数理解析研究所講究録
第 129 巻 1971 年 2-11

多次元数値積分についての試み

北大 理・物理 田中 一
北大 理・計算センター 長田博泰

§1. 序

数値積分には、種々の方法があるが、これらの方法を多次元積分に用いると、積分区間内にとる分点の数が指数関数的に増大し、計算時間が長くなり実際には計算が不可能になること。

その困難を解決する方法としてモンテカルロ法がある。モンテカルロ法は精度をあげるため種々のテクニックが研究されている。

我々は、ガウスの数値積分法にモンテカルロ法を適用し、積分値を求めようと考え、種々検討した。以下、それについて述べる。

§2. 方法

n次元積分 $\int_{a_1}^{b_1}\int_{a_2}^{b_2}\cdots\int_{a_n}^{b_n} f(x_1, x_2, \cdots, x_n)\,dx_1\cdots dx_n$

に対しこガウスの数値積分を適用する。以下，議論を簡単にするために，変数変換　$x_i=(a+b)/2-(a-b)t_i/2$ を行なって積分　$I=\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\cdots\int_{-1}^{1}F(t_1,t_2,\cdots,t_n)dt_1\cdots dt_n$
を考える。

ガウスの数値積分はIの値を

$$I\fallingdotseq\sum_{i_1=1}^{m_1}\cdots\sum_{i_n=1}^{m_n}F(\alpha_{i_1},\cdots,\alpha_{i_n})\omega_{i_1}\cdots\omega_{i_n} \qquad (1)$$

で与える。但し，α_{i_j}はm_j次のルジャンドル多項式の零点，ω_{i_j}はα_{i_j}に対する重みである。

$m_1=m_2=\cdots=m_n=m$とすれば(1)の計算にはm^n個の零点の組が必要であり，これは次元が大きくなれば指数函数的に増大する。そこで我々は、m^n個の零点の組を全部は使わずに次の方法を用いる。

その方法は、1〜mの乱数$i_1,\cdots,i_n$を発生させながら、($i_1,\cdots,i_n$)のn組をきめ，m^n個の零点及び重みの中から，($\alpha_{i_1},\cdots\alpha_{i_n}$)と($\omega_{i_1},\cdots,\omega_{i_n}$)をN個サンプリングし，Iの推定値として

$$I_1=\frac{m^n\sum_{i=1}^{N}F(\bar{\alpha}_i)\bar{\omega}_i}{N} \qquad \bar{\alpha}_i=(\alpha_{i_1},\cdots,\alpha_{i_n}) \quad \bar{\omega}_i=\omega_{i_1}\cdots\omega_{i_n}$$

をとる。関数Fが積分区間内で有界であれば、大数の法則によりN→∞のとき、$I_1\to I$が成立する。

§3. 誤差の評価

上記の方法の誤差は

$$\sigma_1(I_1) = \frac{1}{N}\left(m^n \sum_{i=1}^{m^n} F^2(\bar{\alpha}_i)\bar{\omega}_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{m^n} F(\bar{\alpha}_i)\bar{\omega}_i\right)^2\right)$$

で与えられる。一方、モンテカルロ法による積分の誤差は

$$\sigma_2(I) = \frac{1}{N}\left(2^n \int_{-1}^{1}\cdots\int_{-1}^{1} F^2(t_1,\cdots,t_n)dt_1\cdots dt_n - \left(\int_{-1}^{1}\cdots\int_{-1}^{1} F(t_1,\cdots,t_n)dt_1\cdots dt_n\right)^2\right)$$

で与えられる。

$\sigma_1(I_1)$ と $\sigma_2(I)$ の比較を行なう。

$$D = \sigma_1(I_1) - \sigma_2(I)$$

$$= \frac{1}{N}\left(m^n \sum F^2(\bar{\alpha}_i)\bar{\omega}_i^2 - \left(\sum F(\bar{\alpha}_i)\bar{\omega}_i\right)^2 - 2^n \int_{-1}^{1}\cdots\int_{-1}^{1} F^2(t)dt + \left(\int_{-1}^{1}\cdots\int_{-1}^{1} F(t)dt\right)^2\right)$$

$\sum F(\bar{\alpha}_i)\bar{\omega}_i$ は $\int_{-1}^{1}\cdots\int_{-1}^{1} F(t)dt$ のガウスの近似積分であるから、m を適当に選べば、その誤差は小さくできるであろう。

したがって

$$D \cong \frac{1}{N}\left(m^n \sum F^2(\bar{\alpha}_i)\bar{\omega}_i^2 - 2^n \int_{-1}^{1}\cdots\int_{-1}^{1} F^2(t)dt\right)$$

を調べればよい。

$$\int_{-1}^{1}\cdots\int_{-1}^{1} F^2(t)dt = \sum_{i=1}^{m^n} F^2(\bar{\alpha}_i)\bar{\omega}_i + E(F^2) \qquad (E(F^2)\text{は誤差項})$$

とおくと

$$D \cong \frac{1}{N}\left(m^n \sum F^2(\bar{\alpha}_i)\bar{\omega}_i^2 - 2^n\left(\sum F^2(\bar{\alpha}_i)\bar{\omega}_i + E(F^2)\right)\right)$$

$$\cong \frac{1}{N}\left(m^n \sum F^2(\bar{\alpha}_i)\bar{\omega}_i - 2^n \sum F^2(\bar{\alpha}_i)\bar{\omega}_i\right) \qquad (2)$$

重みは $\omega_1 + \omega_2 + \cdots \omega_m = 2$ であるから、その平均は $2/m$ である。$\bar{\omega}_i = \omega_{i_1}\cdots\omega_{i_n}$ において $\omega_{i_1}, \omega_{i_n}$ は互いに独立に選ばれるから $\bar{\omega}_i$ の平均は $(2/m)^n$ である。

もし、$\bar{\omega}_i$ の分布が平均 $(2/m)^n$ のまわりに充分密集していれば (2) の右辺は 0 に近いであろう。

そこで，$\{\overline{w}_i = w_{i_1} \cdots w_{i_4}\}$ $(i_1, i_2, i_3, i_4 = 1, 2, \cdots, m)$ についてその分布を調べてみた。結果は表－1の通りである。

$\pm\sqrt{\beta_1} = \sqrt{\frac{\mu_3}{\mu_2^3}}$ （±はμ_3と同符号にする）

$\beta_2 = \frac{\mu_4}{\mu_2^2}$　μ_iはi次の積率

m	β_1	β_2
4	1.4094	4.8300
8	1.4099	4.5244
12	1.4475	4.6300
16	1.4721	4.7183

表－1

β_1は平均に関する分布の非対称度をあらわし，β_2は平均のまわりの密集度を表わす。

表－1の結果は，平均のまわりの密集度が高く，左側にゆがんでいることを示している。

§4. 数値例

4.1 ガウス型数値積分の誤差

ガウス型数値積分の打ち切り誤差はその評価式があるが，上の方法を適用するため，

$$p/\sin p \int_0^1 \cos px\,dx = 1$$

をガウス型の数値積分した際の誤差を実際に計算して見た。結果は表－2の通りである。

$$p/\sin p \int_0^1 \cos px\,dx \simeq p/\sin p \sum_{i=1}^{l} \cos(pz_i) \cdot w_i$$

但し，z_i：l次のルジャンドル多項式の零点

w_i : x_iに対する重み

$p=1,2,3,\cdots$　　　　$l=2,3,4\cdots\cdots$

p \ l	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
13													-5	-6	-8
12												-5	-6	-8	-9
11											-5	-6	-7	-9	-10
10										-4	-5	-7	-8	-10	
9									-4	-5	-6	-8	-9		
8								-4	-5	-7	-8	-10			
7							-3	-5	-6	-8	-9				
6						-2	-4	-5	-7	-9					
5					-3	-4	-6	-7	-9						
4	1	0	-1	-2	-4	-5	-7	-9	-11	-13					
3	1	0	-1	-3	-5	-7	-9	-11	-13						
2	0	-2	-4	-6	-8	-10	-12	-15							
1	-2	-4	-6	-9	-12	-14	-17								

表－2

表は絶対誤差が10^{-n}（nは表の数値）程度であることを示している。したがって，上の関数をガウス型数値積分で10^{-5}程度の誤差におさえたいならば $p=3,6,9$のときlをそれぞれ6，9，12程度にする必要があることを示している。

4.2　$(p/\sin p)^n \prod_{i=1}^{n}(\cos px_i+1)$の積分

$$(p/\sin p)^n \int_0^1 \cdots \int_0^1 \prod_{i=1}^{n}(\cos px_i+1)\,dx_1\cdots dx_n=1$$

を我々の方法で積分した結果を示す。

$p=3, 6, 9$とし各pにつき次元nを4, 8とした。また零点の数（ルジャンドル多項式の次数）は4.1の事実に基づき$p=3, 6, 9$に対しそれぞれ6, 9, 12個とった。

結果を図1-6に示す。図5,6の結果は$l=12$ではなく$l=9$であるので注意されたい。

なお，実際の計算では次のような方法をとっている。即ち、K個（一定）ずつの和 $a_j = l^n \sum_{i=1}^{K} F(\bar{\alpha}_i)\bar{\omega}_i / K \quad (j=1, 2, \cdots)$
を計算し， $s_k = (a_1 + \cdots + a_k)/k \quad (k=1, 2, \cdots)$
をもって $K \cdot k$個のサンプリングによる積分値とする。

これは，無限級数に対するチェザロの総和法の適用である。この方法は，無限級数$\sum_{n=1}^{\infty} a_n$があったとき，部分和の数列$\{s_n\}$を作り，

$$\sigma_n = (s_1 + \cdots + s_n)/n \quad (n=1, 2, \cdots)$$

とすると $\lim \sigma_n = \sigma$

なるとき$\sum_{n=1}^{\infty} a_n$はチェザロの意味での和をもつというものである。$\sum_{n=1}^{\infty} a_n$が和をもつとき，それはまたチェザロの意味でも和をもち，両者は等しい。

このようにしておけば，バラツキが平均化されて，その変化の傾向がつかみやすくなると思われる。

P=3, 次元4 (ℓ=6)

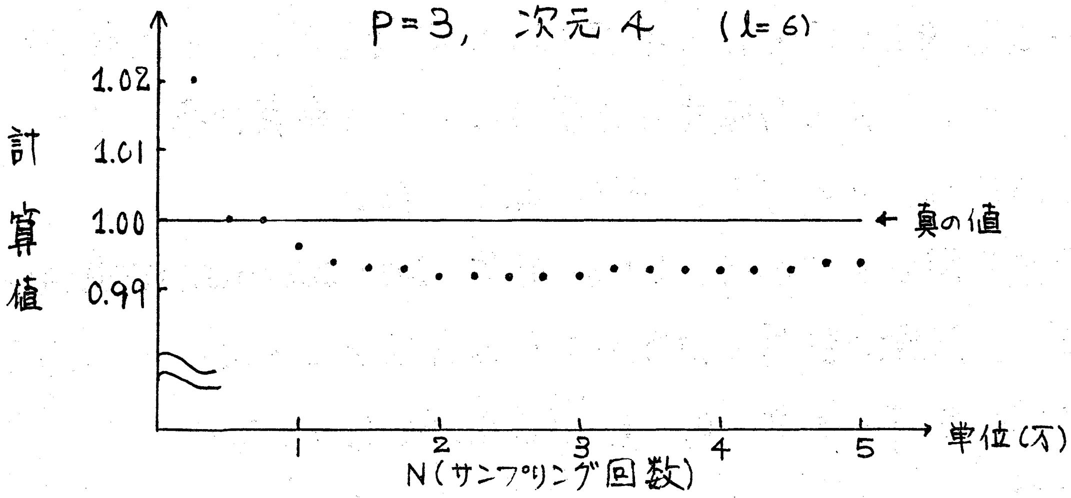

図-1

P=3, 次元8 (ℓ=6)

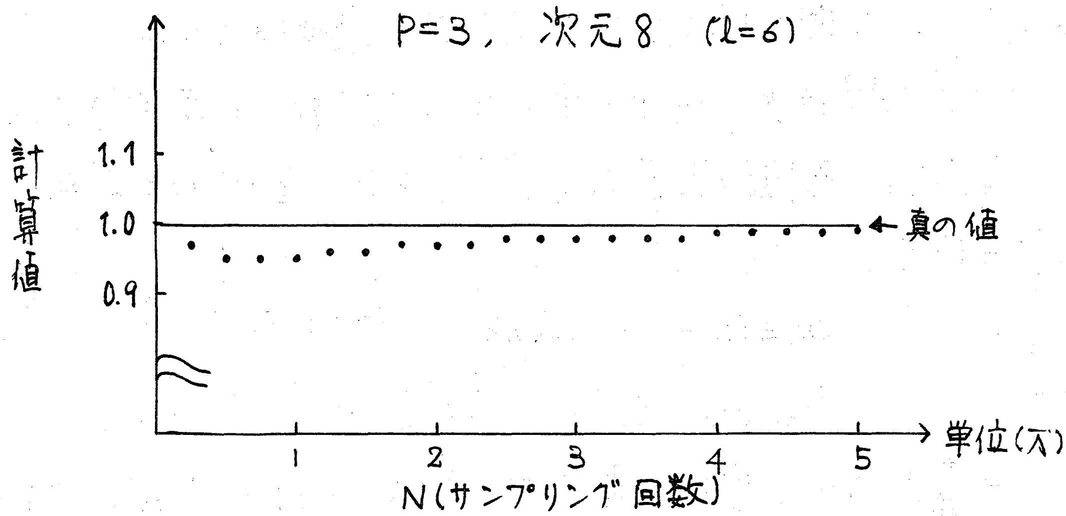

図-2

p=6, 次元4 (ℓ=9)

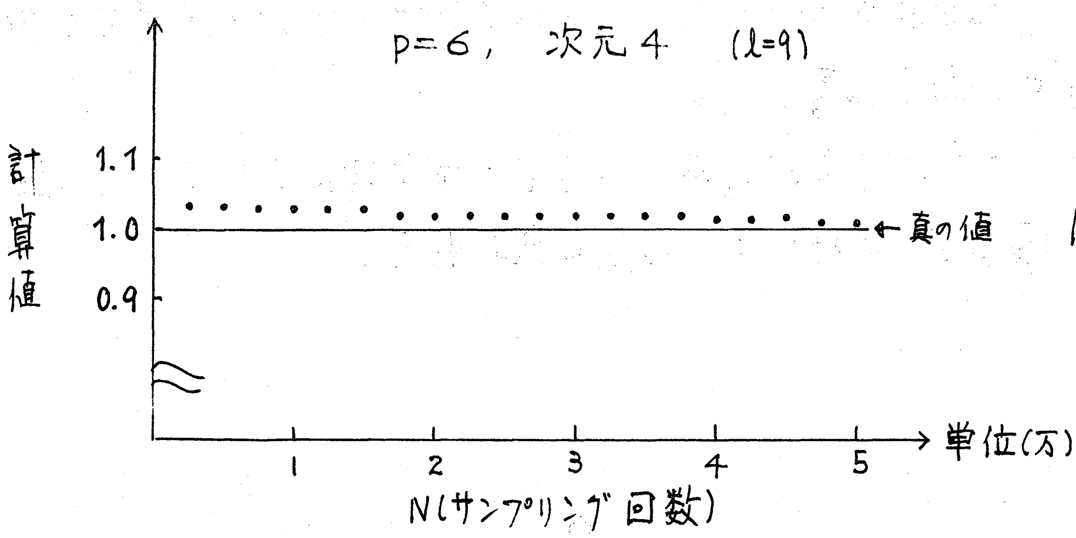

図-3

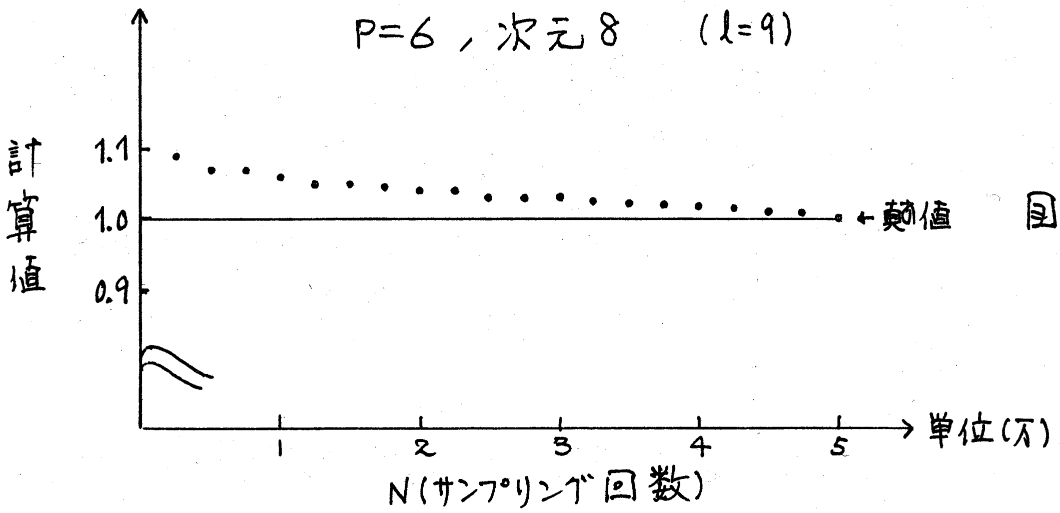
P=6 , 次元8 (l=9)
計算値
1.1
1.0
0.9
真の値
1
2
3
4
5
単位(万)
N(サンプリング回数)

図-4

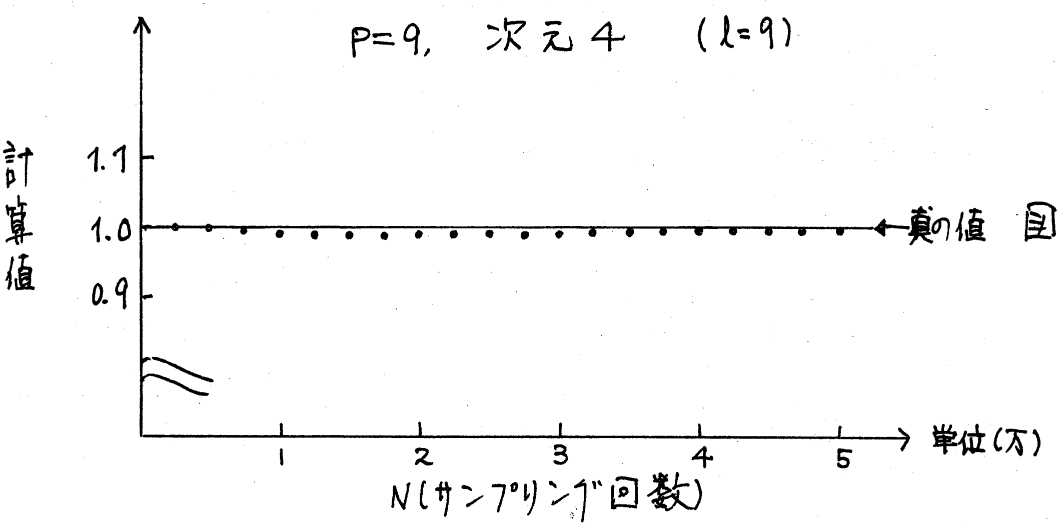
P=9, 次元4 (l=9)
計算値
1.1
1.0
0.9
真の値
1
2
3
4
5
単位(万)
N(サンプリング回数)

図-5

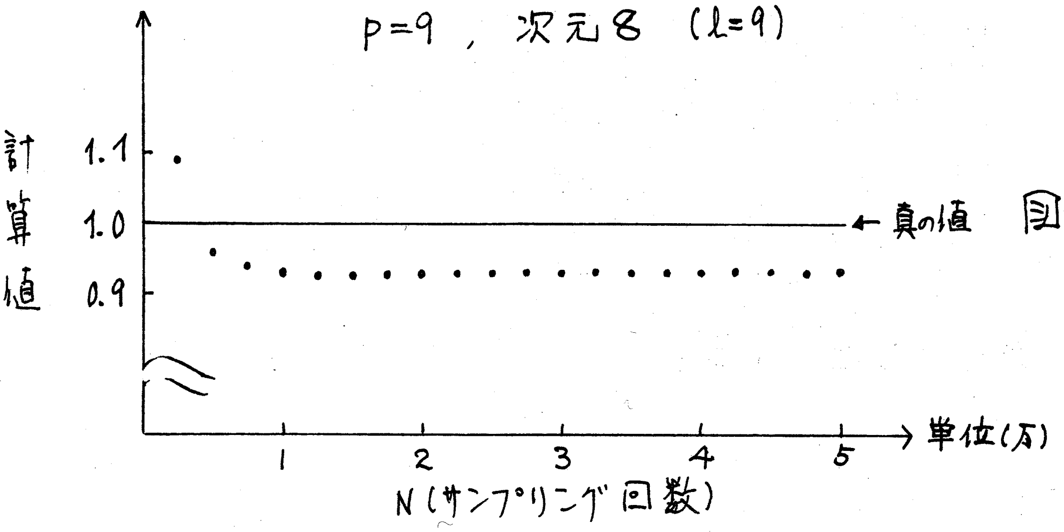
P=9 , 次元8 (l=9)
計算値
1.1
1.0
0.9
真の値
1
2
3
4
5
単位(万)
N(サンプリング回数)

図-6

§5. 結論

モンテカルロ法計算の効率は 次のように定義される[文献2]。即ち，同一の問題に対し，方法1と方法2のモンテカルロ計算があったとき，その計算時間をn_1，n_2，結果の分散をσ_1，σ_2とすると，方法2の方法1に対する効率は$n_1\sigma_1/n_2\sigma_2$である。

したがって，我々の方法と乱数による積分法を比較するために $n_1\sigma_1$を調べてみる必要がある。§4の数値例について次の通りであった。

(1) 時間×分散の比較

(a) 乱数による積分の場合

次元＼P	3	6	9
4	0.015	0.021	0.016
8	0.096	0.138	0.091

$N = 5\times10^4$個

(b) 我々の方法

次元＼P	3	6	9
4	0.0065	0.0028	0.00987
8	0.050	0.0137	0.0928
	$(l=6)$	$(l=9)$	$(l=12)$

$N = 5\times10^4$個

(2) 分散の比較

(a) 乱数による積分の場合

次元 \ P	3	6	9
4	0.0080	0.0093	0.0081
8	0.019	0.023	0.019

$N=10^4 \times 5$ 個

(b) 我々の方法

次元 \ P	3	6	9
4	0.0097	0.0061	0.0118
8	0.025	0.012	0.0333
	($l=6$)	($l=9$)	($l=12$)

$N=5\times10^4$ 個

以上，(1)，(2)の比較からわかるように，我々の方法は乱数による積分よりすぐれたものと結論することができる。

被積分関数の関数値の計算時間がここにあげた例に比してずっと長いことが実際であるから，そのような場合には，一応効果的であると考えることができよう。

文献

1. A.H.Stroud, Don Secrest: Gaussian Quadrature Formulas
2. 津田孝夫: モンテカルロ法とシミュレーション