$)
となる. 誤差の複素積分表示 (4) における積分路 C を $|z|=R$ にとれば,

$$|\Delta I_n| \leq \frac{1}{2\pi} M R^{-2} \cdot 2\pi R \quad (M > 0 \text{ const.})$$

$$= M R^{-1} \rightarrow 0 \quad (R \rightarrow \infty)$$

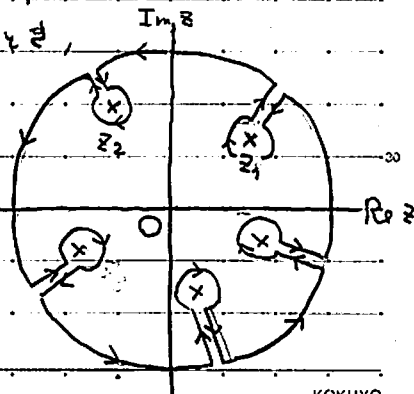
$$\therefore \Delta I_n = 0$$

よって $2m-1$ 次多項式に対しては, Gauss型公式は
厳密な積分値を与える.

定理 $f(z)$ が \mathbb{C} 上に n 位の極 z_1, \dots, z_p を $[a, b]$ と外に正則な有理
関数とし, $f(z) = O(|z|^{2n+1})$ ($z \rightarrow \infty$) とする. このとき,

$$\Delta I_n = - \sum_{p=1}^p \text{Res}(f, z_p) \cdot \Phi(z_p)$$

($\text{Res}(f, z_p)$: $f(z)$ の z_p における留数).



□

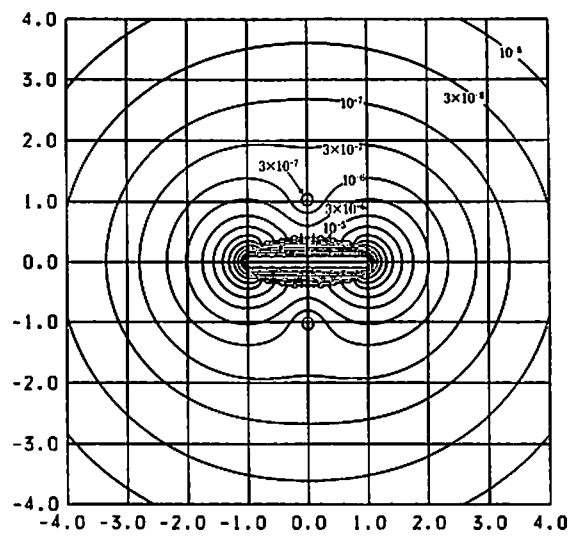


図 5.3 21 点複合シンプソンの公式の誤差の特性関数 $|\Phi_n(z)|$, $n = 21$

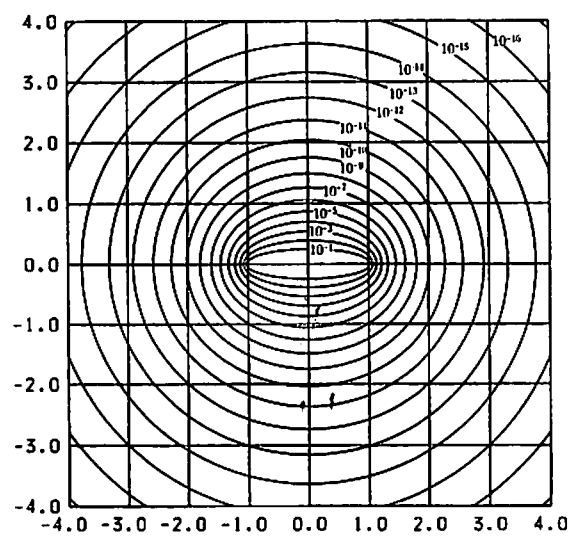


図 5.4 8 次ジャコビ・ガウス公式の誤差の特性関数 $|\Phi_n(z)|$, $n = 8$

(例)
$$I = \int_{-1}^1 \frac{dz}{(z-2)(z^2+1)}$$

$$= -\frac{1}{5}(\log 3 + \pi) = -0.84804 \dots$$

21点 Simpson 則 11点 Gauss-Legendre 公式で計算した時の誤差を見積もる。

$$f(z) = \frac{1}{(z-2)(z^2+1)}$$

は $z = 2, \pm i$ に 1 次の極がある。

$$|\text{Res}(f, z)| = \frac{1}{5}, \quad |\text{Res}(f, \pm i)| = \frac{\sqrt{5}}{10}$$

(i) 21点 Simpson 則の場合

$$|\Phi(z)| \approx 3 \times 10^{-6}$$

$$|\Phi(\pm i)| \approx 3 \times 10^{-7}$$

$$\begin{aligned} |\Delta I_n| &= |\text{Res}(f, z)\Phi_n(z) \\ &\quad + \text{Res}(f, +i)\Phi_n(+i) \\ &\quad + \text{Res}(f, -i)\Phi_n(-i)| \\ &\approx |\text{Res}(f, z)| |\Phi_n(z)| \\ &= \frac{1}{5} \times 3 \times 10^{-6} = 6 \times 10^{-7} \end{aligned}$$

* 図面は『数値解析第2版』(共立出版)より引用。

(ii) 8点 Gauss-Legendre 公式

$$|\Phi_n(z)| \approx 10^{-9}, \quad |\Phi(\pm i)| \approx 2 \times 10^{-6}$$

$$\begin{aligned} |\Delta I_n| &= |\text{Res}(f, z)\Phi_n(z) + \text{Res}(f, +i)\Phi_n(+i) + \text{Res}(f, -i)\Phi_n(-i)| \\ &\approx |\text{Res}(f, +i)| |\Phi_n(+i)| + |\text{Res}(f, -i)| |\Phi_n(-i)| \\ &= 2 \times \frac{\sqrt{5}}{10} \times 2 \times 10^{-6} = 9 \times 10^{-7} \end{aligned}$$

数値実験結果: 21点 Simpson 則 ... 誤差 7.49×10^{-7}

8点 Gauss-Legendre 公式 ... 誤差 9.03×10^{-7}