ガウス求積法の導出

sikino *（初版）March. 8, 2021

September 4, 2021

Contents

* https://slpr.sakura.ne.jp/qp/

1　ガウス求積法の導出

導出は以下の順番で行う。

1. M 個の離散的な点を用いて N 次多項式を厳密に積分できるとき、N と M の関係を調べる (節 2.1)。
2. 具体的に、M 点の位置と重みを調べる (節 2.2, 節 2.3)。

ガウス求積法を利用する方は、1. が分かればよいと思う。ガウス求積法を研究する方は、2. まで分かればよいと思う

2　導出過程

2.1　点数と次数の関係

N 次多項式を有限区間 $[-1, 1]$ で、M 個の点を用いて数値的に厳密に積分したい。つまり、関数 $f(x)$ が $N+1$ 個の既知の係数 a_n を用いて

$$f(x) = \sum_{n=0}^{N} a_n x^n \tag{1}$$

と掛けている場合に、積分

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \tag{2}$$

を考えたい。この積分を離散的な点だけを用いて計算したい。つまり、適当な M 個の点を用いて

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{i=1}^{M} f(x_i)\omega_i \tag{3}$$

となるような x_i, ω_i の組み合わせを求めることが目標である。

まず、Eq. (3) の左辺を積分すると、

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{1} f(x)dx &= \int_{-1}^{1} \sum_{n=0}^{N} a_n x^n dx & (4) \\ &= \sum_{n=0}^{N} a_n \left(\frac{1-(-1)^{n+1}}{n+1} \right) & (5) \end{aligned}$$

である。

Eq. (3) の右辺を計算すると、

$$\sum_{i=1}^{M} f(x_i)\omega_i = \sum_{i=1}^{M}\sum_{n=0}^{N} a_n x_i^n \omega_i \tag{6}$$

$$= \sum_{n=0}^{N} a_n \left(\sum_{i=1}^{M} \omega_i x_i^n\right) \tag{7}$$

と書ける。ここで、ω_i は重みであり、適当な係数である。もしも、任意の a_n について Eq. (3) の右辺と左辺が厳密に一致するならば、$n = 0, 1, \cdots, N$ について、

$$\frac{1-(-1)^{n+1}}{n+1} = \sum_{i=1}^{M} \omega_i x_i^n, \quad (n = 0, 1, \cdots, N) \tag{8}$$

が成立する。この式は $N+1$ 個の方程式であり、左辺は $N+1$ の自由度を持っている。右辺の未知の係数は $\omega_i, x_i, (i = 1, \cdots, M)$ なので、右辺の自由度は $2M$ である。つまり、両辺を一致させるような係数の組み合わせがあるならば、

$$N + 1 \leq 2M \quad \rightarrow \quad N \leq 2M - 1 \tag{9}$$

である必要がある。よって、最小の組み合わせであるならば上式の等号が成立する。できるだけ少ない点数で計算したいので、等しい場合を採用して

$$N = 2M - 1 \tag{10}$$

である。つまり、M 個の点を利用すれば $2M-1$ 次の多項式を厳密に計算できる点の位置 x_i と w_i が存在する。

2.2 具体的な分点の位置

積分

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \tag{11}$$

を求めるために、離散的な N 個の点 $x = x_i$ における $f(x)$ の値を利用する。つまり、

$$(x_1, f_1),\ (x_2, f_2), \cdots, (x_N, f_N) \tag{12}$$

の点が既知とする。ここで、$f_i \equiv f(x_i)$ と定義した（この時点でまだ x_i は決まっていない)。ここで新たな関数 $F(x)$ を定義する。$F(x)$ は、Eq. (12) の N 個の点を全て通る $N-1$ 次多項式であり、一意に決まる関数として定義する。具体的には、ラグランジュ多項式を用いて

$$F(x) = \sum_{k=1}^{N} f_k \left(\prod_{\substack{i=1,\\ i\neq k}}^{N} \frac{x - x_i}{x_k - x_i} \right) \tag{13}$$

と定義される。ここで、更に $f(x)$ と $F(x)$ の差の関数 $g(x)$

$$g(x) \equiv f(x) - F(x) \tag{14}$$

を定義する。次数を確認しておくと、$g(x), f(x)$ は $2N-1$ 次、$F(x)$ は $N-1$ 次多項式である。ここで、$f(x_i) = F(x_i),$ (for all i) なので、$g(x)$ は

$$g(x_1) = g(x_2) = \cdots = g(x_N) = 0 \tag{15}$$

の性質を持つ。積分を考えると

$$\int_{-1}^{1} g(x)dx \ \ = \ \ \int_{-1}^{1} f(x)dx - \int_{-1}^{1} F(x)dx \tag{16}$$

であり、$F(x)$ を Eq. (3) のように離散的に表して、

$$\int_{-1}^{1} g(x)dx \ \ = \ \ \int_{-1}^{1} f(x)dx - \sum_{i=1}^{N} F(x_i)\omega_i \tag{17}$$

である。今、$f(x)$ は $2N-1$ 次であり、$F(x)$ は N 個の点で表現されているので、前節の議論から Eq. (17) をゼロにするような (x_i, ω_i) の組み合わせが存在する。今, $g(x)$ は Eq. (15) の性質を持つことが分かっているので、N 個の x_i について、

$$g(x) = (x - x_1)(x - x_2)\cdots(x - x_N)G(x) \tag{18}$$

と書き換えることができる。ここで、$(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_N)$ は N 次多項式であり、$G(x)$ は $N-1$ 次多項式である。つまり、

$$\int_{-1}^{1} g(x)dx = \int_{-1}^{1} (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_N)G(x)dx = 0 \tag{19}$$

を満たす N 個の $x=x_i$ を探すことができれば嬉しい。ここで、$G(x)$ は $N-1$ 次多項式なので、$N-1$ 次の legendre 多項式を用いた基底関数で展開可能であるので、

$$G(x) = \sum_{j=0}^{N-1} \alpha_j x^j = \sum_{j=0}^{N-1} a_j P_j(x) \tag{20}$$

と書くことができる。また、

$$(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_N) \tag{21}$$

は N 次なので、N 次多項式の関数で書くことができる。N 次多項式として N 次 legendre 多項式 $P_N(x)$ を選ぶことにする。単に N 次であるだけだと、N 次以下の全ての legendre 多項式の和で書かなければならないが、点 $x_1, x_2, \cdots, x_N$ を $P_N(x)=0$ を満たす N 個の点を選ぶとする。このようにすると、N 次だけの legendre 多項式だけで書くことができて、

$$(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_N) = cP_N(x) \tag{22}$$

とする定数 c を見つけられる [1]。

Eq. (19) に Eq. (20), Eq. (22) を代入すると

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} g(x)dx &= \int_{-1}^{1} cP_N(x) \sum_{j=0}^{N-1} a_j P_j(x) dx && (23a)\\
&= c\sum_{j=0}^{N-1} a_j \int_{-1}^{1} P_N(x)P_j(x)dx && (23b)\\
&= \frac{2}{2N+1} c \sum_{j=0}^{N-1} a_j \delta_{N,j} && (23c)\\
&= 0 && (23d)
\end{aligned}$$

[1] これからの議論において、定数 c を具体的に決める必要はないが決めたい場合

$$(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_N) = \frac{2^N (N!)^2}{(2N)!} P_N(x)$$

の関係から決まる。https://coast.nd.edu/jjwteach/www/www/30125/pdfnotes/lecture16_19v17.pdf

となる。これはつまり、N 次 legendre 多項式のゼロ点を求積法におけるゼロ点として選ぶと

$$\int_{-1}^{1} g(x)dx = \int_{-1}^{1} f(x)dx - \sum_{i=1}^{N} F(x_i)\omega_i = 0 \tag{24}$$

を満たすようにできるということである。

ここまでの議論で、分点の位置 x_i が求まった。残るは重み ω_i を決めることである。

2.3 具体的な分点の重み

前節までの議論から、$2N-1$ 次の多項式で記述される $f(x)$ の積分は、N 個の点を用いて

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\omega_i \tag{25}$$

を厳密に積分する分点の位置と重み x_i, ω_i の組があることを示し、分点の位置 x_i は、N 次 legendre 多項式のゼロ点、すなわち

$$P_N(x) = 0 \tag{26}$$

を満たす N 個のゼロ点であることが分かった。次は重みを決める。Eq. (16) より $2N-1$ 次の $f(x)$ を N 次の legendre 多項式のゼロ点を通る多項式の積分に置き換えできる。Eq. (13) を用いて

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} f(x)dx &= \int_{-1}^{1} F(x)dx && \text{(27a)}\\
&= \int_{-1}^{1} \sum_{k=1}^{N} f_k \left(\prod_{\substack{i=1,\\ i\neq k}}^{N} \frac{x-x_i}{x_k-x_i} \right) dx && \text{(27b)}\\
&= \sum_{k=1}^{N} f_k \int_{-1}^{1} \left(\prod_{\substack{i=1,\\ i\neq k}}^{N} \frac{x-x_i}{x_k-x_i} \right) dx && \text{(27c)}\\
&= \sum_{k=1}^{N} f_k \omega_k && \text{(27d)}
\end{aligned}$$

である。つまり、重みは

$$\omega_k = \int_{-1}^{1} \left(\prod_{\substack{i=1\\ i\neq k}}^{N} \frac{x-x_i}{x_k-x_i} \right) dx \tag{28}$$

であるので、これを求めることが問題となる。Eq. (22) から、

$$(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_N) = cP_N(x) \tag{29}$$

分かっている。k 番目の式についてまとめると、

$$\prod_{\substack{i=1\\i\neq k}}^{N}(x-x_i)=\frac{cP_N(x)}{x-x_k} \tag{30}$$

また、Eq. (29) の両辺を微分すると

$$\begin{aligned} cP_N'(x) &= \frac{\partial}{\partial x}\left[(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_N)\right] && (31a)\\ &= \Big[(x-x_2)(x-x_3)\cdots(x-x_N)+ \\ &\qquad (x-x_1)(x-x_3)\cdots(x-x_N)+ \\ &\qquad (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_{N-1})\Big] && (31b)\\ &= \sum_{j=1}^{N}\prod_{\substack{i=1\\i\neq j}}^{N}(x-x_i) && (31c)\end{aligned}$$

と求められる。特に、$x=x_k$ ならば、

$$cP_N'(x_k)=\prod_{\substack{i=1\\i\neq k}}^{N}(x_k-x_i) \tag{32}$$

Eq. (30) と Eq. (32) を組み合わせると、

$$\begin{aligned} \prod_{\substack{i=1\\i\neq k}}^{N}\frac{x-x_i}{x_k-x_i} &= \frac{cP_N(x)}{x-x_k}\cdot\frac{1}{cP_N'(x_k)} && (33a)\\ &= \frac{P_N(x)}{(x-x_k)P_N'(x_k)} && (33b)\end{aligned}$$

なので、重み ω_k は

$$\begin{aligned} \omega_k &= \int_{-1}^{1}\left(\prod_{\substack{i=1\\i\neq k}}^{N}\frac{x-x_i}{x_k-x_i}\right)dx && (34a)\\ &= \int_{-1}^{1}\frac{P_N(x)}{(x-x_k)P_N'(x_k)}dx && (34b)\end{aligned}$$

となる。この積分を計算するために多項式の性質を用いて計算を進める。右辺の形は、クリストッフェル=ダルブーの定理から導けそうな形であることを当たりをつけて計算する[2]。

[2]我々凡人には思い付かないとおもいます。天下り的に使います。導けるからそれで良いです

直交多項式（Legendre 多項式や Laguerre 多項式など）にはクリストッフェル＝ダルブーの定理 (Christoffel—Darboux theorem) がある。それは、n 次の直交多項式を $p_n(x)$ と書くとき、$p_n(x)$ には

$$\sum_{j=0}^{N} \frac{p_j(x)p_j(y)}{h_j} = \frac{k_N}{h_N k_{N+1}} \frac{p_{N+1}(x)p_N(y) - p_N(x)p_{N+1}(y)}{x-y} \tag{35}$$

という性質である。ここで、k_n は、直交多項式 $p_n(x)$ の x^n の係数で、

$$p_n(x) = k_n x^n + \cdots \tag{36}$$

で表されるときの係数である。これを求めてみる。求めるために、legendre 多項式の性質の一つである三項漸化式

$$(n+1)P_{n+1}(x) = (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x) \tag{37}$$

を用いる。x の次数で両辺を比較すると

$$(n+1)[k_{n+1}x^{n+1} + \cdots] = (2n+1)[xk_n x^n + \cdots] \tag{38}$$

なので、次数を比較すれば最高次の係数について

$$(n+1)k_{n+1} = (2n+1)k_n \tag{39}$$

の関係がある。よって、

$$\frac{k_{n+1}}{k_n} = \frac{2n+1}{n+1} \tag{40}$$

を得る。

また、h_N は直交性から導かれる係数で、

$$\int_{-1}^{1} p_n(x)p_m(x)w(x)dx = h_n \delta_{nm} \tag{41}$$

を満たす。legendre 多項式の場合、$w(x) = 1$ であり、$h_n = \frac{2}{2n+1}$ である。

重みの計算に使いたいため、$N \to N-1$ に置き換え、legendre 多項式の場合に適用、さらに $y = x_k$ の場合にクリストッフェル＝ダルブーの定理は、

$$\begin{aligned}
\sum_{j=0}^{N-1} \frac{P_j(x)P_j(x_k)}{h_j} &= \frac{k_{N-1}}{h_{N-1}k_N} \frac{P_N(x)P_{N-1}(x_k) - P_{N-1}(x)P_N(x_k)}{x - x_k} && \text{(42a)} \\
&= \frac{2N-1}{2} \cdot \frac{N}{2N-1} \cdot \frac{P_N(x)P_{N-1}(x_k)}{x - x_k} && \text{(42b)} \\
&= \frac{NP_{N-1}(x_k)}{2} \frac{P_N(x)}{x - x_k} && \text{(42c)}
\end{aligned}$$

となるので、

$$\frac{P_N(x)}{x-x_k} = \frac{2}{NP_{N-1}(x_k)}\sum_{j=0}^{N-1}\frac{P_j(x)P_j(x_k)}{h_j} \tag{43}$$

$$= \frac{1}{NP_{N-1}(x_k)}\sum_{j=0}^{N-1}P_j(x)P_j(x_k)(2j+1) \tag{44}$$

という関係式を得る。ここで $P_N(x_k)=0$ を利用した。

Eq. (34a) に Eq. (44) を代入して、

$$\omega_k = \int_{-1}^{1}\frac{P_N(x)}{(x-x_k)P'_N(x_k)}dx \tag{45a}$$

$$= \int_{-1}^{1}\frac{1}{NP_{N-1}(x_k)}\sum_{j=0}^{N-1}(2j+1)P_j(x)P_j(x_k)\frac{1}{P'_N(x_k)}dx \tag{45b}$$

$$= \frac{1}{NP_{N-1}(x_k)P'_N(x_k)}\sum_{j=0}^{N-1}(2j+1)P_j(x_k)\cdot\int_{-1}^{1}P_j(x)dx \tag{45c}$$

$$= \frac{1}{NP_{N-1}(x_k)P'_N(x_k)}\sum_{j=0}^{N-1}(2j+1)P_j(x_k)\cdot 2\delta_{j,0} \tag{45d}$$

$$= \frac{2}{NP_{N-1}(x_k)P'_N(x_k)} \tag{45e}$$

となる。$P_n(x)$ の微分は次数は一つ下がるので、$P_{n-1}(x)$ と同じ次数になり、何か関係がありそうであるので頑張って見つけてみる。そこで微分に関する三項漸化式

$$(1-x^2)P'_n(x) = -nxP_n(x) + nP_{n-1}(x) \tag{46}$$

を用いる。特に $n=N,\ x=x_k$ の場合、

$$(1-x_k^2)P'_N(x_k) = -Nx_kP_N(x_k) + NP_{N-1}(x_k) \tag{47a}$$

$$\rightarrow\ NP_{N-1}(x_k) = (1-x_k^2)P'_N(x_k) \tag{47b}$$

の関係があるので、代入すると

$$\omega_k = \frac{2}{NP_{N-1}(x_k)P'_N(x_k)} \tag{48a}$$

$$= \frac{2}{(1-x_k^2)[P'_N(x_k)]^2} \tag{48b}$$

$$= \frac{2(1-x_k^2)}{[NP_{N-1}(x_k)]^2} \tag{48c}$$

とまとめられる。

3　まとめ

$2N-1$ 次以下の多項式 $f(x)$ の積分を、N 個の点だけを用いて厳密に計算できる。つまり、

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{i=1}^{N} f(x_i)\omega_i \tag{49}$$

を計算する点の位置 x_i と w_i が存在し、x_i, ω_i は

$$P_N(x) = 0 \ \to \ x = x_i, \tag{50}$$

$$\omega_i = \frac{2}{(1-x_i^2)[P'_N(x_i)]^2} \tag{51}$$

から求めることができる。ここで、$P_n(x)$ は n 次ルジャンドル多項式である。

4　参考文献など

恐らく、ガウスが発表した論文がこれではないかと思います。ドイツ語の wikipedia（https://de.wikipedia.org/wiki/Gau%C3%9F-Quadratur）にリンクがありました。
Methodus nova integralium valores per approximationem inveniendi. In: Comm. Soc. Sci. Gttingen Math. Band 3, 1815, S. 29—76

Abramowitz and Stegun, " Handbook of Mathematical Functions. "
https://www.math.ubc.ca/~cbm/aands/page_887.htm

L. Bos et al, " An Orthogonality Property of the Legendre Polynomials ", Constr Approx (2016)
https://math.indiana.edu/promotion/files/legendrepaperinprintCA.pdf

LECTURE 16GAUSS QUADRATURE
https://coast.nd.edu/jjwteach/www/www/30125/pdfnotes/lecture16_19v17.pdf

Identities and properties for associated Legendre functions
https://www.mat.univie.ac.at/~westra/associatedlegendrefunctions.pdf

Christoffel—Darboux formula -wikipedia
https://en.wikipedia.org/wiki/Christoffel%E2%80%93Darboux_formula