Gauss-Legendre 数値積分 [1, 2]

2018 年 11 月 8 日

1 はじめに

n 個の分点における関数値を与えれば、$n-1$ 次 (以下の) 多項式は決定できるため、例えば Lagrange 補間多項式などを用いて積分を数値的に行うことができる。

一方、Gauss-Legendre 積分では、n 個の分点における関数値を用いて、$2n-1$ 次 (以下の) 多項式の積分を実現することができる。実際には重みを n 個使用するため使用するパラメタは $2n$ 個となるが、重みは事前に計算して保存しておけるため関数値を求める必要がなくなる。

2 原理

たかだか $(2n-1)$ 次の多項式 $f(x)$ の $[-1,1]$ の区間における積分を n 個の点 x_i と n 個の重み係数 w_i を用いて以下の式で表す。

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) \tag{1}$$

ここで、x_i は n 次の Legendre 多項式の零点をとり、w_i については以下の式からとる。

$$w_i = \frac{2(1-x_i^2)}{(n+1)^2\{P_{n+1}(x_i)\}^2} = \frac{2}{(1-x_i^2)\{P_n'(x_i)\}^2} \tag{2}$$

任意区間 $[a,b]$ の積分は適当な変数変換で $[-1,1]$ の区間の積分に直せるので、上記の問題が解ければ一般的に積分は可能である。

$f(x)$ を以下の形で表す。

$$f(x) = P_n(x)Q_{n-1}(x) + R_{n-1}(x) \tag{3}$$

ここで、$P_n(x)$ は n 次の Legendre 多項式であり、$Q_{n-1}(x), R_{n-1}(x)$ は $n-1$ 次の多項式である。

両辺を区間 $[-1,1]$ で積分する。

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \int_{-1}^{1} P_n(x)Q_{n-1}(x)dx + \int_{-1}^{1} R_{n-1}(x)dx \tag{4}$$

ここで、右辺第一項は Legendre 多項式の直交性から 0 となる。従って、

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \int_{-1}^{1} R_{n-1}(x)dx \tag{5}$$

と表せる。$R_{n-1}(x)$ は未知であるが、Legendre 関数の零点 x_i において

$$f(x_i) = P_n(x_i)Q_{n-1}(x_i) + R_{n-1}(x_i) = R_{n-1}(x_i) \qquad (\because P_n(x_i) = 0) \tag{6}$$

より、$R_{n-1}(x_i) = f(x_i)$ を知ることができる。

ここで、$R_{n-1}(x)$ は Lagrange 補間を用いて以下のように表すことができる。

$$\begin{aligned} R_{n-1}(x) &= f(x_1)\frac{(x-x_2)(x-x_3)\cdots(x-x_n)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)\cdots(x_1-x_n)} + f(x_2)\frac{(x-x_1)(x-x_3)\cdots(x-x_n)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)\cdots(x_2-x_n)} + \cdots \\ &= \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\frac{\prod_{j\neq i}(x-x_j)}{\prod_{j\neq i}(x_i-x_j)} \qquad (7) \end{aligned}$$

従って、

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{1} f(x)dx = \int_{-1}^{1} R_{n-1}(x)dx &= \int_{-1}^{1} \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\frac{\prod_{j\neq i}(x-x_j)}{\prod_{j\neq i}(x_i-x_j)}dx \\ &= \sum_{i=1}^{n} f(x_i)\int_{-1}^{1}\frac{\prod_{j\neq i}(x-x_j)}{\prod_{j\neq i}(x_i-x_j)}dx = \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) \qquad (8) \end{aligned}$$

となる。$w_i = \displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{\prod_{j\neq i}(x-x_j)}{\prod_{j\neq i}(x_i-x_j)}dx$ とおけば与えられた形に表すことができる。w_i は予め計算をしておくことが可能である。

■零点と重みの計算法 (1): x_i は以下のようにして求めることができる。n 次の Legendre 多項式は零点 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ を用いて $P_n(x) = C_p(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n) = C(x^n + p_{n-1}x^{n-1} + \cdots + p_1 x + p_0)$ と表せる。$Q_{n-1}(x)$ を

$$Q_{n-1}(x) = C_q(x^{n-1} + q_{n-2}x^{n-2} + \cdots q_1 x + q_0) \qquad (9)$$

と表すと、

$$\begin{aligned} P_n(x)Q_{n-1}(x) = C_pC_q\{&x^{2n-1} + (q_{n-2}+p_{n-1})x^{2n-2} + (q_{n-3}+p_{n-1}q_{n-2}+p_{n-2})x^{2n-3} \\ &+ \cdots + (p_1q_0 + p_0q_1)x + p_0q_0\} \qquad (10) \end{aligned}$$

となる。上式を区間 $[-1, 1]$ で積分すると x^{2m-1} 次の項は奇関数より 0 となる。偶関数のみ評価すると、

$$\begin{aligned} \frac{1}{2C_pC_q}\int_{-1}^{1} P_n(x)Q_{n-1}(x)dx = \Bigg\{&\frac{q_{n-2}+p_{n-1}}{2n-1} + \frac{q_{n-4}+q_{n-3}p_{n-1}+q_{n-2}p_{n-2}+p_{n-3}}{2n-3} \\ &+ \cdots + \frac{p_2q_0+p_1q_1+p_0q_2}{3} + p_0q_0\Bigg\} \qquad (11) \end{aligned}$$

となる。q_i が任意でもこの積分が 0 となるためには、$q_{n-2}, q_{n-3}, \cdots, q_1, q_0$ の係数が全て 0 となる必要がある。これを満たす $p_{n-1}, p_{n-2}, \cdots, p_0$ を求め、$x^n + p_{n-1}x^{n-1} + \cdots + p_1 x + p_0 = 0$ となる解を計算すればよい。

■零点と重みの計算法 (2): Legendre 多項式の漸化式は以下で与えられる。

$$P_0(x) = 1 \qquad (12)$$

$$P_1(x) = x \qquad (13)$$

$$P_n(x) = \frac{2n-1}{n}xP_{n-1}(x) - \frac{n-1}{n}P_{n-2}(x) \qquad (14)$$

これにより 計算できる $P_n(x) = 0$ の解を 求める。

参考文献

[1] 戸田, 小野, 入門 数値計算 —チャート による解説とプログラム—, オーム社, 1983.

[2] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 77, 2nd Ed.*, Cambridge University Press, 2003.