数値積分
Gauss 型数値積分
Numerical Integrals of Gaussian Type

(株) 竹内ハガネ商行　　竹内寿一郎

1．はじめに

前回の志村氏の報告ではニュートンからはじまり、シンプソン、ライプニッツ、ベルヌーイ一族、オイラー等、級数・和算などの話題まで豊富で少なからず昔お勉強した数値積分のいろいろなことを思い起こさせてくれた【1】。シンプソンの公式がニュートンの影響を受けて生まれたことは全く知らなかったしいい勉強になった。数値積分に関する公式や数表は私が見てきた範囲では、Abramowitz&Stegun が【2】いろいろな意味で最も秀れた文献であった。これには一次元に留まらず多次元の数値積分公式も多く含まれており、さらに数値積分に必要な直交多項式とその根とウェイトの数表、さらにいろいろな特殊関数についてその公式・関係式・数値表などが多く記載されている。この文献では必要とする数の精度は 15〜16 桁は当然のように書かれていて、π とか e とかオイラーの定数 γ などの定数は 25 桁掲載してある。私がはじめて統計数値表【3】、【4】の作成に関わったのは大学 4 年生のときで、それから数値表が発刊されるまで約 15 年かかっている。山内二郎先生をヘッドに実質編集をリードされてきたのは浦昭二先生、奥野忠一先生、竹内啓先生で、計算部隊は、真壁肇先生、芳賀敏郎先生、吉沢正先生、古林隆先生、神沼靖子先生、などなど、それに当時慶應大学管理工学科の大学院および学部の学生さんの多くが協力してくれた。それらの多くの先輩の先生方から助言をいただだき本当に良いお勉強をさせて頂いた。

このとき作成したのが、正規分布、カイ 2 乗分布、t 分布、F 分布の (累積) 確率分布の数値表とパーセント点の数値表とそれらを計算した FORTRAN プログラムおよび、非心カイ 2 乗分布、非心 t 分布、非心 F 分布の分布関数、ガンマ関数、対数ガンマ関数を計算する FORTRAN プログラムで、有効数字 15 桁まで正確に計算することができ、これらは統計数値表【3】の付録に収められている。標準正規分布の積分については 35 桁までこの本に載せてあるが、実際には 128 桁まで計算したが、その資料は当時の乏しい計算環境のもとで計算したもので、残念ながら今も未発表で手元においてある。これは多分に Abramowitz&Stegun を意識した結果なので、できる限り何か１つ少しでも彼らを上回りたいという願望で出来たものであった。

確率分布の積分を計算するにあたって、台形公式やシンプソンの積分、またガウス・ルジャンドル (Gauss-Legendre)、ガウス・ラゲーレ (Gauss-Laguerre)、ガウス・エルミート (Gauss-Hermite) によるガウス型の積分などいろいろ試みてみたが、ラゲーレやエルミートは本来積分範囲に無限大を含むことから、精度を上げるためには莫大な数の分点や重みを必要とする。従って、精度はまさに分点数によるので数表の範囲を超える高精度での計算は出来なかった。それに引き換え有限区間の積分法は、精度を上げるのには区間を分割することによっていくらでも精度を上げることができた。無限区間でも関数値がごく小さくなる区間までの有限積分に置き換えてガウス・ルジャンドル法で計算した方が高精度の計算ができた。この手法を取り入れて精度を上げる方法のひとつがエイトケン (Aitken) の Δ 2 乗加速法【5】を使ったガウス積分であり、これは J の数値積分のライブラリーで使われている。そういう意味では有

限区間の積分をガウス型で行う必要はなく、台形やシンプソンを使った加速法も考えられるが、Jでは効率の関係でガウス型が使われいるのではないかと思われる。

２．ガウス型の数値積分

数値積分を一般的に表現すると、

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

で、$x_1, x_2, \cdots, x_n$ を分点 (Abscissas)、$w_1, w_2, \cdots, w_n$ を重み (Weight) という。
このとき分点を等間隔にとったものがニュートン・コーツ型の数値積分といい、シンプソンや台形則などがこの範疇に入る。数値積分においては分点や重みは自由に設定することが出来るが、ここでいうガウス型数値積分とは分点として、直交多項式の根 (ゼロ点)、重みとして、その直交多項式から計算される特定の値を採用する方法である。このことから使われた直交多項式の名前を冠してガウス・ルジャンドル、ガウス・ラゲーレ、ガウス・エルミートなどという名がつけられている。

直交多項式とは m, n 次多項式 $P(x)_m, P_n(x)$ があるウェイト関数 $w(x)$ に関して

$$(2)\quad \int_a^b w(x)P_m(x)P_n(x)dx = \delta_{mn}, \qquad m = n \text{ のとき} = 1, \quad m \neq n \text{ のとき} = 0$$

を満たす多項式である。この重み関数 $w(x)$ と (1) 式の w_i とは記号は同じであるが全く関係ないことを断っておく。ウェイトというので同じ w を使っているが重み関数の方は $s(x)$ でも $t(x)$ でも $u(x)$ でも何でもよい。重み関数 $w(x) = 1$、積分範囲を (-1,1) として (2) を満たす多項式をルジャンドル多項式、重み関数 $w(x) = e^{-x}$、積分範囲を $(0, \infty)$ として (2) を満たす多項式をラゲール多項式、重み関数 $w(x) = e^{-x^2}$、積分範囲を $(-\infty, \infty)$ として (2) を満たす多項式をエルミート多項式という。

これらの直交多項式を使った数値積分は統一的に議論できるが、ここでは簡単のため有限区間のガウス･ルジャンドル積分についてのみとりあげて解説することにする。また、$|a|, |b| < \infty$ ならば積分区間を (-1,1) としても一般性を失わない。

３．ガウス・ルジャンドル数値積分

$$(3)\quad \int_{-1}^{1} f(x)dx \quad \int_{-1}^{1} L_{n-1}(x)dx = \int_{-1}^{1} \sum_{i=1}^{n} C_{n-1}^{(i)}(x)f(x_i)dx$$
$$= \sum_{i=1}^{n} f(x_i) \int_{-1}^{1} C_{n-1}^{(i)}(x)dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)w_i$$

ここで、$L_n(x)$ は n 次のラグランジュ補間多項式 (次節の詳細を参照のこと)、$x_1, x_2, \cdots, x_n$ は n 次のルジャンドル多項式 $P_n(x)$ の根、$C_{n-1}^{(i)}$ はラグランジュ補間多項式における $n-1$ 次の項の補間係数、(3) 式の最後尾の w_i は、

$$(4)\quad w_i = \int_{-1}^{1} C_{n-1}^{(i)}(x)dx = \frac{1}{P_n'(x_i)} \int_{-1}^{1} \frac{P_n(x)}{x - x_i}dx$$

より計算される重みである。(4) の証明は 4 節ラグランジュの補間式の項、5 節重み関数の検討の項で述べる。この重みは n 次のルジャンドル多項式のみによって決まるもので、$f(x)$ に無関係であるから、あらかじめ計算しておくことが出来る。

なお、$C_{n-1}^{(i)}(x)$ は x がルジャンドル多項式 $P_n(x)$ の根 x_i に一致するとき、1 となり、それ以外の $j (j \neq i)$ のときはゼロになるので、$f(x_i) = C_{n-1}^{(i)}(x_i)f(x_i), \quad i = 1, 2, \cdots, n$ が成り立

ち、このことは被積分関数のラグランジュ近似多項式は、n 個の分点で被積分関数に完全に一致する $(n-1)$ 次多項式であり、ガウス・ルジャンドル積分はこの近似関数を積分することに相当する。

ここで再び本題の積分を考えてみよう。被積分関数 $f(x)$ を $2n-1$ 次の多項式とし、それを n 次のルジャンドル多項式 $P_n(x)$ で割って、$Q(x)$ をその商、$R(x)$ をその剰余とすると、

(5) $\quad f(x) = P_n(x)Q(x) + R(x)$

$Q(x)$、$R(x)$ は $(n-1)$ 次以下の多項式になり、このガウス・ルジャンドル積分を求めると、

(6) $\quad \int_{-1}^{1} f(x)dx = \int_{-1}^{1} P_n(x)Q(x)dx + \int_{-1}^{1} R(x)dx$

ここで $Q(x)$ は $(n-1)$ 次以下の多項式であるから、$Q(x_i)$ は $(n-1)$ 次以下のルジャンドル多項式の 1 次結合で表わされるので、この積分の第 1 項はゼロの和となる。第 2 項の積分は $R(x)$ が $(n-1)$ 次以下の多項式であるから、x_i として $P_n(x)$ の根を使用すれば

(7) $\quad \int_{-1}^{1} R(x)dx \quad \sum_{i=1}^{n} R(x_i) \int_{-1}^{1} C_{n-1}^{(i)}(x)dx = \sum_{i=1}^{n} R(x_i)w_i = \sum_{i=1}^{n} f(x_i)w_i$

この積分法のいいところは、実際に割り算を行って $R(x)$ の関数形を求めること無しに $R(x_i)$ を計算するが出来、すなわち (5) 式から第 1 項がゼロとなり、$R(x_i) = f(x_i)$ として求めることが出来る。それゆえ (7) 式が成立する。

すなわち、n 点を用いたガウス・ルジャンドル積分は実質 $(2n-1)$ 次の多項式で近似した、高精度の積分になっている。もしも $f(x)$ が $(2n-1)$ 次以下の多項式であれば、n 個の点を使った数値積分であるにも拘わらず、(3) は真の積分値を与えるということになる。

４．ラグランジュの補間多項式

いま、n 個の点に対してそれらが根となるような n 次多項式を定義する。

(8) $\quad \pi(x) = (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n)$

このとき、$x_1, x_2, \cdots, x_n$ がルジャンドル多項式 $P_n(x)$ の根であれば、$\pi(x)$ は x^n の係数が常に 1 であるため $P_n(x)$ の定数倍の関数になる。

次に (8) 式の第 i 項 $(i = 1, 2, \cdots, n)$ が 1 つ欠けた $(n-1)$ 次多項式を以下のように定義する。

(9) $\quad \pi_i(x) = (x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)$

これらを使ってさらに次の $(n-1)$ 次式を定義する。

(10) $\quad C_{n-1}^{(i)}(x) = \dfrac{\pi_i(x)}{\pi_i(x_i)} = \dfrac{\Pi_{j=1,j\neq i}^{n}(x-x_j)}{\Pi_{j=1,j\neq i}^{n}(x_j-x_i)}$

(11) $\quad C_{n-1}^{(i)}(x_j) = \dfrac{\pi_i(x_j)}{\pi_i(x_i)} = \delta_{ij}, \qquad j = i$ ならば $1, \quad j \neq i$ ならば 0

そうすると、$C_{n-1}^{(i)}(x)$ は n 個の点、$x = x_i, i = 1, 2, \cdots, n$ では 1、それ以外の $x = x_j, j = 1, 2, \cdots, n$ ではゼロという関数になっている。

この係数 (10) を使って補間式を表わしたのがラグランジュの補間多項式である。(11) の性質から $L_{n-1}(x_i)$ は $x_i, i = 1, 2, \cdots, n$ で $f(x_i)$ に一致する。

(12) $\quad f(x) \quad L_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^{n} C_{n-1}^{(i)}(x) f(x_i)$

一般に元の関数値とルジャンドル補間式による近似式では全ての分点で一致し、その分点は任意に決めることが出来るが、通常、点が多いほど近似が良くなることが期待される。しかし、場合によっては分点の選択方法により、一致する点は増えるものの、その他の点では

避けられない振動が見られ、大きな誤差がある場合も留意すべきである。この現象をルンゲ (Runge) の現象と言われている。低次の多項式を高次の多項式で近似する場合しばしば生ずる現象ではあるが、分点に直交多項式の根を選んだ場合には、高次の多項式は低次の多項式を含むので、補間多項式は正確な低次の多項式に一致するので、$f(x)$ が多項式の場合は心配することは無い。

5．重み関数の検討

ルジャンドル多項式はロドリグ (またはロドリゲス Rodrigues) の公式によると、

(13) $$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n$$

もしくは、

(14) $$P_n(x) = \frac{1}{2^n}\sum_{i=0}^{[\frac{n}{2}]}(-1)^i x^{n-2i}\frac{(2n-2i)!}{i!(n-i)!(n-2i)!}$$

または漸化式によると、

(15) $$nP_n(x) - (2n-1)P_{n-1}(x) + (n-1)P_{n-2}(x) = 0, \quad n = 2, 3, \cdots$$

初期値は、 $P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x$ とする。

ルジャンドル多項式を (13)、(14)、(15) により $n = 0, 1, 2, \cdots, 8$ まで具体的に求めてみると、

(16) $$\begin{cases} P_0(x) = 1 \\ P_1(x) = x \\ P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1) \\ P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3-3x) \\ P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4-30x^2+3) \\ P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5-70x^3+15x) \\ P_6(x) = \frac{1}{16}(231x^6-315x^4+105x^2-5) \\ P_7(x) = \frac{1}{16}(429x^7-693x^5+315x^3-35x) \\ P_8(x) = \frac{1}{128}(6435x^8-12012x^6+6930x^4--1260x^2+35) \end{cases}$$

n 次多項式の最高次数の係数は、

(17) $$\frac{(2n-1)!!}{n!} = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2}$$ $n = 0, 1, 2, \cdots$ ここで、n!!は 2 ずつ減じた階乗、(-1)!!=1

上式で 2 項目の分母の $2^n n!$ は $(2n)!$ の偶数部のみ、すなわち $(2n)!!$ を表わし、$(2n)!$ から $(2n-1)!!$ を取り出すために付加したものである。

(8) 式の $\pi(x)$ の最高次数の係数は 1、ルジャンドル多項式の最大次数の係数は (17) であるから、

(18) $$\alpha = \frac{n!}{(2n-1)!!}$$ として、 $\pi(x) = \alpha P_n(x)$

がいえる。

ところで、(10)、(11) を $\neq$、$\pi_i(x)$ を使わないで表わすために微分を導入すると、

(19) $$\frac{d\pi(x)}{dx} = \pi'(x) = \sum_{i=1}^{n}\Pi_{j=1,j\neq i}^{n}(x-x_j) = \sum_{i=1}^{n}\pi_i(x)$$

であるから、

(20) $$\pi_i(x) = \frac{\pi(x)}{(x-x_i)}, \qquad \pi_i(x_i) = \pi'(x_i), \qquad i = 1, 2, \cdots, n$$

以上 (10)、(11) および (18)、(20) から、

(21) $$w_i = \int_{-1}^{1} C_{n-1}^{(i)}(x)dx = \frac{1}{\alpha\pi'(x_i)}\int_{-1}^{1}\frac{\alpha\pi(x)}{x-x_i}dx = \frac{1}{P_n'(x_i)}\int_{-1}^{1}\frac{P_n(x)}{x-x_i}dx$$

となり、(4) 式が証明された。
ルジャンドル多項式を積分した (21) 式で計算した値がガウス・ルジャンドル積分の重みである。

Abramowitz&Stegun[2] には $n = 2, 3, \cdots, 10, 12, 16, 20, 24, 32, 40, 48, 64, 80, 96$ に対して、15 桁 ($n = 12$ まで、以降 20 桁) の精度で計算したガウス・ルジャンドル積分の分点と重みが掲載されている。

６．任意の有限区間での積分

$|a|, |b| < \infty,\ a < b$ のとき、

(22) $$y = \frac{b-a}{2}x + \frac{b+a}{2}$$ なる変数変換を行うと、

(23) $$\int_a^b f(y)dy = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}x + \frac{b+a}{2}\right)dx = \frac{b-a}{2}\sum_{i=1}^{n} w_i f\left(\frac{b-a}{2}x_i + \frac{b+a}{2}\right)$$

ここで $x_1, x_2, \cdots, x_n$ は n 次のルジャンドル多項式の根 (分点、Abscissas)、$w_1, w_2, \cdots, w_n$ は (4) 式で求めたそのウェイトであり、以下の表に示す。n が偶数のときは分点は正と負にとり、奇数のときは分点ゼロで折り返して正と負にして使う。重みは分点に対して与えてある。

n	分点 (x_i)	重み (w_i)
2	0.57735 02691 89626	1.0
3	0.0	0.88888 88888 88889
	0.77459 66692 41483	0.55555 55555 55556
4	0.33998 10435 84856	0.65214 51548 62546
	0.86113 63115 94053	0.34785 48451 37454
5	0.0	0.56888 88888 88889
	0.53846 93101 05683	0.47862 86704 99366
	0.90617 98459 38664	0.23692 68850 56189

【参考文献】

【1】志村正人（2010）：　級数と微積分のルネッサンス-ダンハムの「微積分名作ギャラリー」から-、JAPLA 研究会 2010.10.22 資料

【2】Abramowitz, M., and Stegun, I.A.(1964)　：　*Handbook of Mathematical Functions*、National Bureau of Standards Applied Mathematics Series #55, U. S. Government Printing Office

【3】山内二郎編 (1979)　：　統計数値表－ JIS 1972、 日本規格協会

【4】山内二郎編 (1979)　：　簡約統計数値表、日本規格協会

【5】「エイトケンのΔ２乗加速法」、フリー百科事典ウィキペディア
`http://ja.wikipedia.org/wiki/`エイトケンのΔ２乗加速法