

第15章 数値微分と数値積分

Derivatives and integrals are also very useful as topics for teaching about numerical computation and analysis. They are easily understood, one can present intuitive or pictorial motivations, the algebra is usually not too messy, and yet their calculation is not trivial.^a

J.R.Rice, "Numerical Methods, Software, and Analysis, 2nd Ed.", (Academic Press)

^a(訳) 微分や積分は数値計算の教育には大変有用である。直感的に絵で理解しやすく、代数的にもすっきりしている。が、それを計算するとなるとそれ程楽な話ではない。

本書の一番最初に取り上げたように、数値計算の大きな目的の一つに、極限值もしくは極限操作を伴って導出される値の近似値を有限回の計算で求める、というものがある。その最終目標とされるのが、微分・積分の計算であり、その発展系として常 (Ordinary)・偏 (Partial) 微分方程式 (Differential Equation, DE), 積分方程式 (Integral Equation) がある。本章ではその基礎となる、微分の計算について少し触れた後、一変数積分についてその概略を述べる。

15.1 微分と差分商

一変数関数 $f(x)$ の微分係数を求めるには次の前進・後退・中心差分 (forward, backward and central difference)

$$[\text{前進差分}] \Delta f(x) = f(x+h) - f(x)$$

$$[\text{後退差分}] \nabla f(x) = f(x) - f(x-h)$$

$$[\text{中心差分}] \delta f(x) = f(x+h) - f(x-h)$$

を用いて、ある幅 h と商を取り

$$[\text{前進差分商}] f'(x) \approx \frac{\Delta f(x)}{h}$$

$$[\text{後退差分商}] f'(x) \approx \frac{\nabla f(x)}{h}$$

$$[\text{中心差分商}] f'(x) \approx \frac{\delta f(x)}{2h}$$

として計算する。 $f(x)$ が十分な回数だけ連続微分可能であるという前提があれば、 f の Taylor 展開を考えると、

$$\begin{aligned}\frac{\Delta f(x)}{h} &= f'(x) + \frac{h}{2}f''(x) + \frac{h^2}{3!}f'''(x) + \cdots \\ &= f'(x) + O(h)\end{aligned}\tag{15.1}$$

$$\begin{aligned}\frac{\nabla f(x)}{h} &= f'(x) - \frac{h}{2}f''(x) + \frac{h^2}{3!}f'''(x) - \cdots \\ &= f'(x) + O(h)\end{aligned}\tag{15.2}$$

より、

$$\begin{aligned}\frac{\delta f}{2h} &= \frac{1}{2}\left(\frac{\Delta f(x)}{h} + \frac{\nabla f(x)}{h}\right) \\ &= f'(x) + \frac{h^2}{3!}f'''(x) + \cdots \\ &= f'(x) + O(h^2)\end{aligned}$$

から、中心差分の打ち切り誤差が最も小さくなる。が、幅 h を小さくするにつれて丸め誤差が増大し、ある時点からは打ち切り誤差以上に丸め誤差が上がってくる。

例題 15.1.1

関数を

$$f(x) = \sin(\cos x)$$

として、 $x = \pi/4$ における後退、前進、中心差分商をそれぞれ IEEE754 倍精度で計算し、真の $f'(\pi/4)$ との相対誤差をプロットしたのが図 15.1 である。ある時点から、幅 h を小さくしても丸め誤差の影響により精度が悪くなっているのがわかる。

差分商を組み合わせることによって、任意階数の微係数の近似を作ることができる。例えば $f''(x)$ の近似は、前進差分商 (15.1) と後退差分商 (15.2) の打ち切り誤差式より、

$$\begin{aligned}\frac{1}{h}\left(\frac{\Delta f(x)}{h} - \frac{\nabla f(x)}{h}\right) &= \frac{f(x-h) - 2f(x) + f(x+h)}{h^2} \\ &= f''(x) + O(h^2)\end{aligned}\tag{15.3}$$

であることは直ぐに分かる。

問題 15.1.1

$f(x) = \sin(\cos x)$ に対して、 $f'(\pi/4)$ の近似値を $\Delta f(\pi/4)/h$, $\delta f(\pi/4)/h$ を用いてそれぞれ求めよ。ただし、図 15.1 を参考にしながら、相対誤差が 10^{-3} 以下になるよう h を定め、計算せよ。

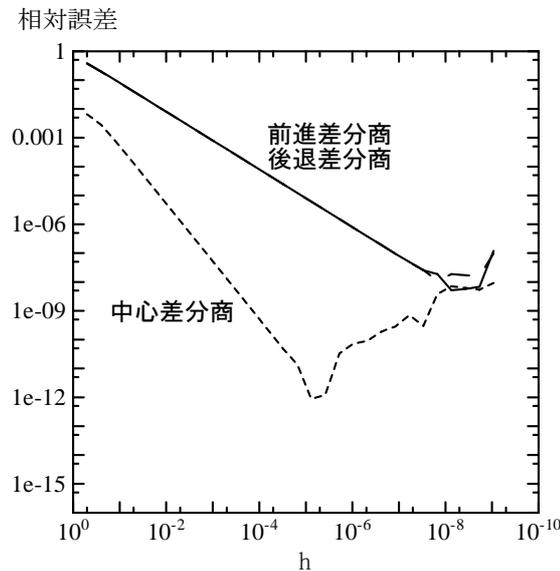


図 15.1: 前進・後退・中心差分の相対誤差

15.2 高次の数値微分公式と数値例

一変数関数 $f(x)$ の, $x = a$ における微係数 $f'(a)$ に対する, Stirling の中心差分公式に基づく数値微分の近似式および打ち切り誤差は次のようになる [26]。

$$\begin{aligned}
 \text{[3点公式]} \quad f'(a) &= \frac{1}{h} \left\{ \frac{1}{2}f(a+h) - \frac{1}{2}f(a-h) \right\} \\
 &+ \frac{1}{6}f^{(3)}(a)h^2 + \dots
 \end{aligned} \tag{15.4}$$

$$\begin{aligned}
 \text{[5点公式]} \quad f'(a) &= \frac{1}{h} \left\{ -\frac{1}{12}f(a+2h) + \frac{2}{3}f(a+h) - \frac{2}{3}f(a-h) + \frac{1}{12}f(a-2h) \right\} \\
 &+ \frac{1}{30}f^{(5)}(a)h^4 + \dots
 \end{aligned} \tag{15.5}$$

$$\begin{aligned}
 \text{[7点公式]} \quad f'(a) &= \frac{1}{h} \left\{ \frac{1}{60}f(a+3h) - \frac{3}{20}f(a+2h) + \frac{3}{4}f(a+h) - \frac{3}{4}f(a-h) \right. \\
 &+ \left. \frac{3}{20}f(a-2h) - \frac{1}{60}f(a-3h) \right\} \\
 &+ \frac{1}{140}f^{(7)}(a)h^6 + \dots
 \end{aligned} \tag{15.6}$$

ここで, h は刻み幅と呼ばれる定数で, 通常はなるべく小さい値になるように取る。どの公式でも打ち切り誤差はこの刻み幅の多項式として表現されていることがわかる。この場合, 誤差項の最小次数の order で打ち切り誤差を見積もることができるため, h を小さくすれば, 3点公式は h^2 に, 5点公式は h^4 に, 7点公式は h^6 に比例して打ち切り誤差が縮小していくと予測できる。

実際に, これらの数値微分公式を用いた数値実験を行い, 丸め誤差と打切誤差の計測を行ってみ

る。関数は

$$f(x) = \cos(\sin x)$$

を使用する。この導関数 $f'(x)$ は用意に求めることができるので、この関数値を微係数の真値として使用する。評価するのは $x = \pi/4$ における微係数 $f'(\pi/4) = -4.593626849327 \times 10^{-1}$ である。

まず、刻み幅 h を $2^0, 2^{-1}, \dots, 2^{-10}$ と小さくしていった時に発生する相対打ち切り誤差 (TE) と、相対丸め誤差 (RE) をそれぞれ計測してみる。その結果が図 15.2 であり、縦軸に相対誤差 (対数スケール)、横軸に $h = 2^{-x}$ を取っている。打ち切り誤差は 10 進 100 桁計算の結果を、丸め誤差は IEEE754 倍精度の計算結果と拡張倍精度の計算結果との相対差を取って、それぞれプロットしてある。

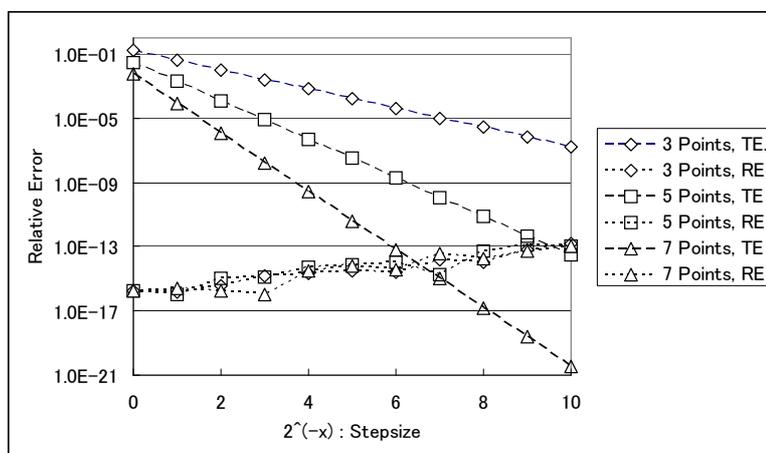


図 15.2: $x = \pi/4$ における打ち切り誤差 (TE) と丸め誤差 (RE)

刻み幅を小さく (グラフの右方向) していくと、予想通り 3 点, 5 点, 7 点公式の打ち切り誤差はそれぞれ h^2, h^4, h^6 に比例して小さくなっていることがわかる。これにより、打ち切り誤差の計測を行うには、一つの刻み幅を用いた計算だけでは不十分で、少なくとも三つ以上の異なる刻み幅 h を用いて計算した結果を比較する必要があることが分かる。

一方、丸め誤差は、同じ IEEE754 倍精度の浮動小数点数を用いているため、どの公式も大差なく推移している。数値微分においては、刻み幅 h を小さくしていくと必然的に桁落ちを伴うため、相対丸め誤差が若干高くなる傾向が見られる。

IEEE754 倍精度で計算した数値微分の数値結果に含まれる誤差は、図 15.2 に示した打ち切り誤差と丸め誤差を合わせたものとなる。従って、例えば 3 点公式を用いた場合は、 $h = 2^0$ から 2^{-10} の刻み幅ではいずれも打ち切り誤差の方が丸め誤差を上回っているため、数値結果に含まれる誤差は打ち切り誤差のみが顕在化していると予想できる。逆に、7 点公式の場合は、ちょうど $h = 2^{-6}$ の地点で打ち切り誤差と丸め誤差の大きさが拮抗しているため、これより大きい刻み幅では打ち切り誤差が、小さい刻み幅では丸め誤差が優越してくると予想できる。これらの中間の打ち切り誤差を持つ 5 点公式は、ちょうど $h = 2^{-10}$ が打ち切り・丸め誤差の拮抗点となっている。

IEEE754 倍精度を用いて計算した結果の相対誤差を取ったものが図 15.3 である。以上の予想が

正しいことが見て取れる。

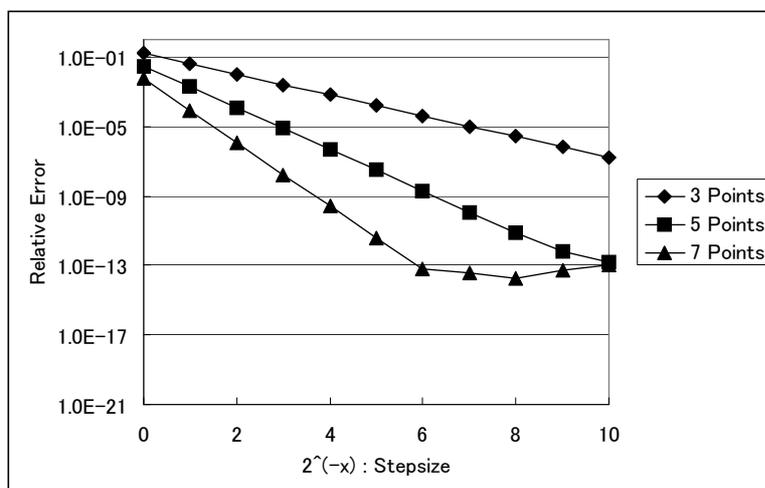


図 15.3: $x = \pi/4$ における相対誤差

現実の計算では、真の微係数が不明である故に数値微分を行うのが普通である。よって、数値結果のみから誤差の推定を行う必要があるが、以上の結果から、複数の刻み幅を用いて計算した値を比較することで、おおよその予測ができることになる。

今回使用した $f'(\pi/4)$ を 7 点公式を用いて計算した値は表 15.1 のようになる。それぞれの刻み幅を用いて計算した数値のうち、一段階大きい刻み幅の数値と上の位の桁から比較して一致している部分に下線を引いてある。図 15.3 と比較して見て頂きたい。

刻み幅を $h = 2^{-6}$ まで小さくしていくと、一致していく桁数が一定して増大していくことが見て取れる。これは打ち切り誤差が減少していく部分に相当する。一方、刻み幅を 2^{-6} より小さくしても一致している桁数は増えず、 -4.593626849327 と -4.593626849328 の間を揺れ動いている。これは丸め誤差が打ち切り誤差を上回ったことを示している。よって、これ以上刻み幅を小さくしても相対誤差の減少は望めそうも無く、真値は $-4.59362684933 \times 10^{-1}$ 、この精度は約 12 桁・・・と結論付けられる。このようにして、複数の刻み幅を用いた計算結果を比較することで、真の値が不明であっても、ある程度の相対誤差の「あたり」をつけることは可能である [13]。

ここでは特定の $x = a$ 地点における数値結果の相対誤差を推定したが、ある区間全体にこの結果が敷衍できるかどうかは関数自身の性質に依存するので一概には言えない。今回使用した関数は $[-2\pi, 2\pi]$ で周期関数となり、この区間内で無限回連続微分可能であり、その導関数の変動幅もごく小さいことから、桁落ちが起きる地点を除けば、どの地点においても同じような精度の数値結果を得ることができると推察される。解析的な性質がこのようなく「おとなしい」ものであるような関数及び区間においても同様のことが言える。

表 15.1: 7 点公式による近似値

刻み幅	7 点公式で得た $f'(\pi/4)$ の値
2^0	$-4.56886082650315217e - 01$
2^{-1}	$-4.59327000065456403e - 01$
2^{-2}	$-4.59362179303235640e - 01$
2^{-3}	$-4.59362677301507094e - 01$
2^{-4}	$-4.59362684814669853e - 01$
2^{-5}	$-4.59362684930946064e - 01$
2^{-6}	$-4.59362684932753673e - 01$
2^{-7}	$-4.59362684932801912e - 01$
2^{-8}	$-4.59362684932793197e - 01$
2^{-9}	$-4.59362684932760557e - 01$
2^{-10}	$-4.59362684932832721e - 01$

15.3 Newton-Cotes 積分公式

以下の Riemann 定積分を求めたいとする。

$$\int_a^b f(x)dx \quad (15.7)$$

Newton-Cotes 型の積分公式は、この積分区間内を等分割し、各分点 $(x_i, f(x_i))$ を補間点とする Lagrange 補間多項式を積分したものをこの積分の近似値として採用するという考え方である。

例えば、閉区間 $[x_0, x_k]$ が k 等分割 (区間幅は h とする) されているものとする、 $k+1$ 個の補間点 $(x_0, f(x_0)), \dots, (x_k, f(x_k))$ を全て通過する k 次補間多項式 $p_k(x)$ が求められる。

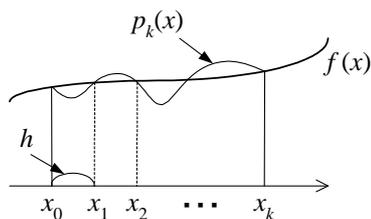


図 15.4: k 次多項式補間の場合

この時、この閉区間における $f(x)$ を $p_k(x)$ で近似したことにすると、定積分においても

$$\int_{x_0}^{x_k} f(x)dx \approx \int_{x_0}^{x_k} p_k(x)dx \quad (15.8)$$

という近似を行ったことになる。 $p_k(x)$ は Lagrange 補間公式 (14.5) の形で表現できるので、(15.8)

の右辺は

$$\begin{aligned}
 \int_{x_0}^{x_k} p_k(x) dx &= \int_{x_0}^{x_k} \sum_{j=0}^k \frac{\psi(x)}{(x-x_j)\psi'(x_j)} f(x_j) dx \\
 &= \sum_{j=0}^k \left(\frac{1}{\psi'(x_j)} \int_{x_0}^{x_k} \frac{\psi(x)}{x-x_j} dx \right) f(x_j) \\
 &= \sum_{j=0}^k \left(\frac{1}{\psi'(x_j)} \int_{x_0}^{x_k} \prod_{l=0, l \neq j}^k (x-x_l) dx \right) f(x_j) \\
 &= \sum_{j=0}^k (cd_j h) f(x_j) = ch \sum_{j=0}^k d_j f(x_j) \tag{15.9}
 \end{aligned}$$

と表現できる。参考までに $k = 2, 3, \dots, 7$ 等分割した時の係数 c, d_0, \dots, d_k を表 15.2 に掲載しておく。

台形公式 (台形則)

最も単純なものは 2 点間を直線で結ぶ、即ち 1 次多項式で近似し、その補間多項式を積分して近似値を求める、いわゆる台形公式 (trapezoidal rule) である。図形的にはちょうど分割した関数と x 座標で囲まれる台形の面積を求め、それを全て加算するというものである。等間隔 $h = (b-a)/n$ で n 分割した場合、その一区間 $[x_i, x_{i+1}]$ は

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \frac{h}{2} (f(x_i) + f(x_{i+1})) \tag{15.10}$$

となる。従って、これに基づいた定積分全区間の近似値は

$$\begin{aligned}
 \int_a^b f(x) dx &\approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{2} (f(x_i) + f(x_{i+1})) \\
 &= \frac{h}{2} \left(f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(x_n) \right) \tag{15.11}
 \end{aligned}$$

として計算できる。

Simpson の 1/3 公式

3 点間を 2 次の Lagrange 補間多項式で近似し、その積分値を採用する方法を Simpson の 1/3 公式と呼ぶ。この場合は、全区間を $2n$ 分割した一区間を

$$\int_{x_i}^{x_{i+2}} f(x) dx \approx \frac{h}{3} (f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})) \tag{15.12}$$

として計算するので、全体としては

$$\begin{aligned}
 \int_a^b f(x) dx &\approx \sum_{i=0}^{2n} \frac{h}{3} \{f(x_i) + 4f(x_{i+1}) + f(x_{i+2})\} \\
 &= \frac{h}{3} \left\{ f(x_0) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{2i-1}) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) + f(x_{2n}) \right\} \tag{15.13}
 \end{aligned}$$

表 15.2: Newton-Cotes 積分公式の係数 (Abramowitz より引用)

2 点 (台形則) $c = 1/2$
$d_0 = 1$ $d_1 = 1$
3 点 (Simpson の 1/3 公式) $c = 1/3$
$d_0 = 1$ $d_1 = 4$ $d_2 = 1$
4 点 (Simpson の 3/8 公式) $c = 3/8$
$d_0 = 1$ $d_1 = 3$ $d_2 = 3$ $d_3 = 1$
5 点 $c = 2/45$
$d_0 = 7$ $d_1 = 32$ $d_2 = 12$ $d_3 = 32$ $d_4 = 7$
6 点 $c = 5/288$
$d_0 = 19$ $d_1 = 75$ $d_2 = 50$ $d_3 = 50$ $d_4 = 75$ $d_5 = 19$
7 点 $c = 1/140$
$d_0 = 41$ $d_1 = 216$ $d_2 = 27$ $d_3 = 272$ $d_4 = 27$ $d_5 = 216$ $d_6 = 41$

となる。

問題 15.3.1

(1.3) 式の定積分を，台形則及び Simpson の 1/3 公式により求めよ。区間幅 h は分割数 4 に応じ， $h = (4/5 - 0)/4 = 1/5$ とせよ。

15.4 Gauss 型積分公式

Gauss 型積分公式とは，直交多項式 $p_n(x)$ の性質を利用して

$$\int_a^b w(x)f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(\alpha_i) \quad (15.14)$$

という重み付き定積分の近似公式を定めたものである。ここで， $w(x)$ は密度関数と呼ばれ，直交多項式ごとに与えられる関数であり，

$$\left| \int_a^b w(x)dx \right| < +\infty$$

を満足する。 $\alpha_i (i = 1, 2, \dots, n)$ は，代数方程式 $p_n(x) = 0$ の根である。

以下，この Gauss 型積分公式を導出する手続きを述べる。

15.4.1 直交多項式補間

直交多項式とは，適当な区間 $[a, b]$ における多項式 $p_0(x) = \mu_0$ (定数), $p_1(x), \dots, p_n(x), \dots$ が

$$\int_a^b w(x)p_i(x)p_j(x)dx = \begin{cases} \lambda_i > 0 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (15.15)$$

という性質を持つ多項式列 $\{p_n(x)\}$ を言う。

直交多項式は

$$a_1 p_{i+1}(x) = (a_2 + a_3 x)p_i(x) - a_4 p_{i-1}(x) \quad (15.16)$$

という形で与えられる¹。代表的な直交多項式を表 15.3 に示す。

これにより，最初の $p_0(x) = \mu_0$, $p_1(x) = \mu_1 x + r_0$ が与えられれば， $p_2(x) = \mu_2 x^2 + r_1(x)$ (2 次), $p_3(x) = \mu_3 x^3 + r_2(x)$ (3 次), ..., $p_n(x) = \mu_n x^n + r_{n-1}(x)$ (n 次), ... が順次求められる。即ち， $p_n(x)$ は必ず n 次の多項式になる。

直交多項式には次のような性質がある。

1. 任意の n 次多項式 $q_n(x)$ は $\{p_n(x)\}$ の一次結合として一意に表現できる。即ち

$$q_n(x) = \sum_{i=0}^n c_i p_i(x)$$

¹その他，2 階線型常微分方程式による表現など様々ある。詳しくは M.Abramowitz and I.A. Stegun の "Handbook of Mathematica Functions"(Dover) を参照のこと。

表 15.3: 主な直交多項式

名称	$p_0(x)$	$p_1(x)$	a_1	a_2	a_3	a_4	$w(x)$	$[a, b]$	λ_i
Legendre 多項式 $P_i(x)$	1	x	$i+1$	0	$2i+1$	i	1	$[-1, 1]$	$\frac{2}{2i+1}$
Chebyshev 多項式 $T_i(x)$	1	x	1	0	2	1	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	$[-1, 1]$	$\frac{\pi}{2}$ ($\lambda_0 = \pi$)
Laguerre 多項式 $L_i(x)$	1	$1-x$	$i+1$	$2i+1$	-1	i	$\exp(-x)$	$[0, \infty)$	1
Hermite 多項式 $H_i(x)$	1	$2x$	1	0	2	$2i$	$\exp(-x^2)$	$(-\infty, \infty)$	$2^i! \sqrt{\pi}$

ここで

$$c_i = \frac{1}{\lambda_i} \int_a^b w(x) p_i(x) q_n(x) dx$$

である。

2. $p_n(x)$ ($n \geq 1$) の零点 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ は $\alpha_i \neq \alpha_j$ ($i \neq j$) で, $\alpha_i \in (a, b)$ に存在する。即ち

$$p_n(x) = \mu_n (x - \alpha_1)(x - \alpha_2) \cdots (x - \alpha_n)$$

である。

3. Cristoffel-Darboux の公式

$$x \neq y \text{ に対して } \sum_{i=0}^{n-1} \frac{p_i(x)p_i(y)}{\lambda_i} = \frac{\mu_{n-1}}{\lambda_{n-1}\mu_n} \frac{p_n(x)p_{n-1}(y) - p_{n-1}(x)p_n(y)}{x-y}$$

$$x = y \text{ の時は上式において } y \rightarrow x \text{ とし } \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(p_i(x))^2}{\lambda_i} = \frac{\mu_{n-1}}{\lambda_{n-1}\mu_n} (-p_n(x)p'_{n-1}(x) + p_{n-1}(x)p'_n(x))$$

(15.17)

が成立する。

この直交多項式の零点を補間点 $(\alpha_1, f(\alpha_1)), (\alpha_2, f(\alpha_2)), \dots, (\alpha_n, f(\alpha_n))$ とする Lagrange 補間式 $f_n(x)$ は (14.5) 式より

$$f_n(x) = \sum_{k=1}^n \frac{p_n(x)}{(x - \alpha_k)p'_n(\alpha_k)} f(\alpha_k) \quad (15.18)$$

となる。この式は Cristoffel-Darboux の公式を使って変形することができる。

まず, (15.17) の上式において $y = \alpha_k$, 下式において $x = \alpha_k$ の時にはそれぞれ

$$\sum_{i=0}^{n-1} \frac{p_i(x)p_i(\alpha_k)}{\lambda_i} = \frac{\mu_{n-1}}{\lambda_{n-1}\mu_n} \frac{p_n(x)p_{n-1}(\alpha_k)}{x - \alpha_k}$$

$$\sum_{i=0}^{n-1} \frac{(p_i(\alpha_k))^2}{\lambda_i} = \frac{\mu_{n-1}}{\lambda_{n-1}\mu_n} (p_{n-1}(\alpha_k)p'_n(\alpha_k))$$

となる。ここで w_k を

$$\frac{1}{w_k} = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(p_i(\alpha_k))^2}{\lambda_i} = \frac{\mu_{n-1}}{\lambda_{n-1}\mu_n} p_{n-1}(\alpha_k) p'_n(\alpha_k) \quad (15.19)$$

と置けば、

$$\frac{p_n(x)}{(x - \alpha_k) p'_n(\alpha_k)} = w_k \sum_{i=0}^{n-1} \frac{p_i(x) p_i(\alpha_k)}{\lambda_i}$$

となるので、 $f_n(x)$ は

$$f_n(x) = \sum_{k=1}^n \left(w_k \sum_{i=0}^{n-1} \frac{p_i(x) p_i(\alpha_k)}{\lambda_i} \right) f(\alpha_k) \quad (15.20)$$

と表現できる。これを $f(x)$ の直交多項式補間と呼ぶ。

15.4.2 Gauss 型積分の重みと分点

Gauss 型積分公式は、(15.14) 式の重み付き積分を $f(x)$ を直交多項式補間 $f_n(x)$ を用いて

$$\int_a^b w(x) f(x) dx \approx \int_a^b w(x) f_n(x) dx$$

と近似することで得られる。

(15.20) 式より

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x) f_n(x) dx &= \int_a^b w(x) \left\{ \sum_{k=1}^n w_k \left(\sum_{i=0}^{n-1} \frac{p_i(x) p_i(\alpha_k)}{\lambda_i} \right) f(\alpha_k) \right\} dx \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} \frac{1}{\lambda_i} \left\{ \sum_{k=1}^n w_k p_i(\alpha_k) f(\alpha_k) \left(\int_a^b w(x) p_i(x) dx \right) \right\} \end{aligned} \quad (15.21)$$

を得る。ここで $\{p_n(x)\}$ の直交性 (15.15) より

$$\int_a^b w(x) p_i(x) dx = \frac{1}{\mu_0} \int_a^b w(x) p_i(x) p_0(x) dx = \begin{cases} \frac{\lambda_0}{\mu_0} & (i = 0) \\ 0 & (i \neq 0) \end{cases}$$

より、(15.21) 式は

$$\int_a^b w(x) f_n(x) dx = \sum_{k=1}^n w_k f(\alpha_k) \quad (15.22)$$

となる。これが Gauss 型積分公式である。このうち、 w_k を積分公式の重み係数、 $p_n(x)$ の零点 $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ を積分公式の分点と呼ぶ。Newton-Cotes 型の積分公式と違い、使用する直交多項式 $p_n(x)$ に応じて自動的に分点が決定されることに注意せよ。

以下、表 15.4 に Legendre 多項式 $P_i(x)$ を用いた Gauss 積分公式 (Gauss-Legendre 公式) の係数表を示す。分点が $P_i(x)$ の根 $\alpha_1, \dots, \alpha_i$ で、重み係数が w_i を意味する。この場合、 $w(x) = 1$ であるから

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{k=1}^n w_k f(\alpha_k)$$

となる。これを一般の区間 $[a, b]$ に対して用いるには変数の一次変換

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

を行い,

$$\int_{-1}^1 f(t)dt$$

を計算すればよい。

例題 15.4.1

定積分

$$\int_1^2 \frac{1}{x^2} dx = \frac{1}{2}$$

を台形則, Simpson の 1/3 公式, Gauss-Legendre 公式を用いて, IEEE754 倍精度計算で求めると次のようになる。

台形則	$6.2500000000000000 \times 10^{-1}$
Gauss-Legendre(2 点)	$4.97041420118343180 \times 10^{-1}$
Simpson(1/3 公式)	$5.04629629629629539 \times 10^{-1}$
Gauss-Legendre(3 点)	$4.99874023683547497 \times 10^{-1}$

もし, $f(x)$ が $2n-1$ 次多項式 $g_{2n-1}(x)$ であれば, $n-1$ 次多項式 $h_{n-1}(x), q_{n-1}(x)$ を用いて

$$g_{2n-1}(x) = h_{n-1}(x)p_n(x) + q_{n-1}(x)$$

と表現できる。この時, $p_n(x)$ の零点 α_i ($i = 1, 2, \dots, n$) においては

$$g_{2n-1}(\alpha_i) = q_{n-1}(\alpha_i) \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

となるので, $q_{n-1}(x)$ は $(\alpha_i, q_{n-1}(\alpha_i))$ ($i = 1, 2, \dots, n$) を通過する直交補間多項式である。また, 直交多項式の性質より, $h_{n-1}(x)$ は $p_0(x), p_1(x), \dots, p_{n-1}(x)$ の一次結合で表現できるので,

$$\begin{aligned} \int_a^b w(x)g_{2n-1}(x)dx &= \int_a^b w(x)h_{n-1}(x)p_n(x)dx + \int_a^b w(x)q_{n-1}(x)dx \\ &= 0 + \int_a^b w(x)q_{n-1}(x)dx = \sum_{k=1}^n w_k q_{n-1}(\alpha_k) \\ &= \sum_{k=1}^n w_k g_{2n-1}(\alpha_k) \end{aligned}$$

となり, Gauss 型積分公式は $2n-1$ 次多項式の正確な重み付き定積分の値を与えていることが分かる。つまり, 一般の無限連続微分可能な関数 $f(x)$ の $2n-1$ 次部分までは正確な積分値を与えていることになる。 n 個の補間点で $2n-1$ 次 order が得られるため, Gauss 型積分公式は最適な積分公式と言われている。

表 15.4: Gauss-Legendre 公式の分点と重み係数

分点	重み係数
2 点公式	
-0.577350269189625764509148780501	1
+0.577350269189625764509148780501	1
3 点公式	
-0.774596669241483377035853079956	0.555555555555555555555555555555
0	0.888888888888888888888888888888
+0.774596669241483377035853079956	0.555555555555555555555555555555
4 点公式	
-0.861136311594052575223946488892	0.347854845137453857373063949221
-0.339981043584856264802665759103	0.652145154862546142626936050778
+0.339981043584856264802665759103	0.652145154862546142626936050778
+0.861136311594052575223946488892	0.347854845137453857373063949221
5 点公式	
-0.906179845938663992797626878299	0.236926885056189087514264040719
-0.538469310105683091036314420700	0.478628670499366468041291514835
0	0.568888888888888888888888888888
+0.538469310105683091036314420700	0.478628670499366468041291514835
+0.906179845938663992797626878299	0.236926885056189087514264040719
6 点公式	
-0.932469514203152027812301554493	0.171324492379170345040296142172
-0.661209386466264513661399595019	0.360761573048438607569833513837
-0.238619186093196908630501721680	0.467913934572691047389870343989
+0.238619186093196908630501721680	0.467913934572691047389870343989
+0.661209386466264513661399595019	0.360761573048438607569833513837
+0.932469514203152027812301554493	0.171324492379170345040296142172
7 点公式	
-0.949107912342758524526189684047	0.129484966168869693270611432679
-0.741531185599394439863864773280	0.279705391489276667901467771423
-0.405845151377397166906606412076	0.381830050505118944950369775488
0	0.417959183673469387755102040816
+0.405845151377397166906606412076	0.381830050505118944950369775488
+0.741531185599394439863864773280	0.279705391489276667901467771423
+0.949107912342758524526189684047	0.129484966168869693270611432679

問題 15.4.1

定積分

$$\int_0^{\pi} \sin x \, dx$$

の真値を求め、を Gauss-Legendre 公式の 2 点, 3 点, 4 点公式を用いて求めた近似値の相対誤差をそれぞれ算出せよ。

演習問題

1. 例題 15.1.1 において、次の問いに答えよ。

- (a) 真の導関数 $f'(x)$ を求めよ。
- (b) 図 15.1 を参考にし、 $\Delta f(\pi/4)/h$ と $\delta f(\pi/4)/h$ が $f'(\pi/4)$ の近似値として 10 進 5 桁程度の精度を持つよう h を決め、実際に計算してみよ。またその時の相対誤差もあわせて求めよ。

2. 定積分

$$\int_1^2 \log x \, dx$$

の値を求めたい。この時、次の問に答えよ。

- (a) この定積分の真値を求めよ。
 - (b) この定積分の値を、積分区間の分割数は 4 として、台形則を用いて求めよ。また、求めた近似値の相対誤差も算出せよ。
 - (c) この定積分の値を、積分区間の分割数は 4 として、Simpson の 1/3 公式を用いて求めよ。また、求めた近似値の相対誤差も算出せよ。
 - (d) この定積分の値を、Gauss-Legendre の 4 点公式を用いて求めよ。また、求めた近似値の相対誤差も算出せよ。
3. $f'''(x)$, $f^{(4)}(x)$ の近似値を計算するための差分商を求めよ。またその時の打ち切り誤差はどの程度か？
4. (15.9) 式から、Simpson の 1/3 公式における係数 c , d_0 , d_1 , d_2 が導出できることを確認せよ。
5. 改良台形則

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2}(f(x_0) + 2f(x_1) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)) + \frac{h}{24}(-f(x_0-h) + f(x_1) + f(x_{n-1}) - f(x_n+h))$$

は台形則よりも打ち切り誤差が小さいことを確認せよ。