小山工業高等専門学校研究紀要
第３２号（2000），17－22

ルジャンドル・ガウスの積分公式のプログラム化について

玉木　正一

About on the programming of the Gauss-Legender formula for definite integrations

Masakazu TAMAKI

０．はじめに

ルジャンドル・ガウス積分は最も観測値に対して有効な計算法であるが、使われることが少ない。ここでは積分公式の紹介とロンバーグ法との比較プログラム化する上での注意点の紹介を行ってゆく。

１．定積分計算の紹介

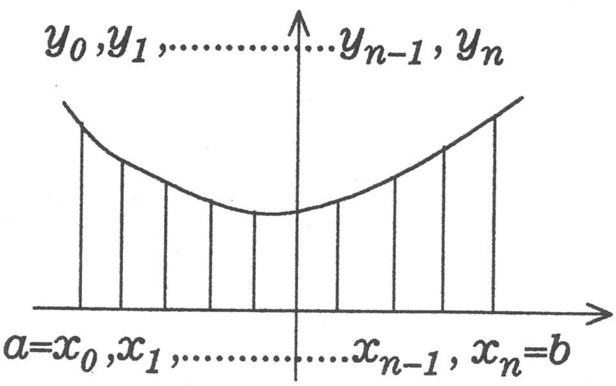
近似計算による定積分 $\int_a^b f(x)\ dx$ を求める方法は古来いろいろと工夫されているが、便利さと裏腹に欠点もある。ここでは、$\int_{-1}^{1} \frac{dx}{1+x^2}$ の計算を通して台形則近似法、シンプソン法、ロンバーグ法、ガウスル・ジャンドル法を比較してどのような特徴があるか考えてみたい。［３］

２．台形則近似

台形近似はプログラムを組む上で最もイメージがつかみ易くまたプログラムのチェックもし易い方法である。

区間 $[a,b]$ を n 等分しその分点を $x_0, x_1, ..., x_n$ とし、$f〔x_k〕= y_k$ とすると、k 番目の小区間は $[x_{k-1}, x_k]$ となり、この上で２点〔x_{k-1}, y_{k-1}〕と〔x_k, y_k〕を線分で結ぶことによってできる台形の面積は

$h = \frac{b-a}{n}$ とすると $\frac{h}{2}〔y_{k-1}+y_k〕$ となる。



これでその区間における定積分を近似する。各小区間に対する台形の面積の和

$$I_T = \frac{h}{2}〔y_0+y_1〕+\frac{h}{2}〔y_1+y_2〕+......+\frac{h}{2}〔y_{n-1}+y_n〕$$

$$= \frac{h}{2}〔y_0+2〔y_1+y_2+...+y_{n-1}〕+y_n〕$$

によって区間 $[a,b]$ における定積分 $\int_a^a f(x)\ dx$ を近似するのが台形則である。

これは小区間の端点上の２点を直線で結んでいるので被積分関数

$f(x) = a_0+a_1x+a_2x^2+a_3x^3+......$ の１次近似である。従って積分の誤差は２次以上の項の積分となり、$O〔x^3〕$ である。

実際には $M = max〔f^{(3)}(x)〕$ の時 $\frac{Mh^3}{12}$ となる。

連続する２つの近似値の差が希望する精度より小さくなるまで区間を２等分しては台形則による近

似を反復する方法がある。[3]

$i = 0, 1, 2, \ldots$ に対して積分区間 $[a,b]$ を $n_i = 2^i$ 個の小区間に等分したときの小区間の幅を $h_i = \dfrac{b-a}{n_i}$ とおき、分点を $x_k = a + kh_i$, $h = 0, 1, 2, \ldots, 2^i$ とする。$i = 0$ の時は区間上の台形でである。

$I_T = [h_0] = \dfrac{b-a}{2} \times \{f(a) + f(b)\}$　小区間を更2等分したときの新しい分点 x_k は k が奇数のものであり、k が偶数の場合はすでに計算されたものを利用すればよい。そこで $I_T[h_i]$ を $I_T[h_{i-1}]$ と奇数分点上の計算に分解する。

$$I_T[h_i] = h_i\left[\frac{y_0}{2} + y_2 + y_4 + \ldots + y_{n-2} + \frac{y_n}{2}\right] + h_i[y_1 + y_3 + \ldots + y_{n-1}]$$

ここで第1項の2倍は $I_T[h_{i-1}]$ に等しく第2項の2倍は $I_T[h_{i-1}]$ を台形でなく、小区間 $[x_{2k-2}, x_{2k}]$ の中点 x_{2k-1} を用いた柱状近似に他ならない。$I_T[h_i]$ は台形近似と柱状近似の平均を取ったのである。此の柱状近似を $I_M[h_{i-1}]$ とすると $I_T[h_i] = \dfrac{1}{2}\left\{I_T[h_{i-1}] + I_M[h_{i-1}]\right\}$ となる。

これを反復すればいくらでも精度の高い結果を得る。

3．実例

$$I = \int_{-1}^{1} \frac{dx}{1+x^2} = \frac{\pi}{2} \text{ の計算}$$

$$I_T[h_o] = \frac{(1-(-1))}{2}\left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\right] = 1,\ I_M[h_o] = (1-(-1)) \times 1 = 2$$

よって　$I_T[h_1] = \dfrac{1}{2}(1+2) = \dfrac{3}{2}$

続けて

$$I_M[h_1] = \frac{2}{2}\left[\frac{1}{1+\left[\frac{-1}{2}\right]^2} + \frac{1}{1+\left[\frac{1}{2}\right]^2}\right] = \frac{8}{5}$$

よって　$I_T[h_2] = \dfrac{1}{2}\left[\dfrac{3}{2} + \dfrac{8}{5}\right] = \dfrac{31}{20}$　　更に

$$I_M[h_2] = \frac{1}{2}\left[\frac{1}{1+\left[\frac{-3}{4}\right]^2} + \frac{1}{1+\left[\frac{-1}{4}\right]^2} + \frac{1}{1+\left[\frac{1}{4}\right]^2} + \frac{1}{1+\left[\frac{3}{4}\right]^2}\right]$$

$= \dfrac{672}{425}$ となり、

$I_T[h_3] = \dfrac{1}{2}\left[\dfrac{31}{20} + \dfrac{672}{425}\right] = \dfrac{5323}{3400}$ となる16分割の結果を得る。

観測誤差は $\dfrac{31}{20} - \dfrac{5323}{3400} = -0.0155882352941176$ となる。

理論値 $\dfrac{\pi}{2}$ が分かっているのでそれと比較すべきであるとの意見もあると思うが、実際には観測値を用いて積分を求めることが重要なので連続する近似値の差を用いた。

4．シンプソンの公式・ロンバーグ法

オイラー・マクローリンの公式（モダンアナリシス）では

$$\int_a^{a+kh} f(x)dx$$

$$= h\left\{\frac{1}{2}f(a) + f(a+h) + \ldots + f(a+(k-1)h) + \frac{1}{2}f(a+kh)\right\}$$

$$+ \sum_{j=1}^{m-1} \frac{(-1)^j B_j h^{2j}}{(2j)!}\left\{f^{(2j-1)}(a+kh) - f^{(2j-1)}(a)\right\} + R_m$$

となっている。[2]

剰余項は

$$R_m = \frac{h^{2m+1}}{(2m)!}\int_0^1 b_{2m}(t)\left\{\sum_{j=0}^{k-1} f^{(2m)}(a+kh) + ht\right\}dt$$

$b_{2m}(t)$ はベルヌイ関数で、B_j はベルヌイ数。

これを変形して

$$h\sum_{k=0}^{n} y_k = \int_a^b f(x)dx + \frac{h}{2}[y_o + y_n]$$

$$+ \sum_{j=1}^{m-1} \frac{(-1)^{j-1}}{(2j)!} B_j h^{2j}\{f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a)\} + R_m$$

とする。台形則近似による近似 $I_T(h)$ と積分

$$I = \int_a^b f(x)dx \text{ の誤差を } E_T(h) \text{ とすると}$$

$$E_T(h) = I_T(h) - I = h\sum_{k=0}^{n} y_k - \frac{h}{2}[y_0 + y_n] - I$$

$$= \sum_{j=1}^{m-1} \frac{(-1)^{j-1}}{(2j)!} B_j h^{2j}\left\{f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a)\right\} + R_m$$

と表される。[3]

ここで $\dfrac{(-1)^{j-1}}{(2j)!} B_j\left\{f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a)\right\} = \beta_j$

と置くと $E_T(h)=\beta_1 h^2-\beta_2 h^4+\beta_3 h^6-\beta_4 h^8+\ldots$ となる。
ここで $2h$ を形式的に代入すると
$E_T(2h)=4\beta_1 h^2-16\beta_2 h^4+64\beta_3 h^6-256\beta_4 h^8+\ldots$
よって $I_T(h)$ と $I_T(2h)$ を $-1:4$ に配分すると
$I_s(h)=\dfrac{-I_T(2h)+4I_T(h)}{-1+4}$ となる。
これによって定義された近似はシンプソンの公式の結果になる。よって誤差は h^4 程度になるはずであるが、実際は3次の項を対称領域で積分するので h^4 の項は消去されるので、誤差の限界は

$M=max(f^{(4)}(x))$ に対して $\dfrac{Mh^5}{90}$ となる。

再び　$I=\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{dx}{1+x^2}=\frac{\pi}{2}$ の計算

$I_T[h_2]=\dfrac{1}{2}\left[\dfrac{3}{2}+\dfrac{8}{5}\right]=\dfrac{31}{20}$　$I_T[h_3]=\dfrac{1}{2}\left[\dfrac{31}{20}+\dfrac{672}{425}\right]=\dfrac{5323}{3400}$

よって

$$I_S[h_3]=\frac{-I_T[h_2]+4I_T[h_3]}{-1+4}$$

$$=\frac{1}{3}\left[4\times\frac{5323}{3400}-\frac{31}{20}\right]=\frac{8011}{5100}$$

理論値 $\dfrac{\pi}{2}$ と比べると
それぞれ

$$I_T[h_3]-I=\frac{5323}{3400}-\frac{\pi}{2}=-0.005208089706$$

$$I_S[h_3]-I=\frac{8011}{5100}-\frac{\pi}{2}=-0.00001201127451$$

となりかなりの改善がなされている。
シンプソンの公式を導いたのと同様の方法をとると $E_T(h)=\beta_1 h^2-\beta_2 h^4+\beta_3 h^6-\beta_4 h^8+\ldots$ の $\beta_2 h^4$ の項を消去することができる。
よって $\dfrac{4^2 I_S(h)-I_S(2h)}{4^2-1}$ の誤差は $\beta_3 h^6$ 程度である。
[3]
一般に、2正整数 $i\geq j$ に対して $I_{i,1}=I_T[h_{i-1}]$
$I_{i,j+1}=\dfrac{4^j I_{i,j}-I_{i-1,j}}{4^j-1}$　ただし $j=1,2,3,\ldots$ とおくと、定積分 I の近似値 $I_{i,j}$ もとの誤差 $E_{i,j}=I_{i,j}-I$ は $\beta_j h_i^{2j}$ 程度になる。これはロンバーグ積分と呼ばれている。

実例 $I=\displaystyle\int_{-1}^{1}\frac{dx}{1+x^2}=\frac{\pi}{2}$ を見てみると

$$I_{1,1}=I_T[h_0]=1,\quad I_{2,1}=I_T[h_1]=\frac{3}{2}$$

$$I_{3,1}=I_T[h_2]=\frac{31}{20},\quad I_{4,1}=I_T[h_3]=\frac{5323}{3400}$$

$$I_{2,1+1}=\frac{4^1 I_{2,1}-I_{2-1,1}}{4^1-1}=\frac{4\times\frac{3}{2}-1}{4-1}=\frac{5}{3}=I_{2,2}$$

$$I_{3,1+1}=\frac{4^1 I_{3,1}-I_{3-1,1}}{4^1-1}=\frac{4\times\frac{31}{20}-\frac{3}{2}}{4-1}=\frac{47}{30}=I_{3,2}$$

$$I_{4,1+1}=\frac{4^1 I_{4,1}-I_{4-1,1}}{4^1-1}=\frac{4\times\frac{5323}{3400}-\frac{31}{20}}{4-1}=\frac{8011}{5100}=I_{4,2}$$

$$I_{3,2+1}=\frac{4^2 I_{3,2}-I_{3-1,2}}{4^2-1}=\frac{4^2\times\frac{47}{30}-\frac{5}{3}}{4^2-1}=\frac{39}{25}=I_{3,3}$$

$$I_{4,2+1}=\frac{4^2 I_{4,2}-I_{4-1,2}}{4^2-1}=\frac{4^2\times\frac{8011}{5100}-\frac{47}{30}}{4^2-1}=\frac{6677}{4250}=I_{4,3}$$

$$I_{4,3+1}=\frac{4^3 I_{4,3}-I_{4-1,3}}{4^3-1}=\frac{4^3\times\frac{6677}{4250}-\frac{39}{25}}{4^3-1}=\frac{210349}{133875}=I_{4,4}$$

ここで、誤差を見ると

$$E=I_{4,4}-I=\frac{210349}{133875}-\frac{\pi}{2}=0.00043803541083$$

となりかなりの精度を与える。

5．確率論から見た誤差

積分近似の実際の利用は観測値について行われる事が多い。分割点の個数に対して誤差のオーダーを考えてみたい。まず台形則の場合は分割点の数 $N=2^{n+1}$ をいくら増やしても、h^2 程度で、精度を2桁あげるのには10倍の和をとらなくてはいけない。
同様にシンプソンの公式では、5乗のオーダーで、最後に述べたロンバーグ法では $2n=2\log_2 N$ のオーダーである。しかし確率論からみるとそれでも誤差が大きすぎる。
確率論の定理　$a_1, a_2,\ldots,a_n$ が定数で $X_1, X_2,\ldots,X_n$ が互いに独立な確率変数で，それぞれ正規分布

$N\left[\mu_1, \sigma_1^2\right], N\left[\mu_2, \sigma_2^2\right], \ldots, N\left[\mu_n, \sigma_n^2\right]$ に従うとき
$\sum_{i=1}^{n} a_i X_i$ は正規分布
$N\left[\sum_{i=1}^{n} a_i X_i,\ \sum_{i=1}^{n} a_i^2 \sigma_i^2\right]$ に従う。[5]
従って、$y_i = f(x_i)$ の観測値が $N\left[y_i, \sigma^2\right]$ に従うとすると $I_{n,1} = I_T\left[h_{n-1}\right]$ の分散は

$\sum_{i=1}^{N} h^4\sigma^2 = 2^{n+1} \times h^{4n}\sigma^2$、標準偏差は $\sqrt{N}$ のオーダーで逆に増えてしまう。そこで分割点を増やさずに近似をの精度を上げる方法を考えなければならない。

6．ガウス・ルジャンドルの方法

積分領域を $[a,b]$ から $[-1,1]$ に変換する。
例えば

$$g(x) = \frac{2}{b-a} f\left[\frac{1}{2}(b-a)x + \frac{a+b}{2}\right],$$

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^{1} g(x)dx$$

とすれば良い。このような変換は困難を伴わない。この変換によって、n個の観測値を用いて $g(x)$ を $2n-1$ 次式として近似して積分する方法がある。

7．Legendreの球関数

n－1次以下のすべての多項式 $Q(x)$ に対して $\int_{-1}^{1} Q(x)P_n(x)dx = 0$ になるようなn次の多項式としてLegendreの球関数 $P_n(x)$ がある。[1]
$P_n(x)$ は添え字nに対して直交系を成している。
その内積は

$$\int_{-1}^{1} P_m(x)P_n(x)dx = 0 \quad (m \neq n)$$

$$\int_{-1}^{1} P_n(x)^2 dx = \frac{2}{2n+1}$$

更に $P_n(x) = 0$ の解はすべて実根で－1と1との間にある。それらは単根で $P_{n-1}(x) = 0$ の根によって分離されている。すなわち $P_n(x) = 0$ の隣り合せの2つの根の間に $P_{n-1}(x) = 0$ の根が1個ずつ配置されている。

8．定積分 $\int_{-1}^{1} f(x)dx$

$f(x)$ を $2n-1$ 次以下の多項式として良い。
$P_n(x)$ で割って $f(x) = P_n(x)Q(x) + r(x)$ とすると、商 $Q(x)$ も剰余 $r(x)$ も n-1 次以下の多項式となる。

$\int_{-1}^{1} P_n(x)Q(x)dx = 0$ であるので

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

$$= \int_{-1}^{1} r(x)dx$$

となる。
ここで $r(x)$ を $P_n(x)$，$f(x)$ の近似式で表すためにLagrangeの補間公式を用いる。

9．Lagrangeの補間公式

一般に有理式 $f(x) = \frac{q(x)}{p(x)}$ に於いて、$p(x)$ が単根のみを有して、$p(x)$ が $q(x)$ よりも低次ならば $\frac{q(x)}{p(x)} = \sum_{k=1}^{n} \frac{q\left[a_k\right]}{p'\left[a_k\right]} \cdot \frac{1}{x-a_k}$ 和は $p(x)$ のすべての根 a_k にわたる。8．の場合これが適用できる。
今 $P_n(x) = 0$ の根を $a_k (k = 1, 2, \ldots, n)$ とすれば、
$f\left[a_k\right] = r\left[a_k\right]$ より

$$r(x) = \frac{r(x)P_n(x)}{P_n(x)} = \sum_{k=1}^{n} \frac{r\left[x_k\right]}{P'_n(x)} \cdot \frac{P_n(x)}{x-a_k}$$

$$= \sum_{k=1}^{n} \frac{f\left[x_y\right]}{P'_n(x)} \cdot \frac{P_n(x)}{x-a_k}$$

となる。[1]

10. 近似計算

よって

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{k=1}^{N} \left\{ \frac{f\left[x_k\right]}{P'_n(x)} \int_{-1}^{1} \frac{P_n(x)}{x-ak} dx \right\}$$

$$A_k = \frac{1}{P'_n(x)} \int_{-1}^{1} \frac{P_n(x)}{x-a_k} dx$$

とおけば $\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{k=1}^{n} A_k f\left[a_k\right]$

ここで係数A_kは重みでその表を用いれば近似計算ができる。

11. 実例の計算

根（a_k）	重みA_k
$n=5$の時	
0.00000　00000	0.56888　88888
±0.53846　93101	0.47862　86704
±0.90617　98459	0.23692　68850
$n=10$の時	
±0.014887　43389	0.29552　42247
±0.43339　53941	0.26926　67193
±0.67940　95682	0.21908　63625
±0.86506　33666	0.14945　13491
±0.97390　65285	0.06667　13443

［4］

これを用いて

$$\int_{-1}^{1}\frac{dx}{1+x^2}=\sum_{k=1}^{10}\frac{A_k}{1+a_k^2}$$

$$=\frac{2\times0.295524224714753}{1+0.148874338981631^2}+\frac{2\times0.269266719309996}{1+0.433395394129247^2}$$

$$+\frac{2\times0.219086362515982}{1+0.679409568299024^2}+\frac{2\times0.149451349150581}{1+0.865063366688985^2}$$

$$+\frac{2\times0.06671344308688}{1+0.973906528517172^2}=1.5708394818316$$

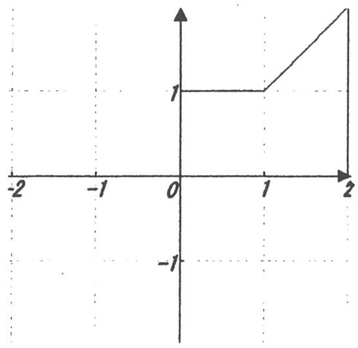
理論値と比較すると

$$1.5708394818316-\frac{\pi}{2}=0.0000431568316$$

10分割点に関わらず16分割点のロンバーグ積分より1桁精度が高い。（ここでは理論値と比較するために15桁の表を用いた。）

13. 誤差に対する考察

台形則近似では区間をn等分しているが、分割点は関数の形状によっては端点以外自由にとって良い。



左のような図の時は$n=3$の時でも$a_k=1$を分割点に選ぶべきである。指定されている分割点は両端点のみで自由度は$n-2$で重みに対する工夫はない。

シンプソンの公式では2小区間を組にして、重みを3カ所につけている。また2小区間は対称になっている。よって誤差は4次以上の積分となり5次式となる。ロンバーグ積分では重みはつけているが、$I_T〔h_i〕$は2^i個の区間の組み合わせに対して重みがつけられているのでlog_2Nがオーダーの目安になる。

ガウス・ルジャンドル方は分割点の位置と重みが指定されるのでデーター観測地の自由度、重み配分の自由度が無くなるが、その分精度として反映している。

14. Legendre関数のゼロ点、重みについて

Legenndreの球関数はLegenndreの微分方程式

$$(x^2-1)\frac{d^2y}{dx^2}+2x\frac{dy}{dx}-n(n+1)y=0$$ の解で

$$P_n(x)=\frac{1}{n!2^n}\frac{d^n}{dx^n}\left\{(x^2-1)^n\right\}$$ と表すことができる。Legenndreの微分方程式は本来はガウスの微分方程式の特殊な場合で、多項式となっている。（ガウスの微分方程式の解は超越関数である。）

ここで、数式ソフトMapleを用いて$P_n(x)$のゼロ点を、求めてみよう。

$n=8$の時　$P_8(x)=\dfrac{d^8}{dx^8}\left\{\dfrac{1}{8!2^8}\{x^2-1\}^8\right\}$を求めてみる。

中括弧内を展開すると

$$\frac{1}{8!2^8}\{x^2-1\}^8$$
$$=\frac{x^{16}-8x^{14}+28x^{12}-56x^{10}+70x^8-56x^6+28x^4-8x^2+1}{10321920}$$

よって　$P_8(x)=\dfrac{6435}{128}x^8-\dfrac{3003}{32}x^6+\dfrac{3465}{64}x^4-\dfrac{315}{32}x^2+\dfrac{35}{128}$

これをMapleのコマンドfsolve（%, x , 0 . . 1）で解くと．1834346425．5255324099．7966664774．9602898565 偶関数なので負の対称位置にゼロ点がある。

重みを決める計算式はChristoffel・Darbouxの恒等式から導かれ $A_k = \dfrac{2\left(1-a_k^2\right)}{(n+1)^2\left\{P_{n+1}\left(a_k\right)\right\}^2}$ となる事が知られている。[3]

同様に

$$P_{n+1}(x) = \frac{12155x^9 - 25740x^7 + 18018x^5 - 4620x^3 + 315x}{128}$$

これにゼロ点を代入して

$A_k =$

.3626837835 .3137066469 .2223810369 .1012285358

を得る。

15. 終わりに

ガウス・ルジャンドル法での積分近似は観測点数に対して最も効率的な近似であるが、ゼロ点と重みの表が無いと実行できなかった。数式処理ソフトには本来これらを求める機能があるので、観測データーを組み込めば良い結果を得やすいので、利用されることをおすすめしたい。

［文献］

1　解析概論　高木貞治

2　MODERN ANALYSIS
WHITAKER & WATSON

3　数値解析　清水留三郎

4　計算機による数値計算法　B. CARNAHAN
H. A. LUTHER J. O. WILKERS

5　確率統計　田河　生長他　大日本図書

6　MAPLEVラーニングガイド
K.M.ヒール　M.L.ハンセン
K.M.リカード

「受理年月日　１９９９年９月30日」