

複合積分則の剩余項について

愛知工業大学電子工学科 秦野和郎 (Kazuo Hatano)

1. まえがき

本稿は、一般に補間型の積分則を複合化させて得られる、複合積分則 (Composite(or Compound) Quadrature Rule) の剩余項に関する議論である。よく知られるように、複合台形則には

$$\text{積分値} = \text{複合台形則} + \text{端補正項} + \text{積分剩余項} \quad (1.1)$$

の形の打ち切り誤差を伴う公式がある。すなわち、Euler-Maclaurin の総和公式である。 $x_j = x_0 + jh : j = \dots, -1, 0, 1, \dots$ とすると、第一 Euler-Maclaurin の総和公式は、

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(y) dy &= h \left\{ \frac{1}{2} f(x_0) + \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) + \frac{1}{2} f(x_n) \right\} \\ &\quad - h \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k}}{(2k)!} h^{2k-1} \left\{ f^{(2k-1)}(x_n) - f^{(2k-1)}(x_0) \right\} \\ &\quad - \frac{h^{2m+3}}{(2m+2)!} \int_0^n \left\{ B_{2m+2} - \bar{B}_{2m+2}(t) \right\} f^{(2m+2)}(x_0 + ht) dt \end{aligned} \quad (1.2)$$

で与えられる。ここで、 $\bar{B}_k(t) : t \in (-\infty, \infty)$ は k 次の周期 Bernoulli 関数 (periodic Bernoulli function, Bernoulli monospline) であり、

$$\frac{te^{xt}}{e^t - 1} = \sum_{k=0}^{\infty} B_k(x) \frac{t^k}{k!} : |t| < 2\pi \quad (1.3)$$

で定義される Bernoulli 多項式、 $B_k(x) : x \in [0, 1]$ を周期 1 で実軸上に周期的に延長して得られる区分的多項式である。また、 $B_k = B_k(0) : k \geq 0$ は Bernoulli 数である。

複合中点則についても同じような公式が知られている。すなわち、第二 Euler-Maclaurin の総和公式である。 $x_{j+1/2} = x_0 + (j + 1/2)h : j = \dots, -1, 0, 1, \dots$ とすると、第二 Euler-Maclaurin の総和公式は、次式で与えられる。すなわち、

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(y) dy &= h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_{j+1/2}) \\ &\quad - h \sum_{k=1}^m \frac{B_{2k}(\frac{1}{2})}{(2k)!} h^{2k-1} \left\{ f^{(2k-1)}(x_n) - f^{(2k-1)}(x_0) \right\} \\ &\quad - \frac{h^{2m+3}}{(2m+2)!} \int_0^n \left\{ B_{2m+2}(\frac{1}{2}) - \bar{B}_{2m+2}(t + \frac{1}{2}) \right\} f^{(2m+2)}(x_0 + ht) dt. \end{aligned} \quad (1.4)$$

である。

このように複合台形則や複合中点則については、式 (1.1) の形の展開式が知られている。このことから、複合 Simpson 則、複合 Newton-Cotes 則、複合 Gauss-Legendre 則などにつ

いてこのような公式を導けないかとの疑問が生ずる. 本稿では, これらの公式についても, 式(1.1)のように端補正項と積分剩余項を持つ展開式を導き得ることを述べ, その結果を示す.

2. 複合 Simpson 則の剩余項の導出.

本章では複合 Simpson 則に対して, 式(1.1)の形の展開式を導く. よく知られるように複合 Simpson 則は次の形で与えられる. すなわち,

$$Simp(f; x_0, x_n, n) = \frac{h}{6} \sum_{j=0}^{n-1} \{f(x_j) + 4f(x_{j+1/2}) + f(x_{j+1})\} \approx \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx. \quad (2.1)$$

である. 複合 Simpson 則に対して, 式(1.1)の形の公式を得るために, 一般 Euler-Maclaurin の総和公式を使う (Steffensen の本 [5] に載っている). $x_{j+\alpha} = x_0 + (j + \alpha)h : 0 \leq j \leq n - 1, 0 \leq \alpha < 1$ とすると, 一般 Euler-Maclaurin の総和公式は,

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(y) dy &= h \sum_{j=0}^{n-1} f(x_{j+\alpha}) - h \sum_{k=1}^m \frac{B_k(\alpha)}{k!} h^{k-1} \left\{ f^{(k-1)}(x_n) - f^{(k-1)}(x_0) \right\} \\ &\quad - \frac{h^{m+2}}{(m+1)!} \int_0^n \left\{ B_{m+1}(\alpha) - \bar{B}_{m+1}(\alpha - t) \right\} f^{(m+1)}(x_0 + ht) dt. \end{aligned} \quad (2.2)$$

で与えられる. 式(2.1)を参考にして, 式(2.2)で, $\alpha = 0, 1/2, 1$ とおき, それぞれに $1/6, 4/6, 1/6$ を掛けて両辺を加え合わせると

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(y) dy &= \frac{h}{6} \sum_{j=0}^{n-1} \{f(x_j) + 4f(x_{j+1/2}) + f(x_{j+1})\} \\ &\quad - h \sum_{k=1}^m \frac{1}{k!} \cdot \frac{1}{6} \left\{ B_k(0) + 4B_k\left(\frac{1}{2}\right) + B_k(1.1) \right\} h^{k-1} \left\{ f^{(k-1)}(x_n) - f^{(k-1)}(x_0) \right\} \\ &\quad - \frac{h^{m+2}}{(m+1)!} \int_0^n \frac{1}{6} \left[\left\{ B_{m+1}(0) - \bar{B}_{m+1}(-t) \right\} + 4 \left\{ B_{m+1}\left(\frac{1}{2}\right) - \bar{B}_{m+1}\left(\frac{1}{2} - t\right) \right\} \right. \\ &\quad \left. + \left\{ B_{m+1}(1.1) - \bar{B}_{m+1}(1-t) \right\} \right] f^{(m+1)}(x_0 + ht) dt \end{aligned} \quad (2.3)$$

を得る. Bernoulli 多項式の性質を使って, この式を簡潔にする.

式(2.3)の右辺第二項における因子,

$$\frac{1}{6} \left\{ B_k(0) + 4B_k\left(\frac{1}{2}\right) + B_k(1.1) \right\} = Simp(B_k, 0, 1, 1) \quad (2.4)$$

は, Bernoulli 多項式の積分, $\int_0^1 B_k(x) dx = 0 : k \geq 1$ の, Simpson 則により得られる積分の近似値である. Simpson 則は 3 次以下の多項式に対して正確な積分値を与える. 従って,

式 (2.3) の右辺第二項において, $k = 1, 2, 3$ に対する項は零である. 更に,

$$\begin{cases} -B_1(0) = B_1(1.1), \quad B_1\left(\frac{1}{2}\right) = 0, \\ B_{2k-1}(0) = B_{2k-1}\left(\frac{1}{2}\right) = B_{2k-1}(1.1) = 0 : k \geq 2, \\ B_{2k}(0) = B_{2k}(1.1) : k \geq 1 \end{cases} \quad (2.5)$$

を使い, 式 (2.3) における m を $2m+1$ で置き換えると. 式 (2.3) は,

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(y) dy &= \frac{h}{6} \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ f(x_j) + 4f(x_{j+1/2}) + f(x_{j+1}) \right\} \\ &\quad - \frac{h}{3} \sum_{k=2}^m \frac{1}{(2k)!} \left\{ B_{2k} + 2B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right) \right\} h^{2k-1} \left\{ f^{(2k-1)}(x_n) - f^{(2k-1)}(x_0) \right\} \\ &\quad - \frac{h^{2m+3}}{3 \cdot (2m+2)!} \int_0^n \left[\left\{ B_{2m+2} - \bar{B}_{2m+2}(t) \right\} \right. \\ &\quad \left. + 2 \left\{ B_{2m+2}\left(\frac{1}{2}\right) - \bar{B}_{2m+2}\left(\frac{1}{2} - t\right) \right\} \right] f^{(2m+2)}(x_0 + ht) dt \end{aligned} \quad (2.6)$$

となる. これが端補正項, 積分剩余項を持つ複合 Simpson 則である. 上の式は, 部分区間の個数が n 個であり, $h/2$ 間隔で $2n+1$ 個の標本点が与えられる公式になっている. この式は次のように, 部分区間の個数が n 個であり, h 間隔で $2n+1$ 個の標本点が与えられる公式の形に書くこともできる. すなわち,

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_{2n}} f(y) dy &= \frac{h}{3} \sum_{j=0}^{n-1} \left\{ f(x_{2j}) + 4f(x_{2j+1}) + f(x_{2j+2}) \right\} \\ &\quad - \frac{h}{3} \sum_{k=2}^m \frac{2^{2k}}{(2k)!} \left\{ B_{2k} + 2B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right) \right\} h^{2k-1} \left\{ f^{(2k-1)}(x_{2n}) - f^{(2k-1)}(x_0) \right\} \\ &\quad - \frac{2^{2m+2} \cdot h^{2m+3}}{3 \cdot (2m+2)!} \int_0^{2n} \left[\left\{ B_{2m+2} - \bar{B}_{2m+2}\left(\frac{t}{2}\right) \right\} \right. \\ &\quad \left. + 2 \left\{ B_{2m+2}\left(\frac{1}{2}\right) - \bar{B}_{2m+2}\left(\frac{1}{2} - \frac{t}{2}\right) \right\} \right] f^{(2m+2)}(x_0 + ht) dt \end{aligned} \quad (2.7)$$

である.

本章では, 複合 Simpson 則を例として, 一般化された Euler-Maclaurin の総和公式を使って, 式 (1.1) の形の展開式を導く手順を述べた. この手順は一般的な原理であるから他の公式にも適用できる. すなわち, この手順を, 複合 Newton-Cotes 則, 複合 Gauss-Legendre 則などに適用することは容易である. それにより, これらの積分則に対して, 式 (1.1) のような形の剩余項を持つ公式を導くことができる.

3. 複合 Newton-Cote 則の剩余項.

本章では、複合 Newton-Cotes 則の剩余項を導く。導かれる剩余項は、端補正項と積分剩余項との和からなる。導出手順は前章と全く同じである。閉じた Newton-Cotes 則と、開いた Newton-Cotes 則の両方について剩余項を導く。

3.1. 閉じた Newton-Cotes 則の場合

文献 [7] によれば、たとえば 4 次の閉じた Newton-Cotes 則は、

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)dx = \frac{2h}{45} \{7f(x_0) + 32f(x_1) + 12f(x_2) + 32f(x_3) + 7f(x_4)\} - \frac{8h^7}{945} f^{(6)}(\xi) : \xi \in [x_0, x_4] \quad (3.1)$$

で与えられる。また、5 次の閉じた Newton-Cotes 則は、

$$\int_{x_0}^{x_5} f(x)dx = \frac{5h}{288} \{19f(x_0) + 75f(x_1) + 50f(x_2) + 50f(x_3) + 75f(x_4) + 19f(x_5)\} - \frac{275h^7}{12096} f^{(6)}(\xi) : \xi \in [x_0, x_5] \quad (3.2)$$

で与えられる。このように、偶数次の閉じた Newton-Cotes 則では“次数+1”次以下の多項式に対して正確な積分値を与え、奇数次の閉じた Newton-Cotes 則では“次数”以下の多項式に対して正確な積分値を与える。

一般に $2l$ 次、 $2l+1$ 次の閉じた Newton-Cotes 則はそれぞれ、

$$\int_{x_0}^{x_{2l}} f(x)dx = h \sum_{i=0}^{2l} W_i f(x_i) + Eh^{2l+3} f^{(2l+2)}(\xi) : \xi \in [x_0, x_{2l}], \quad (3.3)$$

$$\int_{x_0}^{x_{2l+1}} f(x)dx = h \sum_{i=0}^{2l+1} W_i f(x_i) + Eh^{2l+3} f^{(2l+2)}(\xi) : \xi \in [x_0, x_{2l+1}] \quad (3.4)$$

で与えられる。ここで、 W_i, E は次数によって決まる定数 [7] であり、全ての $l \geq 1$ について、 $\sum_{i=0}^l W_i = l$ である。次に、

$$x_{j+i/l} = x_0 + (j + \frac{i}{l})h : 0 \leq j \leq n-1, 0 \leq i \leq l \quad (3.5)$$

とおくと、閉じた複合 Newton-Cotes 則は

$$CNew_l(f; x_0, x_n, n) = \frac{h}{l} \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i=0}^l W_i f(x_{j+i/l}) \approx \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \quad (3.6)$$

の形になる。前章におけると全く同じように、一般 Euler-Maclaurin の総和公式を使って、

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx &= \frac{h}{l} \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i=0}^l W_i f(x_{j+i/l}) \\ &\quad - \frac{h}{l} \sum_{k=1}^m \frac{1}{k!} \sum_{i=0}^l W_i B_k(\frac{i}{l}) h^{k-1} \{ f^{(k-1)}(x_n) - f^{(k-1)}(x_0) \} \\ &\quad - \frac{h^{m+2}}{l \cdot (m+1)!} \int_0^n \sum_{i=0}^l W_i \{ B_{m+1}(\frac{i}{l}) - \bar{B}_{m+1}(\frac{i}{l} - t) \} f^{(m+1)}(x_0 + ht) dt \end{aligned} \quad (3.7)$$

を得る。ここで、 $[x]$ を Gauss の記号、すなわち x を越えない最大の整数として、 $W_{l-i} = W_i$: $0 \leq i \leq [(l-1)/2]$ である。また、

$$\begin{cases} B_{2k-1}(1-t) = -B_{2k-1}(t) & : 1 \leq k, \\ B_{2k}(1-t) = B_{2k}(t) & : 0 \leq k \end{cases} \quad (3.8)$$

である。更に

$$\frac{1}{l} \sum_{i=0}^l W_i B_k(\frac{i}{l}) = C New_l(B_k, 0, 1, 1) \approx \int_0^1 B_k(x) dx = 0 \quad (3.9)$$

である。 l が偶数ならば $k \leq l+1$ に対して、 l が奇数ならば $k \leq l$ に対して、上式は近似的ではなく、正確に成り立つ。以上を使うと、式 (3.7) は

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(y) dy &= \frac{h}{l} \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i=0}^l W_i f(x_{j+i/l}) \\ &\quad - \frac{h}{l} \sum_{k=[l/2+1]}^m \frac{1}{(2k)!} \sum_{i=0}^l W_i B_{2k}(\frac{i}{l}) h^{2k-1} \{ f^{(2k-1)}(x_n) - f^{(2k-1)}(x_0) \} \\ &\quad - \frac{h^{2m+3}}{l \cdot (2m+2)!} \int_0^n \sum_{i=0}^l W_i \{ B_{2m+2}(\frac{i}{l}) - \bar{B}_{2m+2}(\frac{i}{l} - t) \} f^{(2m+2)}(x_0 + ht) dt \end{aligned} \quad (3.10)$$

と書き改められる。この式は、部分区間の個数が n 個であり、 h/l 間隔で $ln+1$ 個の標本点が与えられる公式である。この式は、また、次の形に書くことができる。すなわち、

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_{nl}} f(y) dy &= h \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i=0}^l W_i f(x_{jl+i}) \\ &\quad - h \sum_{k=[l/2+1]}^m \frac{l^{2k-1}}{(2k)!} \sum_{i=0}^l W_i B_{2k}(\frac{i}{l}) h^{2k-1} \{ f^{(2k-1)}(x_{nl}) - f^{(2k-1)}(x_0) \} \\ &\quad - \frac{l^{2m+1} \cdot h^{2m+3}}{(2m+2)!} \int_0^{nl} \sum_{i=0}^l W_i \{ B_{2m+2}(\frac{i}{l}) - \bar{B}_{2m+2}(\frac{i}{l} - \frac{t}{l}) \} f^{(2m+2)}(x_0 + ht) dt. \end{aligned} \quad (3.11)$$

である。この式は、部分区間の個数が n 個であり、 h 間隔で $ln + 1$ 個の標本点を与える形の公式である。

式 (3.10) から、閉じた複合 Newton-Cotes 則の積分剩余項は

$$\begin{cases} E(f; l, m, n) = \int_0^n G(t; l, m) f^{(2m+2)}(x_0 + ht) dt, \\ G(t; l, m) = -\frac{h^{2m+3}}{(2m+2)!} \cdot \frac{1}{l} \sum_{i=0}^l W_i \left\{ B_{2m+2}\left(\frac{i}{l}\right) - \bar{B}_{2m+2}\left(\frac{i}{l} - t\right) \right\} \end{cases} \quad (3.12)$$

と書くことができる。 $G(t; l, m)$ が定符号であると仮定すると、

$$\begin{cases} E(f; l, m, n) = \int_0^n G(t; l, m) dt \cdot f^{(2m+2)}(\xi) : \xi \in [x_0, x_n], \\ \int_0^n G(t; l, m) dt = -\frac{n \cdot h^{2m+3}}{(2m+2)!} \cdot \frac{1}{l} \sum_{i=0}^l W_i B_{2m+2}\left(\frac{i}{l}\right) \end{cases} \quad (3.13)$$

となるような ξ が存在する。

次に $G(t; l, m)$ の若干の性質について述べる。

式 (3.12) より、偶数次の Bernoulli 多項式の性質から、 $0 \leq t \leq 1$ において $G(1-t; l, m) = G(t; l, m)$ なる対称性があることは容易にわかる。

$m \leq [l/2]$ のときには、端補正項は存在しない。まず、 $n = 1$ (Newton-Cotes 則) で、 $m = [l/2]$ すなわち、端補正項がないときを考える。以下では、 $[l/2]$ を m と書くことがある。

$$E(f; l, [l/2], 1) = \int_{x_0}^{x_1} f(x) dx - \frac{h}{l} \sum_{i=0}^l W_i f(x_{0+i/l}) \quad (3.14)$$

において $E(x^{2m+1}; l, m, 1) = 0$ である。従って、Peano の定理により、

$$\begin{cases} E(f; l, m, 1) = \int_{x_0}^{x_1} \bar{G}(y; l, m) f^{(2m+2)}(y) dy, \\ \bar{G}(y; l, m) = \frac{1}{(2m+1)!} \left\{ \int_{x_0}^{x_1} (x-y)_+^{2m+1} dx - \frac{h}{l} \sum_{i=0}^l W_i (x_{i/l} - y)_+^{2m+1} \right\}, \\ (x-y)_+^m = \begin{cases} (x-y)^m & : x \geq y \\ 0 & : x < y \end{cases} \end{cases} \quad (3.15)$$

を得る。ここで、 $x_{i/l} = x_0 + \frac{i}{l}h$, $y = x_0 + ht$ とおくと、

$$\begin{cases} E(f; l, m, 1) = \int_0^1 G(t; l, m) f^{(2m+2)}(x_0 + ht) dt, \\ G(t; l, m) = h^{2m+3} \left\{ \frac{(1-t)^{2m+2}}{(2m+2)!} - \frac{1}{l} \sum_{i=0}^l W_i \frac{(i/l - t)_+^{2m+1}}{(2m+1)!} \right\} \end{cases} \quad (3.16)$$

となる. この式からわかるように, $t = 1$ は, 区分的 $2m+2$ 次式, $G(t; l, m)$ の $2m+1$ 次の零点である. 対称性から $t = 0$ も $2m+1$ 次の零点である. このことは, 式 (3.12) から証明することもできる.

式 (3.12) から, $G(0; l, m) = 0$ は容易にわかる. 次に,

$$G^{(\lambda)}(t; l, m) = \frac{h^{2m+3}}{(2m+2-\lambda)!} \cdot \frac{1}{l} \sum_{i=0}^l W_i \bar{B}_{2m+2-\lambda}\left(\frac{i}{l} - t\right) \quad : \lambda = 1, 2, \dots \quad (3.17)$$

である. $\lambda = 1, 2, \dots, 2m$ に対して

$$\frac{1}{l} \sum_{i=0}^l W_i \bar{B}_{2m+2-\lambda}\left(\frac{i}{l}\right) = \int_0^1 B_{2m+2-\lambda}(x) dx = 0 \quad (3.18)$$

である. 従って,

$$G^{(\lambda)}(0; l, m) = 0 : \lambda = 0, 1, \dots, 2m \quad (3.19)$$

となる. すなわち, $t = 0$ は $2m+1$ 次の零点である. 対称性から $t = 1$ も $2m+1$ 次の零点になる. 同じようにして,

$$G'\left(\frac{1}{2}; l, m\right) = 0 \quad (3.20)$$

を証明することができる.

$G(t; l, m)$ は区分的多項式であるから, $0 \leq t \leq 1$ において定符号であるかどうかを直接的に証明することは困難である. しかし, 間接的に証明されている (Steffensen[5]).

$m > [l/2]$, すなわち端補正項が存在するときには, $t = 0, 1$ は $G(t; l, m)$ の 2 次の零点である. $G'(1/2; l, m) = 0$ は, このときにも証明できる. しかし, 定符号であることの証明は現在の所, できていない.

次に $G(t; l, m)$ の大きさについて述べる.

$$G(t; l, m) = -\frac{h^{2m+3}}{(2m+2)!} \cdot \frac{1}{l} \sum_{i=0}^l W_i \left\{ B_{2m+2}\left(\frac{i}{l}\right) - \bar{B}_{2m+2}\left(\frac{i}{l} - t\right) \right\} \quad (3.21)$$

において,

$$B_{2m}(x) = \frac{(-1)^{m-1} 2(2m)!}{(2\pi)^{2m}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos 2k\pi x}{k^{2m}} \quad (3.22)$$

であるから,

$$\hat{G}(t; l, m) = \frac{(2\pi)^{2m+2}}{h^{2m+3}} \cdot G(t; l, m) \quad (3.23)$$

の大きさを見ると分かりやすい. 現在, $\hat{G}(t; l, m)$ の最大絶対値を, 多くの l, m について計算している.

3.2. 開いた Newton-Cotes 則の場合

文献 [7] によれば、たとえば 2 次の開いた Newton-Cotes 則は、

$$\int_{x_0}^{x_4} f(x)dx = \frac{4h}{3} \{2f(x_1) - f(x_2) + 2f(x_3)\} + \frac{14h^5}{45} f^{(4)}(\xi) : \xi \in [x_0, x_4] \quad (3.24)$$

で与えられる。また、3 次の開いた Newton-Cotes 則は、

$$\int_{x_0}^{x_5} f(x)dx = \frac{5h}{24} \{11f(x_1) + f(x_2) + f(x_3) + 11f(x_4)\} + \frac{95h^5}{144} f^{(4)}(\xi) : \xi \in [x_0, x_5] \quad (3.25)$$

で与えられる。一般に、 $2l-2$ 次、 $2l-1$ 次の開いた Newton-Cotes 則はそれぞれ、

$$\int_{x_0}^{x_{2l}} f(x)dx = h \sum_{i=1}^{2l-1} W_i f(x_i) + Eh^{2l+1} f^{(2l)}(\xi) : \xi \in [x_0, x_{2l}], \quad (3.26)$$

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_{2l+1}} f(x)dx &= h \sum_{i=1}^{2l} W_i f(x_i) + Eh^{2l+1} f^{(2l)}(\xi) \\ &\quad : \xi \in [x_0, x_{2l+1}] \end{aligned} \quad (3.27)$$

で与えられる。開いた Newton-Cotes 則について $\sum_{i=1}^{l-1} W_i = l$ であることに注意すると、 $l-2$ 次の開いた複合 Newton-Cotes 則は

$$ONew_l(f; x_0, x_n, n) = \frac{h}{l} \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i=1}^{l-1} W_i f(x_{j+i/l}) \approx \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \quad (3.28)$$

の形になることがわかる。 $l-2$ 次の開いた Newton-Cotes 則についても $W_{l-i} = W_i$: $1 \leq i \leq [(l-1)/2]$ が成り立つので、 $l-2$ 次の開いた Newton-Cotes 則について

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx &= \frac{h}{l} \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i=1}^{l-1} W_i f(x_{j+i/l}) \\ &\quad - \frac{h}{l} \sum_{k=[l/2]}^m \frac{1}{(2k)!} \sum_{i=1}^{l-1} W_i B_{2k}(\frac{i}{l}) h^{2k-1} \{f^{(2k-1)}(x_n) - f^{(2k-1)}(x_0)\} \\ &\quad - \frac{h^{2m+3}}{l \cdot (2m+2)!} \int_0^n \sum_{i=1}^{l-1} W_i \{B_{2m+2}(\frac{i}{l}) - \bar{B}_{2m+2}(\frac{i}{l} - t)\} f^{(2m+2)}(x_0 + ht) dt \end{aligned} \quad (3.29)$$

を得る。また、次の形に書くこともできる。すなわち、

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_{nl}} f(x)dx &= h \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i=1}^{l-1} W_i f(x_{jl+i}) \\ &\quad - h \sum_{k=[l/2]}^m \frac{l^{2k-1}}{(2k)!} \sum_{i=1}^{l-1} W_i B_{2k}(\frac{i}{l}) h^{2k-1} \{f^{(2k-1)}(x_{nl}) - f^{(2k-1)}(x_0)\} \\ &\quad - \frac{l^{2m+3} \cdot h^{2m+3}}{(2m+2)!} \int_0^{nl} \sum_{i=1}^{l-1} W_i \{B_{2m+2}(\frac{i}{l}) - \bar{B}_{2m+2}(\frac{i}{l} - \frac{t}{l})\} f^{(2m+2)}(x_0 + ht) dt. \end{aligned} \quad (3.30)$$

である。

3.3. 中点 Newton-Cotes 則の場合

$\mathbf{x}_{j+1/2} = \mathbf{x}_0 + (j + 1/2)h : j = 0, 1, \dots, l-1$ を通る $l-1$ 次の Lagrange 補間式を \mathbf{x}_0 から \mathbf{x}_l まで積分することによって得られる, 次の形の積分則を, それぞれ $2l-1$ 次, $2l-2$ 次の中点 Newton-Cotes 則と呼ぶことにする。すなわち,

$$\int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}_{2l}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = h \sum_{i=0}^{2l-1} W_i f(\mathbf{x}_{i+1/2}) + Eh^{2l+1} f^{(2l)}(\xi) : \xi \in [\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_{2l}], \quad (3.31)$$

$$\int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}_{2l-1}} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = h \sum_{i=0}^{2l-2} W_i f(\mathbf{x}_{i+1/2}) + Eh^{2l+1} f^{(2l)}(\xi) : \xi \in [\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_{2l-1}] \quad (3.32)$$

である。この公式の具体的な形について最初のいくつかを列挙すると,

$$\int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}_1} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = hf(\mathbf{x}_{1/2}) + \frac{h^3}{24} f''(\xi) : \xi \in [\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1], \quad (3.33)$$

$$\int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}_2} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = h \left\{ f(\mathbf{x}_{1/2}) + f(\mathbf{x}_{3/2}) \right\} + \frac{h^3}{12} f''(\xi) : \xi \in [\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_2], \quad (3.34)$$

$$\int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}_3} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \frac{3h}{8} \left\{ 3f(\mathbf{x}_{1/2}) + 2f(\mathbf{x}_{3/2}) + 3f(\mathbf{x}_{5/2}) \right\} + \frac{21h^5}{640} f^{(4)}(\xi) : \xi \in [\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_3], \quad (3.35)$$

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}_4} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \frac{h}{12} \left\{ 13f(\mathbf{x}_{1/2}) + 11f(\mathbf{x}_{3/2}) + 11f(\mathbf{x}_{5/2}) + 13f(\mathbf{x}_{7/2}) \right\} + \frac{103h^5}{1440} f^{(4)}(\xi) \\ &\quad : \xi \in [\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_4], \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}_5} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \frac{5h}{1152} \left\{ 275f(\mathbf{x}_{1/2}) + 100f(\mathbf{x}_{3/2}) + 402f(\mathbf{x}_{5/2}) + 100f(\mathbf{x}_{7/2}) \right. \\ &\quad \left. + 275f(\mathbf{x}_{9/2}) \right\} + \frac{5575h^7}{193536} f^{(6)}(\xi) : \xi \in [\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_5], \end{aligned} \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}_6} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \frac{3h}{640} \left\{ 247f(\mathbf{x}_{1/2}) + 139f(\mathbf{x}_{3/2}) + 254f(\mathbf{x}_{5/2}) + 254f(\mathbf{x}_{7/2}) \right. \\ &\quad \left. + 139f(\mathbf{x}_{9/2}) + 247f(\mathbf{x}_{11/2}) \right\} + \frac{1111h^7}{17920} f^{(6)}(\xi) : \xi \in [\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_6], \end{aligned} \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{x}_0}^{\mathbf{x}_7} f(\mathbf{x}) d\mathbf{x} &= \frac{7h}{138240} \left\{ 24745f(\mathbf{x}_{1/2}) + 882f(\mathbf{x}_{3/2}) + 56007f(\mathbf{x}_{5/2}) \right. \\ &\quad - 25028f(\mathbf{x}_{7/2}) + 56007f(\mathbf{x}_{9/2}) + 882f(\mathbf{x}_{11/2}) \\ &\quad \left. + 24745f(\mathbf{x}_{13/2}) \right\} + \frac{1718381h^9}{66355200} f^{(8)}(\xi) : \xi \in [\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_7], \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_8} f(x) dx &= \frac{4h}{967680} \left\{ 295627f(x_{1/2}) + 71329f(x_{3/2}) + 471771f(x_{5/2}) \right. \\
&\quad + 128953f(x_{7/2}) + 128953f(x_{9/2}) + 471771f(x_{11/2}) \\
&\quad \left. + 71329f(x_{13/2}) + 295627f(x_{15/2}) \right\} \\
&\quad + \frac{3194621h^9}{58060800} f^{(9)}(\xi) : \xi \in [x_0, x_8]
\end{aligned} \tag{3.40}$$

である。次に、

$$x_{j+\beta(i)} = x_0 + \left(j + \frac{2i+1}{2l}\right)h : 0 \leq j \leq n-1, 0 \leq i \leq l-1 \tag{3.41}$$

とおき、全ての $l \geq 1$ に対して、 $\sum_{i=0}^{l-1} W_i = l$ であることに注意すると、 $l-1$ 次の中点 Newton-Cotes 則は次の形になる。すなわち、

$$MNew_l(f; x_0, x_n, n) = \frac{h}{l} \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i=0}^{l-1} W_i f(x_{j+\beta(i)}) \approx \int_{x_0}^{x_n} f(x) dx \tag{3.42}$$

である。この場合についても、 $W_{l-1-i} = W_i : 0 \leq i \leq [l/2] - 1$ が成り立つので、閉じた Newton-Cotes 則におけると同じ手順により、中点 Newton-Cotes 則について、

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_n} f(x) dx &= \frac{h}{l} \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i=0}^{l-1} W_i f(x_{j+\beta(i)}) \\
&- \frac{h}{l} \sum_{k=[(l+1)/2]}^m \frac{1}{(2k)!} \sum_{i=0}^{l-1} W_i B_{2k} \left(\frac{2i+1}{2l}\right) h^{2k-1} \{ f^{(2k-1)}(x_n) - f^{(2k-1)}(x_0) \} \\
&- \frac{h^{2m+3}}{l \cdot (2m+2)!} \int_0^n \sum_{i=0}^{l-1} W_i \{ B_{2m+2} \left(\frac{2i+1}{2l}\right) - \bar{B}_{2m+2} \left(\frac{2i+1}{2l} - t\right) \} \\
&\quad \times f^{(2m+2)}(x_0 + ht) dt
\end{aligned} \tag{3.43}$$

を得ることができる。

4. 複合 Gauss-Legendre 則の剩余項

文献 [7] によれば、Gauss-Legendre 則は、

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^1 f(x) dx &= \sum_{i=1}^l W_i f(A_i) + \frac{2^{2l+1}(l!)^4}{(2l+1)\{(2l)!\}^3} f^{(2l)}(\xi) \\
&: \xi \in [-1, 1]
\end{aligned} \tag{4.1}$$

で与えられる。このように l 個の標本点を持つ Gauss-Legendre 則は $2l-1$ 次以下の多項式に対して正確な積分値を与える。ここで、 W_i, A_i はそれぞれ重み及び分点であり l によりそ

これらの値がきまる。たとえば $l = 3$ のとき、

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 f(x)dx &= \frac{1}{9} \left\{ 5f\left(-\frac{\sqrt{15}}{5}\right) + 8f(0) + 5f\left(\frac{\sqrt{15}}{5}\right) \right\} \\ &\quad + \frac{f^{(6)}(\xi)}{15750} : \xi \in [-1, 1] \end{aligned} \quad (4.2)$$

である。このように、これらの係数は

$$\sum_{i=1}^l W_i = 2 , \quad -1 < A_i < 1 : \quad 1 \leq i \leq l \quad (4.3)$$

なる性質 [7] を持つ。次に

$$x_{j+\gamma(i)} = x_0 + \left(j + \frac{A_i + 1}{2}\right)h : \quad 0 \leq j \leq n-1 , \quad 1 \leq i \leq l \quad (4.4)$$

とおくと、複合 Gauss-Legendre 則は、

$$Gaus_l(f; x_0, x_n, n) = \frac{h}{2} \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i=1}^l W_i f(x_{j+\gamma(i)}) \approx \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx \quad (4.5)$$

で与えられる。一般 Euler-Maclaurin の総和公式を使うと

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx &= \frac{h}{2} \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i=1}^l W_i f(x_{j+\gamma(i)}) \\ &\quad - \frac{h}{2} \sum_{k=1}^m \frac{1}{k!} \sum_{i=1}^l W_i B_k \left(\frac{A_i + 1}{2}\right) h^{k-1} \{ f^{(k-1)}(x_n) - f^{(k-1)}(x_0) \} \\ &\quad - \frac{h^{m+2}}{2 \cdot (m+1)!} \int_0^n \sum_{i=1}^l W_i \{ B_{m+1} \left(\frac{A_i + 1}{2}\right) - \bar{B}_{m+1} \left(\frac{A_i + 1}{2} - t\right) \} \\ &\quad \times f^{(m+1)}(x_0 + ht) dt \end{aligned} \quad (4.6)$$

を得る。ここで、

$$W_{l+1-i} = W_i , \quad -A_{l+1-i} = A_i : \quad 1 \leq i \leq [l/2] \quad (4.7)$$

であることなどを使うと、式 (4.6) は

$$\begin{aligned} \int_{x_0}^{x_n} f(x)dx &= \frac{h}{2} \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{i=1}^l W_i f(x_{j+\gamma(i)}) \\ &\quad - \frac{h}{2} \sum_{k=l}^m \frac{1}{(2k)!} \sum_{i=1}^l W_i B_{2k} \left(\frac{A_i + 1}{2}\right) h^{2k-1} \{ f^{(2k-1)}(x_n) - f^{(2k-1)}(x_0) \} \\ &\quad - \frac{h^{2m+3}}{2 \cdot (2m+2)!} \int_0^n \sum_{i=1}^l W_i \{ B_{2m+2} \left(\frac{A_i + 1}{2}\right) - \bar{B}_{2m+2} \left(\frac{A_i + 1}{2} - t\right) \} \\ &\quad \times f^{(2m+2)}(x_0 + ht) dt \end{aligned} \quad (4.8)$$

と書き改められる。

5. おわりに。

若干の条件はあるが一般に、複合積分則について

$$\begin{aligned}
 \int_{x_0}^{x_n} f(y) dy &= \text{複合積分則} \\
 &- h \sum_{k=1}^m \frac{h^{2k-1}}{(2k)!} \left\{ f^{(2k-1)}(x_n) - f^{(2k-1)}(x_0) \right\} \\
 &\times \left\{ \text{その積分則による } \int_0^1 B_{2k}(x) dx \text{ の近似値} \right\} \quad (5.1) \\
 &- \frac{h^{2m+3}}{(2m+2)!} \int_0^n \left\{ \text{その積分則による } \int_0^1 [B_{2m+2}(x) \right. \\
 &\quad \left. - \bar{B}_{2m+2}(x-t)] dx \text{ の近似値} \right\} \\
 &\times f^{(2m+2)}(x_0 + ht) dt
 \end{aligned}$$

なる関係があることがわかった。積分剩余項 $E(f; l, m, n)$ については、核関数が定符号であると仮定できれば

$$\begin{aligned}
 |E(f; l, m, n)| &\leq \frac{(x_n - x_0) \cdot h^{2m+2}}{(2m+2)!} \\
 &\times \left\{ \left| \text{その積分則による } \int_0^1 B_{2m+2}(x) dx \text{ の近似値} \right| \right\} \cdot \|f^{(2m+2)}\|_\infty \quad (5.2)
 \end{aligned}$$

である。

今後は、 $h^{2k-1} f^{(2k-1)}(x_0)$, $h^{2k-1} f^{(2k-1)}(x_n)$ を数値微分で近似したときの打ち切り誤差を検討したい。

参考文献

- [1] 森口繁一：数値計算夜話, P.206, 日本評論社, 東京 (1978).
- [2] 一松信：教室に電卓を! -II-, P.190, 海鳴社, 東京 (1981).
- [3] 高田勝：機械計算法, P.245, 養賢堂, 東京 (1981).
- [4] Davis, P.F. and Rabinowitz, P. : Methods of Numerical Integration, second ed., p.612, Academic Press, Inc., (1984) (第一版には邦訳がある。森正武訳:計算機による数値積分法, p.550, 科学技術出版社, 東京 (1980)).
- [5] Steffensen, J.F. : Interpolation, 2nd ed., p.248, Chelsea Publishing Company, New York (1950).
- [6] Milne-Thomson, L.M. : The Calculus of Finite Differences, p.558, MacMillan and Co., Limited, St. Martin's Street, London (1951).
- [7] Hildebrand, F.B. : Introduction to Numerical Analysis, 2-nd ed., p.669, Dover Publications, Inc., New York, (1974).