第5章　数値積分

区間 I と，その上の重み $w(x)$ を固定して，函数 $f(x)$ の積分値

$$S(f) \equiv \int_a^b f(x)w(x)\,\mathrm{d}x \tag{5.1}$$

の計算アルゴリズムを述べる．

$S(f)$: 函数 $f(x)$ に実数を対応させる．（線型）汎函数 (linear) functional

数値積分法（近似積分法）(numerical quadrature) の必要性

解析的には簡単な被積分函数の場合でも，不定積分（原始函数）$F(x) = \int f(x)w(x)\,\mathrm{d}x$ を求め，定積分値は $F(b) - F(a)$ とすることでは計算できないことがある．例 $\int_0^x \exp(-t^2)\,\mathrm{d}t$

非常に複雑な形式の被積分函数では，不定積分はまったく分からない．

基本的な考え方 I 上で容易に積分できる函数 $\hat{f}(x)$ によって $f(x)$ を近似し，その積分値を求める値の近似値とする．

$$\hat{S}(f) \equiv S(\hat{f}) = \int_a^b \hat{f}(x)w(x)\,\mathrm{d}x \tag{5.2}$$

5.1　ニュートン・コーツ積分公式

補間多項式に基づく数値積分法

5.1.1　NC 公式の導出

しばらく $w(x) \equiv 1$ とする．

I 上の標本点 $a \le x_1 < x_2 < \cdots < x_n \le b$ を用いる $(n-1)$ 次補間多項式の Lagrange 表現

$$P_{n-1}(x) = \sum_{i=1}^{n} L_i(x)f(x_i), \quad \text{ただし } L_i(x) = \prod_{j=1, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

を，$\hat{f}(x)$ として用いれば

$$S_{n-1}(f) \equiv \int_a^b \sum_i L_i(x)f(x_i)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i) \tag{5.3}$$

ただし

$$A_i = \int_a^b L_i(x)\,\mathrm{d}x \quad (i = 1, 2, \ldots, n)$$

等間隔補間の場合

$x_j = a + jh$ $(j = 0, 1, \ldots, n)$ ($(n+1)$ 個!) $\quad h = (b-a)/n$
$f_j = f(x_j)$ とする.

$n = 1$ のときは，線型補間を行なうので

$$S_1(f) = \frac{h}{2}(f_0 + f_1) \quad \text{[台形則 (trapezoidal rule)]} \tag{5.4}$$

$n = 2$ のときは，二次補間を行なうので

$$S_2(f) = \frac{h}{3}(f_0 + 4f_1 + f_2) \quad \text{[Simpson 則]} \tag{5.5}$$

一般に等間隔標本点ならば

$$L_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \prod_j \frac{\theta - j}{i - j}$$

ゆえ

$$S_n(f) = h\sum_{i=0}^{n} a_i f_i, \qquad a_i = \frac{1}{h}\int_a^b L_i(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^n \prod_{j\neq i} \frac{\theta - j}{i - j}\,\mathrm{d}\theta$$

$\prod_{j\neq i}(i-j) = (-1)^{n-i} i!(n-i)!$ なので

$$a_i = (-1)^{n-i}\frac{1}{n!}\binom{n}{i}\int_0^n \frac{\theta(\theta-1)\cdots(\theta-n)}{\theta - i}\,\mathrm{d}\theta \tag{5.6}$$

被積分函数 $f(x)$ や積分区間 $[a, b]$ に依存しない重み $\{a_i\}$ をもつ

$$S_n(f) = h\sum_{i=0}^{n} a_i f_i$$

を，$(n+1)$ 点ニュートン・コーツ公式 (Newton-Cotes formula) という.

5.1.2 数値積分公式の次数・誤差

数値積分の誤差を $E_n(f) = S(f) - S_n(f)$ と定義.

定義 5.1 x の m 次の任意の多項式については，誤差が 0 であるとき, すなわち

$$E_n(x^k) = 0 \quad (k = 0, 1, \ldots, m)$$

かつ $E_n(x^{m+1}) \neq 0$ のとき, 数値積分公式は m 次 (order m) という. ∎

例 5.1 Simpson 則 $S_2(f)$ の場合.

$$S_2(1) = b - a, \quad S_2(x) = \frac{1}{2}(b^2 - a^2), \quad S_2(x^2) = \frac{2}{3}h(3a^2 + 6ah + 4h^2)$$

は明らか. もともと補間多項式の意味から当然. しかし

$$S_2(x^3) = 2h(a+h)(a^2 + 2ah + 2h^2) = \int_a^b x^3 \, \mathrm{d}x$$

も成り立ち, $S_2(f)$ は少なくも **3 次**の公式. ∎

NC 積分公式では, $P_n(x)$ を補間多項式として, 式 (4.5) より

$$E_n(f) = \int_a^b \{f(x) - P_n(x)\} \, \mathrm{d}x = \frac{1}{(n+1)!} \int_a^b (x - x_0) \cdots (x - x_n) f^{(n+1)}(\xi(x)) \, \mathrm{d}x \ (a < \xi(x) < b)$$

がえられる. これを使うと

定理 5.1 $f(x)$ を $C^{n+2}(I)$ 級 (n が偶数のとき), $C^{n+1}(I)$ 級 (n が奇数のとき) と仮定し, $h = (b-a)/n, x_j = a + jh \ (j = 0, 1, \ldots, n)$, $\omega(\theta) = \theta(\theta - 1) \cdots (\theta - n)$

$$K_n = \begin{cases} \displaystyle\int_0^n \theta\omega(\theta) \, \mathrm{d}\theta, & (n : \text{偶数}) \\ \displaystyle\int_0^n \omega(\theta) \, \mathrm{d}\theta, & (n : \text{奇数}) \end{cases}$$

とすると, (a, b) に ξ が存在して

$$E_n(f) = \begin{cases} \dfrac{K_n h^{n+3}}{(n+2)!} f^{(n+2)}(\xi) & (n : \text{偶数}) \\ \dfrac{K_n h^{n+2}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi) & (n : \text{奇数}) \end{cases} \tag{5.7}$$

が成り立つ. ∎

系 5.1 NC 公式は, n が偶数ならば $(n+1)$ 次, n が奇数ならば n 次である. ∎

問題 5.1 上の**系**の事実は，式 (5.7) を使わなくても導けること，つまり n が偶数のときは $(n+1)$ 次までの多項式に対して正確な積分値を与えることを，導け. ∎

K_n を実際に計算すると, たとえば

$$K_1 = -\frac{1}{6}, \quad K_2 = -\frac{15}{4}$$

NC 公式の問題点

(i) $n \geq 8$ では, 公式の係数 a_i が i に沿って順次符号を交代させ, しかも $n \to \infty$ のとき $|a_j| \to \infty$ $(j = 0, 1, \ldots, n)$ となる.

(ii) $|f^{(n+1)}(\xi)|$ あるいは $|f^{(n+2)}(\xi)|$ は n の増大とともに急激に大きくなることがある.

要するに, 等間隔補間の欠点を受け継いで, n を大きくすれば (高次であれば) よいというものではない.

5.1.3 複合 NC 公式

区間 $[a, b]$ を等分した小区間をつくり, 各小区間で共通な低次の NC 公式を適用する.
複合台形則
$h = (b-a)/n,\ x_j = a + jh\ (j = 0, 1, \ldots, n)$

$$\begin{aligned} S_1^c(f) &= \sum_{i=1}^{n} \frac{h}{2}(f_{i-1} + f_i) = h\left(\frac{1}{2}f_0 + f_1 + f_2 + \cdots + f_{n-1} + \frac{1}{2}f_n\right) \\ &= \frac{h}{2}(f_0 + f_n) + h(f_1 + \cdots + f_{n-1}) \end{aligned}$$

$$E_1^c(f) = -\frac{h^3}{12}\sum_i f''(\xi_i)$$

$f \in C^2(I)$ であれば, 連続函数の性質から

$$\exists\xi; \quad E_1^c = -\frac{(b-a)h^2}{12}f''(\xi) \tag{5.8}$$

複合 Simpson 則
$h = (b-a)/(2n),\ x_j = a + jh\ (j = 0, 1, \ldots, 2n)$

$$\begin{aligned} S_2^c(f) &= \sum_{i=1}^{n} \frac{h}{3}(f_{2i-2} + 4f_{2i-1} + f_{2i}) \\ &= \frac{h}{3}\left(f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \cdots + 2f_{2n-2} + 4f_{2n-1} + f_{2n}\right) \qquad (5.9) \\ &= \frac{h}{3}\left\{(f_0 + f_{2n}) + 2(f_2 + f_4 + \cdots + f_{2n-2}) + 4(f_1 + f_3 + \cdots + f_{2n-1})\right\} \end{aligned}$$

$$E_2^c = -\frac{b-a}{180}h^4 f^{(4)}(\xi) \tag{5.10}$$

5.2　ガウス型積分公式

積分区間 I と, 重み函数 $w(x)$ に付随する直交多項式系 (SOP) $\{\varphi_n(x); n = 0, 1, 2, \ldots\}$ を活用する.

$x_1, \ldots, x_n$: $\varphi_n(x) = 0$ の n 個の実根 $(a < x_1 < \cdots < x_n < b)$

被積分函数 $f(x)$ の, $x_1, \ldots, x_n$ を補間点とする $(n-1)$ 次直交多項式補間は, 1.3.5 節に与えたように

$$p_{n-1}(x) = \sum_{k=0}^{n-1} c_k \varphi_k(x)$$

ただし

$$c_k = \frac{1}{(\varphi_k, \varphi_k)} \sum_{j=0}^{n-1} w_j \varphi_k(x_{j+1}) f(x_{j+1}), \qquad \frac{1}{w_i} = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\left(\varphi_k(x_{j+1})\right)^2}{(\varphi_k, \varphi_k)}$$

これを用いた数値積分公式を, Gauß型積分公式といい, $S_n^*(f)$ と表す. すなわち

$$S_n^*(f) \equiv S(p_{n-1}) = \sum_{k=0}^{n-1} c_k \int_a^b \varphi_k(x) w(x)\,\mathrm{d}x$$

しかし実は $\varphi_k(x)w(x) = \varphi_k(x) \cdot 1 \cdot w(x)$ とみることができ, $\varphi_0(x) \equiv 1$ であるから

$$S_n^*(f) = c_0(\varphi_0, \varphi_0) = \sum_{j=0}^{n-1} w_j f(x_{j+1})$$

という数値積分公式となる.

$1/w_i$ を与えている式において, Christoffel-Darboux 等式 (4.22) の極限 ($x = x_{i+1}$ とおいてから $y \to x_{i+1}$) をとると

$$w_i = \frac{a_n(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1})}{a_{n-1}\varphi_{n-1}(x_{i+1})\varphi_n'(x_{i+1})} \quad (i = 0, 1, 2, \ldots, n-1)$$

すなわち Gauß型積分公式

$$S_n^*(f) = \sum_{j=0}^{n-1} \frac{a_n(\varphi_{n-1}, \varphi_{n-1})}{a_{n-1}\varphi_{n-1}(x_{i+1})\varphi_n'(x_{i+1})} f(x_{i+1})$$

がえられた.

例 Gauß-Legendre 公式
$n = 2$ のとき　$P_2(x) = (1/2)(3x^2 - 1)$ の根 $\pm 1/\sqrt{3}$
$P_2'(x) = 3x$ より

$$S_2^*(f) = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$$

$n=3$ のとき　$P_3(x)=(1/2)x(5x^2-3)$ の根 $0,\pm\sqrt{3/5}$
$P_3'(x)=(1/2)(15x^2-3)$

$$S_3^*(f)=\frac{5}{9}f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right)+\frac{8}{9}f(0)+\frac{5}{9}f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right)$$

その他 Gauß-Laguerre, Gauß-Hermite などの公式がえられる.

Gauß型積分公式の**誤差**
$f\in C^{2n}(I)$ ならば

$$E_n^*(f)\equiv S(f)-S_n^*(f)=\frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\int_a^b\{\varphi_n(x)\}^2w(x)\,\mathrm{d}x\quad(a<\xi<b)$$

ゆえに, $S_n^*(f)$ は $(2n-1)$ 次である.

Gauß型積分公式の**特徴**

(i) (NC 公式と比べると) 高次

(ii) node の座標値が有理数にならない

(iii) 次数を大きくしようとすると, node 値を求めるのが難しくなる

そこで NC 公式のときのように, 複合公式が考えられる.

研究課題 5.1 次の研究課題を実行し，できたらレポートにして提出せよ.

[**1**] 定積分 $I=\displaystyle\int_1^3\frac{\mathrm{d}x}{x}$ を求める.

1. 原始函数を求めるやりかたで，I の解析的表示（対数を含むであろう）を求め，次いでその数値をコンピュータで計算して近似値 I_0 を決めよ．対数の近似値の精度に注意せよ.
2. 複合台形則を適用して近似値を求めよ．ただし，複合台形則の小区間の個数は $2,2^1,2^2,\ldots,2^8$ と増やし，I_0 への接近の様子を考察せよ.
3. 複合 Simpson 則を適用して近似値を求めよ．やはり小区間の個数を上のように増やし，I_0 への接近の様子を考察せよ.
4. ２点 Gauß-Legendre 公式の複合版を考える．すなわち積分区間 $[a,b]$ を n 等分した小区間 $[x_{i-1},x_i]$ $(x_j=a+jh,\ h=(b-a)/n)$ のおのおので２点 Gauß-Legendre 公式を適用し
$$\int_{x_{i-1}}^{x_i}f(x)\,\mathrm{d}x\approx\frac{h}{2}\left(f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}-\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{h}{2}\right)+f\left(\frac{x_{i-1}+x_i}{2}+\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{h}{2}\right)\right)$$
が考えられるので，これを $i=1,2,\ldots,n$ について行って，その和を近似値とする．やはり n を増やしながら，上のような考察を行え.

[**2**] 定積分 $\displaystyle\int_{-4}^4\frac{\mathrm{d}x}{1+x^2}$ に対しても，前問と同じことを行え.

5.3 Romberg 積分法

複合 NC 公式でえられた近似値を, 少ない手間で, より精密にする方法.

複合台形則 $S_1^c(f)$ の誤差のより精密な評価

定理 5.2 $f \in C^{2m}(I)$ であれば, 次の漸近展開 (asymptotic expansion) が成り立つ.

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x &= h\left\{\frac{1}{2}f(a) + \sum_{k=1}^{n-1} f(a+kh) + \frac{1}{2}f(b)\right\} \\ &\qquad - \sum_{r=1}^{m} \frac{h^{2r}B_{2r}}{(2r)!}\left\{f^{(2r-1)}(b) - f^{(2r-1)}(a)\right\} + R_m \qquad (5.11) \\ R_m &= \frac{h^{2m+1}}{(2m)!}\int_0^1 B_{2m}(t)\left\{\sum_{k=0}^{n-1} f^{(2m)}(a+kh+th)\right\}\mathrm{d}t\end{aligned}$$

∎

ただしこの定理に現れる定数 B_{2r} や $B_{2m}(t)$ は, ベルヌーイ数, ベルヌーイ多項式と呼ばれるもので, 次のように導出される.

函数 $s\mathrm{e}^{ts}/(\mathrm{e}^s - 1)$ を $|s| < 2\pi$ で Taylor 展開し

$$\frac{s\mathrm{e}^{ts}}{\mathrm{e}^s - 1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n(t)}{n!}s^n$$

$B_n(t)$: n 次ベルヌーイ多項式 Bernouille polynomial

そのとき $B_n \equiv B_n(0)$

具体的には

$$B_0 = 1,\ B_1 = -\frac{1}{2},\ B_2 = \frac{1}{6},\ B_3 = 0,\ B_4 = -\frac{1}{30},\ B_5 = 0,\ B_6 = \frac{1}{42}, \ldots$$

定理 5.2 によって, 複合台形則の誤差は

$$\begin{aligned}E_1^c(f) &= S(f) - S_1^c(f) \\ &= \frac{h^2}{4}\left\{f'(b) - f'(a)\right\} + \frac{h^4}{720}\left\{f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right\} - \frac{h^6}{30240}\left\{f^{(5)}(b) - f^{(5)}(a)\right\} + \cdots\end{aligned}$$

右辺は f と h のみによっていることに注意.

f を固定

H : $b-a$ をある自然数 N で等分割したステップ幅

$T(H)$: H による複合台形則の計算値

$$T(H) = H\left\{\frac{1}{2}f(a) + \sum_{k=1}^{N-1} f(a+kH) + \frac{1}{2}f(b)\right\}$$

$H/2$ (つまり $2N$ 個のステップ点) による複合台形則の計算値 $T(H/2)$

$$T\left(\frac{H}{2}\right) = \frac{H}{2}\left\{\frac{1}{2}f(a) + \sum_{k=1}^{2N-1} f\left(a + k\frac{H}{2}\right) + \frac{1}{2}f(b)\right\}$$

(共通の函数値計算があることに注意)

　I : 真の積分値

$$\begin{aligned} T(H) &= I - \frac{H^2}{4}\left\{f'(b) - f'(a)\right\} - \frac{H^4}{720}\left\{f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right\} + \cdots \\ T\left(\frac{H}{2}\right) &= I - \frac{H^2}{16}\left\{f'(b) - f'(a)\right\} - \frac{H^4}{11520}\left\{f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right\} + \cdots \end{aligned}$$

したがって

$$4T\left(\frac{H}{2}\right) - T(H) = 3I + \frac{3H^4}{2880}\left\{f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right\} - \frac{H^6}{32256}\left\{f^{(5)}(b) - f^{(5)}8a)\right\} + \cdots$$

つまり

$$\frac{1}{3}\left\{4T\left(\frac{H}{2}\right) - T(H)\right\} = I + \frac{H^4}{2880}\left\{f^{(3)}(b) - f^{(3)}(a)\right\} - \frac{H^6}{96768}\left\{f^{(5)}(b) - f^{(5)}8a)\right\} + \cdots$$

これは, あたらしい積分公式

$$\frac{1}{3}\left\{4T\left(\frac{H}{2}\right) - T(H)\right\}$$

は 3 次であることを意味し, $T(H), T(H/2)$ より良い近似値.

$$T(H),\ T\left(\frac{H}{2}\right),\ T\left(\frac{H}{4}\right),\ T\left(\frac{H}{8}\right), \ldots$$

を

$$T_0^{(0)},\ T_0^{(1)},\ T_0^{(2)},\ T_0^{(3)},\ \ldots$$

と記し, これより

$$T_m^{(k)} = \frac{2^m T_{m-1}^{(k+1)} - T_m^{(k)}}{2^m - 1} \qquad k = 0, 1, 2, \ldots;\ m = 1, 2, 3, \ldots \tag{5.12}$$

として, より精密な近似値の列

$$T_0^{(0)},\ T_1^{(0)},\ T_2^{(0)},\ T_3^{(0)}, \ldots$$

をうる方法を, Romberg 積分法という (W. Romberg).

　数値解析における補外 (extrapolation) の考え方.

5.4　さらに進んだ方法

変数変換型数値積分法

$$S(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$$

$f(x)$ が a, b で "特異性" をもつとき，$a = -\infty$ and/or $b = \infty$ のとき特に有効.

積分変数の変換 $x = \phi(t)$: $a = \phi(-\infty)$, $b = \phi(\infty)$

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} f(\phi(t))\phi'(t)\,\mathrm{d}t$$

右辺の積分を，幅 h の複合台形則で近似する.

$$\hat{S}_h = h \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\phi(nh))\phi'(nh)$$

無限和は実際には有限和で近似する．その近似が有効なように $|f(\phi(nh))\phi'(nh)|$ は n が大きくなると急速に小さくなるように，$\phi(t)$ を選択する.

その典型が，$r = (b-a)/2$, $c = (a+b)/2$ として

$$\phi(t) = r\tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right) + c, \quad \phi'(t) = \frac{r\pi\cosh t}{2\cosh^2(\frac{\pi}{2}\sinh t)}$$

二重指数函数 (double exponential) 型数値積分公式