Gauss-Legendre 求積公式の導出[1]

千葉　豪

以下の $(N-1)$ 次の多項式 $f(x)$ を考える。

$$f(x) = a_{N-1}x^{N-1} + a_{N-2}x^{N-2} + ... + a_1 x + a_0 \tag{1}$$

この多項式について、区間 $[-1,1]$ の積分を以下のガウス求積（Gaussian quadrature）で求めるとする。

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \sum_{m=1}^{M} f(x_m)w_m \tag{2}$$

上式右辺における x_m が求積公式の離散点、w_m がその重みに対応する。

式 (2) の左辺の積分は、以下のように計算することが出来る。

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} f(x)dx &= \int_{-1}^{1} \left(a_{N-1}x^{N-1} + a_{N-2}x^{N-2} + ... + a_1 x + a_0\right) dx \\ &= \left[\frac{1}{N}a_{N-1}x^{N} + \frac{1}{N-1}a_{N-2}x^{N-1} + ... + \frac{1}{2}a_1 x^2 + a_0 x\right]_{-1}^{1} \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} a_n \alpha_n \end{aligned} \tag{3}$$

ここで、α_n は定数であり、次のように書ける[2] 。

$$\alpha_n = \begin{cases} \dfrac{2}{n+1}, & (n = \text{even}), \\ 0, & (n = \text{odd}) \end{cases} \tag{4}$$

一方、式 (2) の右辺も以下のように書き下せる。

$$\begin{aligned}\sum_{m=1}^{M} f(x_m)w_m &= \sum_{m=1}^{M} \left(a_{N-1}x_m^{N-1} + a_{N-2}x_m^{N-2} + ... + a_1 x_m + a_0\right) w_m \\ &= a_{N-1}\left(\sum_{m=1}^{M} x_m^{N-1}w_m\right) + ... + a_1\left(\sum_{m=1}^{M} x_m w_m\right) + a_0\left(\sum_{m=1}^{M} w_m\right) \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} a_n \beta_n \end{aligned} \tag{5}$$

ここで、

$$\beta_n = \sum_{m=1}^{M} x_m^n w_m \tag{6}$$

である。

以上より、式 (2) が任意の $(N-1)$ 次の多項式について成り立つ、すなわち任意の a_n の値について成り立つためには、以下の条件が必要となることが分かる。

$$\alpha_n = \beta_n, \qquad n = 0, 1, ..., N-1 \tag{7}$$

いま我々は求積セットとして、M 点の (x_m, w_m) のセットを考えているが、式 (7) から明らかなように方程式の本数は N であるため、未知数の数と方程式の本数が一致するとき、すなわち $2M = N$ のとき、未知数である x_m、w_m の値を一意に決めることが出来る。つまり、$N/2$ 点の求積セットにより $(N-1)$ 次の

[1] /Document/Education/GaussLegendreQuadrature

[2] n が奇数であるとき $\alpha_n = 0$ となるのは、$a_n x^n$ は $x = 0$ について対称であり $[-1,1]$ における積分がゼロとなることに対応する。

多項式の求積を厳密に行える（N 点の求積セットにより $(2N-1)$ 次の多項式の求積を厳密に行える）ことが分かる。

次に、$(2N-1)$ 次多項式の積分は N 点の Gauss-Legendre 求積により厳密に求まることを文献 [1] を参考に述べる。

$(2N-1)$ 次の任意の多項式 $g_{2N-1}(x)$ が $[-1,1]$ で定義されているとし、この区間における $g_{2N-1}(x)$ の積分を求積により求めるとしよう。

ここで、区間 $[-1,1]$ に存在する N 点の x_m において $g_{2N-1}(x)$ と値が一致し、かつ $[-1,1]$ での積分も一致する $(N-1)$ 次の多項式 $G_{N-1}(x)$、[3] すなわち、以下を満足する $G_{N-1}(x)$ を考える。

$$
\begin{aligned}
G_{N-1}(x_m) &= g_{2N-1}(x_m), \quad x_m \in [-1,1], \quad m=1,2,...,N, && (8)\\
\frac{1}{2}\int_{-1}^{1} G_{N-1}(x)dx &= \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} g_{2N-1}(x)dx && (9)
\end{aligned}
$$

$N=2$ のときの例を **Fig. 1** に示す。

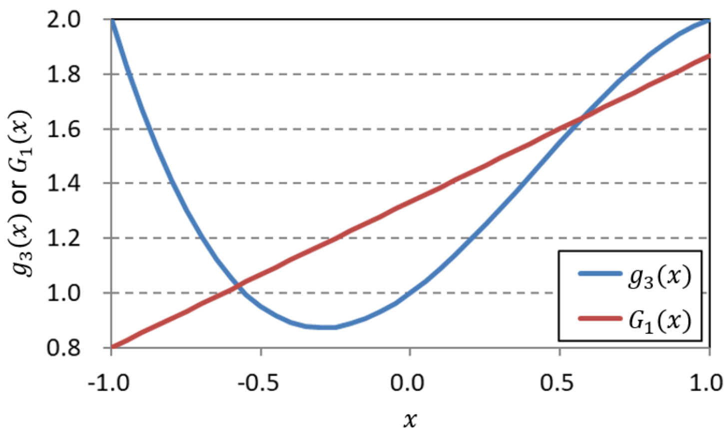

Fig. 1: $g_3(x)$ と $G_1(x)$ の例

そして、$g_{2N-1}(x)$ と $G_{N-1}(x)$ の差分を $(2N-1)$ 次の多項式 $f_{2N-1}(x)$ として以下のように定義する。

$$
f_{2N-1}(x) = g_{2N-1}(x) - G_{N-1}(x) \tag{10}
$$

式 (9) より、$f_{2N-1}(x)$ は以下を満足する。

$$
\int_{-1}^{1} f_{2N-1}(x)dx = 0 \tag{11}
$$

また、式 (8) より、$f_{2N-1}(x)$ は x_m においてゼロとなるので、$f_{2N-1}(x)$ は別な $(N-1)$ 次の多項式 $F_{N-1}(x)$ を用いて以下のように記述できる。

$$
f_{2N-1}(x) = (x-x_1)(x-x_2)...(x-x_N)F_{N-1}(x) \tag{12}
$$

これを式 (10) に代入すると以下を得る。

$$
\int_{-1}^{1} (x-x_1)(x-x_2)...(x-x_N)F_{N-1}(x)dx = 0 \tag{13}
$$

[3] N 点の x_m においてとる値が決められている $(N-1)$ 次の多項式は一意に決まる（2 点を通る一次多項式は一意に決められることから分かるであろう）。

そして、この式が任意の $F_{N-1}(x)$ に対して成り立つように n 個の x_m を決めることを考える。$F_{N-1}(x)$ は $(N-1)$ 次の多項式であるため、以下のように $(N-1)$ 次までの Legendre 多項式で記述できる。[4]。

$$F_{N-1}(x) = \sum_{i=0}^{N-1} a_i P_i(x) \tag{14}$$

ここで、$P_i(x)$ は i 次の Legendre 多項式を示す。従って、$(x-x_1)(x-x_2)...(x-x_N)$ を N 次の Legendre 多項式 $P_N(x)$ の定数倍（$bP_N(x)$）とするならば、式 (13) の左辺は Legendre 多項式の直交性を用いて次のように書ける。

$$\int_{-1}^{1} bP_N(x) \sum_{i=0}^{N-1} a_i P_i(x) dx = \sum_{i=0}^{N-1} ba_i \int_{-1}^{1} P_N(x) P_i(x) dx = 0 \tag{15}$$

これより、式 (13) が任意の $F_{N-1}(x)$ について成り立つためには、$(x-x_1)(x-x_2)...(x-x_N)$ が N 次の Legendre 多項式 $P_N(x)$ の定数倍であればよいこと、すなわち、x_m が N 次の Legendre 多項式 $P_N(x)$ の零点に対応することが分かる。$N=2$ のときの例を **Fig. 2** に示す。

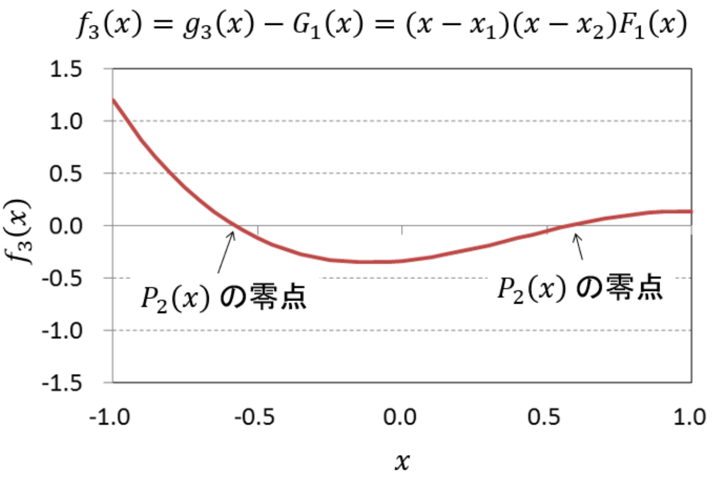

Fig. 2: $f_3(x)$ と $P_2(x)=0$ の零点

最後に、x_m に対応する重み w_m の決め方について述べる。式 (9) より、$G_{N-1}(x)$ の積分が求積により正しく求まれば、$g_{2N-1}(x)$ の積分も以下のように正しく求まる。

$$\frac{1}{2}\int_{-1}^{1} g_{2N-1}(x)dx = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} G_{N-1}(x)dx = \frac{1}{2}\sum_{m=1}^{N} w_m G_{N-1}(x_m) = \frac{1}{2}\sum_{m=1}^{N} w_m g_{2N-1}(x_m) \tag{16}$$

任意の $G_{N-1}(x)$ に対して求積により厳密に積分が計算できるためには式 (7) が成り立つ必要があるが、この方程式の本数は N となるので、未知数 w_m の個数 N と一致し、w_m が一意に決まることが分かる。

[4]任意の N 次多項式は N 次までの Legendre 多項式で記述できる。

以上の説明は少々まどろっこしいので、別な方法での説明を以下で行う（こちらのほうがむしろ一般的かもしれない)。$(2N-1)$ 次の多項式 $f_{2N-1}(x)$ の求積を考える。この多項式は N 次の Legendre 多項式 $P_N(x)$ を用いて以下のように記述できる。

$$f_{2N-1}(x) = P_N(x)g_{N-1}(x) + r_{N-1}(x) \tag{17}$$

これを $[-1,+1]$ で積分すると、$g_{N-1}(x)$ は $N-1$ 次までの Legendre 多項式で展開できることから、右辺の第一項はゼロとなり、以下が得られる。

$$\int_{-1}^{+1} f_{2N-1}(x)dx = \int_{-1}^{+1} r_{N-1}(x)dx \tag{18}$$

この右辺を N 点の求積公式で計算することを考えたとき、任意の x_i に対して、厳密な求積が可能となる w_i が一意に決まる。

$$\int_{-1}^{+1} r_{N-1}(x)dx = \sum_{i=1}^{N} w_i r_{N-1}(x_i) \tag{19}$$

従って、全ての x_i について、$f_{2N-1}(x_i) = r_{N-1}(x_i)$ が成り立てば、以下のように $f_{2N-1}(x)$ に対する厳密な求積が可能となることが分かる。

$$\sum_{i=1}^{N} w_i f_{2N-1}(x_i) = \sum_{i=1}^{N} w_i r_{N-1}(x_i) = \int_{-1}^{+1} r_{N-1}(x)dx = \int_{-1}^{+1} f_{2N-1}(x)dx \tag{20}$$

上の条件 $f_{2N-1}(x_i) = r_{N-1}(x_i)$ を満足するためには、式 (17) より $P_N(x_i) = 0$ であればよい。つまり、求積セットにおける x_i として $P_N(x) = 0$ の根を用いればよいことが分かる。

参考文献

[1] Alcouffe R. E., O'Dell R. D., 'Transport calculations for nuclear reactors,' *CRC Handbook of Nuclear Reactors Calculations,* Vol.1, p.380, CRC Press, Boca Raton, Florida (1986).

以降では、これまでの議論を一般化したものについて述べる。

区間 $[-1, +1]$ における関数 $G(x)$ の積分を考える。$G(x)$ が $(2n-1)$ 次の多項式であるならば、n 次の Legendre 多項式 $P_n(x)$ を用いて、$G_{2n-1}(x) = Q_{n-1}(x)P_n(x) + R_{n-1}(x)$ と出来るので、以下が得られる。

$$\int_{-1}^{+1} G_{2n-1}(x)dx = \int_{-1}^{+1} Q_{n-1}(x)P_n(x)dx + \int_{-1}^{+1} R_{n-1}(x)dx = \int_{-1}^{+1} R_{n-1}(x)dx \tag{21}$$

従って、ガウス求積における積分点 x_i を $P_n(x_i) = 0$ となるように決めれば、以下が得られる。

$$\sum_{i=1}^{n} w_i G(x_i) = \sum_{i=1}^{n} w_i \left(Q(x_i)P_n(x_i) + R(x_i)\right) = \sum_{i=1}^{n} w_i R(x_i) \tag{22}$$

$(n-1)$ 次の多項式 $R_{n-1}(x)$ は n 個のパラメータで記述できるため、任意の $R(x)$ について以下が成り立つガウス求積の重み w_i も一意に決まる。

$$\sum_{i=1}^{n} w_i R(x_i) = \int_{-1}^{+1} R(x)dx \tag{23}$$

次に、区間 $[a, b]$ における関数 $F(x)$ の積分を考える。$F(x)$ が $(2n-1)$ 次の多項式 $G_{2n-1}(x)$ を用いて $F(x) = T(x)G_{2n-1}(x)$ と書けるとするならば、上の例と同様に、$G_{2n-1}(x)$ を、荷重関数 $T(x)$、区間 $[a, b]$ で定義される直交多項式 $S_n(x)$ を用いて $G_{2n-1}(x) = Q_{n-1}(x)S_n(x) + R_{n-1}(x)$ のように記述する。すると、以下が得られる。

$$\int_{-1}^{+1} F(x)dx = \int_{-1}^{+1} T(x)R_{n-1}(x)dx \tag{24}$$

従って、x_i を $S_n(x_i) = 0$ となるように決めれば、以下が得られる。

$$\sum_{i=1}^{n} w_i F(x_i) = \sum_{i=1}^{n} w_i T(x_i)R_{n-1}(x_i) \tag{25}$$

$T(x)R_{n-1}(x)$ は n 個のパラメータで記述できるため、任意の $R(x)$ について以下が成り立つ w_i が上と同様に一意に決まる。

$$\sum_{i=1}^{n} w_i F(x_i) = \int_{-1}^{+1} T(x)R(x)dx \tag{26}$$

また、$F(x)$ を $T(x)G_{2n-1}(x)$ とした場合には

$$\sum_{i=1}^{n} w_i T(x_i)G_{2n-1}(x_i) = \sum_{i=1}^{n} w_i T(x_i)R_{n-1}(x_i) \tag{27}$$

となるので、

$$\sum_{i=1}^{n} w_i' G_{2n-1}(x_i) = \int_{-1}^{+1} T(x)R(x)dx \tag{28}$$

のようにガウス求積の重みを定義することもでき、こちらのほうがむしろ一般的である。

Gauss-Legendre 求積は、上の議論において、積分区間を $[-1, +1]$、荷重関数を $T(x) = 1$ とした場合のものと理解できる。

また、荷重関数として $T(x) = 1$ としない Gauss 求積法の一例として Gauss-Chebyshev 求積がある。ここで、半円の円周上での関数値の積分、すなわち $f(\theta)$ についての $[0, \pi]$ での以下の積分を考える。

$$\int_0^{\pi} f(\theta)d\theta \tag{29}$$

この積分に対して、$x = \cos\theta$ による変数変換を行うと、$dx = -\sin\theta d\theta$ より、以下を得る。

$$\int_{-1}^{+1} f(x)\frac{1}{\sin\theta}dx = \int_{-1}^{+1} f(x)\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}dx \tag{30}$$

これは、積分区間を $[-1,+1]$、荷重関数を $T(x)=\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ とした場合に該当する。この場合の直交多項式は Chebyshev 多項式となり、それに基づいて決まる積分点と重みを用いた以下の Gauss 求積が Gauss-Chebyshev 求積である。

$$\sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i) = \sum_{i=1}^{n} w_i f(\theta_i) \tag{31}$$

Gauss-Chebyshev 求積では、$f(\theta)$ が $\cos\theta$ の多項式で記述されることが想定されていることになる[5]。

$x=1$ や $x=-1$ で発散性を示す関数 $F(x)$ の積分に対しては、Gauss-Chebyshev 求積が望ましいという考え方がある。その場合、$F(x)$ の積分は以下のように行われる。

$$\int_{-1}^{+1} F(x)dx = \int_{-1}^{+1} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \sqrt{1-x^2} F(x) dx = \sum_{i=1}^{n} \omega_i' \sqrt{1-x_i^2} F(x_i) \tag{32}$$

$x=1$ や $x=-1$ で発散性を示す $F(x)$ に対して、それに $\sqrt{1-x^2}$ が乗ぜられることで発散性が緩和され、求積の精度が向上するかもしれない。

[5] N 点の Gauss-Chebyshev 求積での離散点 x_n は、$x_n=\cos\theta_n$ としたとき、$\cos n\theta=0$ の解として与えられる。すなわち、半円上において θ_n は等間隔となる。このことは、$\cos m\theta$（$m=1,2,...$）が $[0,\pi]$ において直交多項式系を構成することから自明であるが、$\prod_m(\cos\theta-\cos\theta_m)$ が直交多項式系を構成するときの $\cos\theta_m$ を求めることから示そうとするとドツボにはまることを反省の意味を込めて追記しておく。