2008/03/22

積分の近似式について

友田勝久

はじめに

このレポートは，関数グラフソフト GRAPES の定積分計算を改良する作業の中で見つけた積分公式に関するものである。4 次多項式による近似式を最適化することによって，9 次の多項式についても誤差を生まず，かつ，それ以上の次数の項についても誤差の非常に小さい積分の近似式を得ることができた。

ラグランジュ補間

異なる実数 $x_0, x_1, x_2, \cdots, x_n$ に対して，

$$p_0(x) = \frac{(x-x_1)\ \cdots\ (x-x_n)}{(x_0-x_1)\ \cdots\ (x_0-x_n)}$$

$$p_1(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)\ \cdots\ (x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\ \cdots\ (x_1-x_n)}$$

・・・

$$p_i(x) = \frac{(x-x_0)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)}$$

・・・

$$p_n(x) = \frac{(x-x_0)\ \cdots\ (x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)\ \cdots\ (x_n-x_{n-1})}$$

とおくと，

$$p_i(x_j) = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

が成り立つ。

ここで，$(n+1)$ 個の点列 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \cdots, (x_n, y_n)$ に対して，

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i p_i(x)$$

とすれば，曲線 $y = p(x)$ は，これら $(n+1)$ 個の点列すべてを通る n 次関数のグラフを与える。これを，ラグランジュ補間という。

任意の関数 $f(x)$ に対して，

$$\sum_{i=0}^{n} f(x_i)\, p_i(x)$$

とすれば，この関数は n 次関数による $f(x)$ の近似を与える。これを以下では，$f(x)$ の n 次のラ

グランジュ近似と呼ぶことにする。

とくに，$f(x)$ が n 次以下の多項式のとき，

$$f(x)=\sum_{i=0}^{n} f(x_i)\,p_i(x)$$

が成り立つ。

積分の２次近似とシンプソンの公式

$x_0=-1, x_1=0, x_2=1$ のとき，任意の関数 $f(x)$ の 2 次のラグランジュ近似は，

$$\sum_{i=0}^{2} f(x_i)\,p_i(x)$$

ただし，$p_0(x)=\frac{1}{2}x(x-1),\ p_1(x)=-(x+1)(x-1),\ p_2(x)=\frac{1}{2}x(x+1)$

となる。とくに，$f(x)$ が 2 次式のとき，

$$f(x)=\sum_{i=0}^{2} f(x_i)\,p_i(x)$$

が成り立つ。この式の両辺を-1 から 1 まで積分して，

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx=\sum_{i=0}^{2} f(x_i)\int_{-1}^{1} p_i(x)\,dx=\frac{1}{3}f(-1)+\frac{4}{3}f(0)+\frac{1}{3}f(1) \quad \cdots（＊）$$

さらに，簡単な置換を行って，

$$\int_{m-h}^{m+h} f(x)\,dx=\frac{h}{3}\{f(m-h)+4f(m)+f(m+h)\} \quad \cdots（＊＊）$$

を得る。

$f(x)$ が 2 次以下の多項式でない場合，（＊＊）の等号は成り立たないが，右辺は定積分についての近似値を与えている。すなわち，小さな幅 h に対して，

$$\int_{m-h}^{m+h} f(x)\,dx\cong\frac{h}{3}\{f(m-h)+4f(m)+f(m+h)\}$$

積分区間が広い場合，積分区間を細かく分け，そのひとつひとつの小区間についてこの近似式を適用したのがシンプソンの公式である。

積分の 2 次近似と 3 次関数

（＊）は，$f(x)$ が 3 次多項式の場合にも成り立つ。(以下解説)

3 次多項式 $f(x)$ に対して，2 次のラグランジュ近似を

$$g(x)=\sum_{i=0}^{2} f(x_i)\,p_i(x)$$

とすると，

$$f(x_i)=g(x_i)\ \ (i=0,1,2)\ \ \text{すなわち，}\ \ f(-1)=g(-1),\ f(0)=g(0),\ f(1)=g(1)$$

これより，

$$f(x)-g(x)=k(x+1)x(x-1)$$

すなわち，奇関数となる。このことから，

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx=\int_{-1}^{1} g(x)\,dx=\sum_{i=0}^{2} f(x_i)\int_{-1}^{1} p_i(x)\,dx$$

よって，（＊）は，3 次式に対しても成り立つ。

最適化された 2 次近似

（＊）は，3 次以下の多項式に対して成り立つが，少し工夫することで，5 次以下の任意の多項式に対しても成り立つようにすることができる。

$$x_0=-\alpha\ ,\ x_1=0\ ,\ x_2=\alpha$$

$$p_0(x)=\frac{1}{2\alpha^2}x(x-\alpha)\ ,\ p_1(x)=\frac{-1}{\alpha^2}(x+\alpha)(x-\alpha)\ ,\ p_2(x)=\frac{1}{2\alpha^2}x(x+\alpha)$$

とおくとき， $p_i(x_j)=\begin{cases}1 & (i=j)\\ 0 & (i\neq j)\end{cases}$ であるから，2 次の多項式 $f(x)$ に対して，

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx=\sum_{i=0}^{2} f(x_i)\int_{-1}^{1} p_i(x)\,dx=\frac{1}{3\alpha^2}\left\{f(-\alpha)+(6\alpha^2-2)\,f(0)+f(\alpha)\right\}$$

が成り立つ。

ここで，任意の関数 $f(x)$ に対して，この式の右辺を $I(f)$ とおく。

この等式が 3 次の多項式に対して成り立つのは前述より明らかだが，4 次の多項式に対しても成り立つかどうかを調べてみる。

$$f(x)=a\,x^4+b\,x^3+c\,x^2+d\,x+e$$

とおくと，

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} f(x)\,dx&=a\int_{-1}^{1} x^4dx+\int_{-1}^{1}(b\,x^3+c\,x^2+d\,x+e)\,dx\\&=a\int_{-1}^{1} x^4dx+I(b\,x^3+c\,x^2+d\,x+e)\\&=a\int_{-1}^{1} x^4dx+I(f)-a\,I(x^4)\end{aligned}$$

であるから， $\int_{-1}^{1} f(x)\,dx=I(f)$ が成り立つかどうかは，

$$\int_{-1}^{1}x^4dx=I(x^4)$$

が成り立つ条件を調べればよい。

そこで，

$$f(x)=x^4$$
$$h(x)=x^2(x+\alpha)(x-\alpha)$$
$$g(x)=f(x)-h(x)$$

とおくと，$g(x)$ は 2 次多項式で，

$$f(-\alpha)=g(-\alpha)\ ,\ f(0)=g(0)\ ,\ f(\alpha)=g(\alpha)$$

よって，

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

したがって，$f(x)=x^4$ に対して，$\int_{-1}^{1}f(x)\,dx=I(f)$ が成り立つには，

$$\int_{-1}^{1}f(x)\,dx=\int_{-1}^{1}g(x)\,dx \quad \text{すなわち} \quad \int_{-1}^{1}\{f(x)-g(x)\}dx=0$$

が成り立てばよい。

$$\int_{-1}^{1}\{f(x)-g(x)\}dx=\int_{-1}^{1}h(x)\,dx=\int_{-1}^{1}x^2(x+\alpha)(x-\alpha)\,dx=\frac{2}{5}-\frac{2}{3}\alpha^2$$

であるから，

$$\alpha^2=\frac{3}{5}$$

$$I(f)=\frac{1}{9}\left\{5f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right)+8f(0)+5f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)\right\}$$

を得る。

以上から，4 次以下の多項式 $f(x)$ に対して，

$$\int_{-1}^{1}f(x)\,dx=\frac{1}{9}\left\{5f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right)+8f(0)+5f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)\right\} \qquad (\,f(x)\text{ は 4 次以下の多項式})$$

が成り立つ。さらに，前述「積分の 2 次近似と 3 次関数」と同様に考えて，この等式は $f(x)$ が 5 次以下の多項式に対して成り立つことがわかる。

積分の 4 次近似

ここまでは 2 次式による積分計算であったが，次に 4 次式により積分計算を考えてみる。

$0<\alpha<\beta$ に対して，

$$x_0=-\beta\ ,\ x_1=-\alpha\ ,\ x_2=0\ ,\ x_3=\alpha\ ,\ x_4=\beta$$

$$p_0(x)=\frac{x(x^2-\alpha^2)(x-\beta)}{2\beta^2(\beta^2-\alpha^2)}\ ,\ p_1(x)=-\frac{x(x-\alpha)(x^2-\beta^2)}{2\alpha^2(\beta^2-\alpha^2)}\ ,\ p_2(x)=\frac{(x^2-\alpha^2)(x^2-\beta^2)}{\alpha^2\beta^2}$$

$$p_3(x)=-\frac{x(x+\alpha)(x^2-\beta^2)}{2\alpha^2(\beta^2-\alpha^2)}\ ,\ p_4(x)=\frac{x(x^2-\alpha^2)(x+\beta)}{2\beta^2(\beta^2-\alpha^2)}$$

とおくとき， $p_i(x_j)=\begin{cases}1 & (i=j)\\ 0 & (i\neq j)\end{cases}$ であるから，4 次の多項式 $f(x)$ に対して，

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} f(x)\,dx &= \sum_{i=0}^{4} f(x_i)\int_{-1}^{1} p_i(x)\,dx\\ &= \frac{(3-5\alpha^2)}{15\beta^2(\beta^2-\alpha^2)}\left\{f(-\beta)+f(\beta)\right\}\\ &\quad -\frac{(3-5\beta^2)}{15\alpha^2(\beta^2-\alpha^2)}\left\{f(-\alpha)+f(\alpha)\right\}\\ &\quad +\frac{6-10(\alpha^2+\beta^2)+30\alpha^2\beta^2}{15\alpha^2\beta^2} f(0)\end{aligned}$$

が成り立つ。

ここで，任意の関数 $f(x)$ に対して，この式の右辺を $I(f)$ とおく。

$f(x)$ が奇関数のとき，

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = I(f) \qquad (\ f(x)\text{ は奇関数})$$

は明らかなので，5 次以下の多項式 $f(x)$ について，

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = I(f) \qquad (\ f(x)\text{ は 5 次以下の多項式})$$

が成り立つ。

以下では，この等式が 6 次や 8 次の多項式で成り立つための条件を調べる。
そのためには，

$$\int_{-1}^{1} x^6\,dx = I(x^6)\ \ ,\ \ \int_{-1}^{1} x^8\,dx = I(x^8)$$

が成り立てばよい。

まず， $\int_{-1}^{1} x^6\,dx = I(x^6)$ が成り立つ条件を調べる。

$$\begin{aligned}I(x^6) &= I\left(x^6 - x^2(x^2-\alpha^2)(x^2-\beta^2)\right)\\ &= \int_{-1}^{1}\{x^6 - x^2(x^2-\alpha^2)(x^2-\beta^2)\}\,dx\end{aligned}$$

$x^6 - x^2(x^2-\alpha^2)(x^2-\beta^2)$
は 4 次式

であるから， $\int_{-1}^{1} x^6\,dx = I(x^6)$ が成り立つためには，

$$\int_{-1}^{1} x^6\,dx = \int_{-1}^{1}\{x^6 - x^2(x^2-\alpha^2)(x^2-\beta^2)\}\,dx$$

すなわち， $\int_{-1}^{1} x^2(x^2-\alpha^2)(x^2-\beta^2)\ dx = 0$

が成り立てばよい。これを計算して，

$$\frac{1}{7}-\frac{1}{5}(\alpha^2+\beta^2)+\frac{1}{3}\alpha^2\beta^2=0 \quad \cdots\text{(A)}$$

条件（A）を満たすα, βに対しては，6 次以下の（したがって 7 次以下の）多項式 $f(x)$ に対して，

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx = I(f) \qquad (\,f(x)\text{ は 7 次以下の多項式})$$

が成り立つ。

以下では条件（A）のもとで，$\int_{-1}^{1} x^8\,dx = I(x^8)$ を満たす条件を調べる。

$$\begin{aligned} I(x^8) &= I\left(x^8 - x^4(x^2-\alpha^2)(x^2-\beta^2)\right) \\ &= \int_{-1}^{1}\{x^8 - x^4(x^2-\alpha^2)(x^2-\beta^2)\}\,dx \end{aligned}$$

$x^8 - x^4(x^2-\alpha^2)(x^2-\beta^2)$
は 6 次式

であるから，$\int_{-1}^{1} x^8\,dx = I(x^8)$ が成り立つためには，

$$\int_{-1}^{1} x^8\,dx = \int_{-1}^{1}\{x^8 - x^4(x^2-\alpha^2)(x^2-\beta^2)\}\,dx$$

すなわち，$\int_{-1}^{1} x^4(x^2-\alpha^2)(x^2-\beta^2)\,dx = 0$

が成り立てばよい。これを計算して，

$$\frac{1}{9}-\frac{1}{7}(\alpha^2+\beta^2)+\frac{1}{5}\alpha^2\beta^2=0 \quad \cdots\text{(B)}$$

（A），（B）より

$$\alpha^2+\beta^2=\frac{10}{9},\ \alpha^2\beta^2=\frac{5}{21}$$

$$\alpha^2=\frac{35-2\sqrt{70}}{63},\ \beta^2=\frac{35+2\sqrt{70}}{63}$$

$$I(f)=\frac{322-13\sqrt{70}}{900}\{f(-\beta)+f(\beta)\}+\frac{322+13\sqrt{70}}{900}\{f(-\alpha)+f(\alpha)\}+\frac{128}{225}f(0)$$

よって，8 次以下の（したがって 9 次以下の）多項式に対して，

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx=\frac{322-13\sqrt{70}}{900}\{f(-\beta)+f(\beta)\}+\frac{322+13\sqrt{70}}{900}\{f(-\alpha)+f(\alpha)\}+\frac{128}{225}f(0)$$

ただし，$\alpha^2=\dfrac{35-2\sqrt{70}}{63}$，$\beta^2=\dfrac{35+2\sqrt{70}}{63}$

（ちなみに，$\alpha = 0.538\cdots$, $\beta = 0.906\cdots$）

が成り立つ。

一般の関数 $f(x)$ に対して，

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \cong \frac{322-13\sqrt{70}}{900}\{f(-\beta)+f(\beta)\}+\frac{322+13\sqrt{70}}{900}\{f(-\alpha)+f(\alpha)\}+\frac{128}{225}f(0)$$

は，積分の近似式を与えるが，さらに置換を行って，

$$\begin{aligned}\int_{m-h}^{m+h} f(x)\,dx \cong &\frac{(322-13\sqrt{70})h}{900}\{f(m-\beta h)+f(m+\beta h)\}\\ &+\frac{(322+13\sqrt{70})h}{900}\{f(m-\alpha h)+f(m+\alpha h)\}\\ &+\frac{128h}{225}f(m)\end{aligned}$$

を得る。積分区間が広い場合，積分区間を細かく分け，そのひとつひとつの小区間についてこの近似式を適用すれば，より正確な値を求めることができる。以下ではこれを「T 近似法」と呼ぶことにする。

近似式としての評価

T 近似法が，高次の多項式や多項式以外の関数について，どの程度の値を得ることができるかをシンプソン法と比較する。

シンプソン法では，積分区間を m に分割し，各区間の両端点と中点における関数値を元に計算するから，$(2m+1)$ 個の関数値を必要とする。一方，T 近似法では，積分区間を n 個に分割した場合，各区間内の 5 個の点における関数値を元に計算するから，$5n$ 個の関数値を必要とする。以下の比較では，条件を揃えるために $n=\frac{2}{5}m$ として計算する。

$$\int_0^1 x^{14}dx=\frac{1}{15}=0.06666666666666\cdots$$

	$m=5, n=2$		$m=20, n=8$	
	積分値	誤差	積分値	誤差
シンプソン法	0.0677326178532333	1.1×10^{-3}	0.0666713676415648	5.7×10^{-6}
T 近似法	0.0666664357443810	2.3×10^{-7}	0.0666666666664028	2.6×10^{-13}

$$\int_0^1 e^x dx=e-1=1.71828182845904524\cdots$$

	$m=5, n=2$		$m=20, n=8$	
	積分値	誤差	積分値	誤差
シンプソン法	1.7182827819248223	9.6×10^{-7}	1.7182818321876780	3.2×10^{-9}
T 近似法	1.7182818284590446	6.6×10^{-16}	1.7182818284590452	10^{-18} 以下

$$\int_0^1 \sqrt{x}\,dx = \frac{2}{3} = 0.666666666666666\cdots$$

	$m=5\,,\,n=2$		$m=20\,,\,n=8$	
	積分値	誤差	積分値	誤差
シンプソン法	0.6640995897574209	2.6×10^{-3}	0.6663457570891607	3.2×10^{-4}
T 近似式	0.6668894489261593	2.3×10^{-4}	0.6666945144492135	2.8×10^{-5}

$$\int_0^1 \frac{dx}{1+x} = \log 2 = 0.693147180559945309\cdots$$

	$m=5\,,\,n=2$		$m=20\,,\,n=8$	
	積分値	誤差	積分値	誤差
シンプソン法	0.6931502306889303	3.1×10^{-6}	0.6931471927479560	1.2×10^{-8}
T 近似式	0.6931471804913037	6.9×10^{-12}	0.6931471805599518	1.3×10^{-16}

（以上）