

10 数値積分法の基礎

微分積分を学ぶと身にしみて感じるが、式で書いてある関数は余程のことが無い限り解析的に微分できる(微分した結果を式で表せる)が、積分のほうはごく限られた形のものしか解析的に積分できない(積分した結果を式で表せない)。従って、定積分の数値計算法である「数値積分法」が実際上重要となるのである。本当に大変なのは多重積分の数値計算であるが、本章では一変数関数の定積分

$$I = \int_a^b f(x)dx \quad (10.1)$$

について説明する。

10.1 数値積分法

10.1.1 区分求積法

区分求積法は、数値積分法としては4.3.1節で見た通りほとんど役に立たない(精度が悪い)が、数値積分法の考え方や他の方法の優位性の理解には役立つので、簡単に説明する。

区分求積法では、 $x = a$ と $x = b$ を n 等分して、各ブロックを長方形とみなして面積の近似計算を行う。均等に n 等分した場合、横幅 h は $(b - a)/n$ であり、長方形の縦の長さは、 x の大きい方の辺の長さを探れば順に、

$$f(a + h), f(a + 2h), f(a + 3h), \dots, f(a + nh)$$

となり、積分 I は、

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \{f(a + h) + f(a + 2h) + f(a + 3h) + \dots + f(a + nh)\}h \quad (10.2)$$

で与えられる。

積分の定義(考え方)から、 n が大きいほど、つまり h が小さいほど良い近似になると期待されるが、実際には n が大きくなり計算誤差の積み重ねから精度が向上しないのは4.3.1節で見た通りである。

10.1.2 台形法

定積分という面積計算を、区分求積法では長方形の集まりとして計算したのに対して、台形法では台形の集まりとして計算する。従って、刻みの両端を結ぶ関数を直線近似することになる。均等に n 等分した場合、横幅(台形の高さ) h は $(b - a)/n$ である。各台形の面積は

$$\underbrace{\frac{(f(a) + f(a + h))h}{2}, \frac{(f(a + h) + f(a + 2h))h}{2}, \dots, \frac{(f(a + (n - 1)h) + f(a + nh))h}{2}}_{n \text{ 個}} \quad (10.3)$$

で与えられるので、 n 個ある台形全てを集めると台形法における積分公式

$$S = \frac{h}{2} [f(a) + 2f(a + h) + 2f(a + 2h) + \dots + 2f(a + (n - 1)h) + f(a + nh)] \quad (10.4)$$

を得る。

台形法の誤差

n 個ある台形のうち、一番始めの台形について考える。台形法による積分値は

$$S = \frac{h}{2}(f(a) + f(a+h)) \quad (10.5)$$

与えられるが、第二項を $x = a$ のまわりの Taylor 展開で置き換えると

$$\begin{aligned} S &= \frac{h}{2}(f(a) + f(a+h)) = \frac{h}{2} \left[f(a) + f(a) + hf'(a) + \frac{h^2}{2}f''(a) + \mathcal{O}(h^3) \right] \\ &= hf(a) + \frac{1}{2}h^2f'(a) + \frac{1}{4}h^3f''(a) + \mathcal{O}(h^4) \end{aligned} \quad (10.6)$$

となる。

$f(x)$ の不定積分を $F(x)$ とおく ($f(x) = F'(x)$) と、真の積分値は

$$I = \int_a^{a+h} f(x) dx = F(a+h) - F(a) \quad (10.7)$$

与えられるが、第一項を $x = a$ のまわりの Taylor 展開で置き換えると

$$\begin{aligned} I &= F(a+h) - F(a) = hF'(a) + \frac{1}{2}h^2F''(a) + \frac{1}{6}h^3F'''(a) + \mathcal{O}(h^4) \\ &= hf(a) + \frac{1}{2}h^2f'(a) + \frac{1}{6}h^3f''(a) + \mathcal{O}(h^4) \end{aligned} \quad (10.8)$$

となる。

S に対する式と I に対する式を比較すると、 h の 2 次までは一致しており、3 次の項に

$$S - I \approx \frac{1}{4}h^3f''(a) - \frac{1}{6}h^3f''(a) = \frac{1}{12}h^3f''(a) \quad (10.9)$$

の差 (誤差) がある。

$n = (b-a)/h$ 個の台形全てを考慮すると、誤差は (最大)

$$\frac{1}{12}h^3f'' \times \frac{(b-a)}{h} = \frac{1}{12}h^2(b-a)f'' \quad (10.10)$$

と評価される。ただし、 f'' は $[a, b]$ 間での f の 2 階微分の最大値である。

台形法の判定法

式 (10.10) から、刻み数 n を倍、すなわち h を半分にすると、台形法の誤差は約 $1/4$ になる。この事実は、素性のよく分からない関数 $f(x)$ を相手にしているときや、計算上の丸め誤差の誤差の大きさの検討がつけ難いときに、

台形法が台形法らしく働いているか

を判定するのに役立つ。

実際には、 $I_n - I_{n/2}$ を計算して、 n を倍にした時に約 $1/4$ になっている事を確認する。ここでも、「一回の計算で満足せず、計算を複数回行い、計算の信頼性を確認する」という態度が有効である。

10.1.3 Simpson 法

式 (10.10) から、 $n = (b - a)/h$ に対して

$$\begin{aligned} S_n - I &\approx \frac{1}{12}h^2(b-a)f'' \\ S_{n/2} - I &\approx \frac{1}{12}(2h)^2(b-a)f'' \end{aligned} \quad (10.11)$$

であるので、

$$S_n - \frac{S_{n/2}}{4} \approx 0 \quad (\text{正確には } \mathcal{O}(h^4)) \quad (10.12)$$

となる事が分かる。このことを用いると、

$$S_n^{(1)} = \frac{I_n - I_{n/2}/4}{1 - 1/4} \quad (10.13)$$

とする事により、高精度な (誤差が $\mathcal{O}(h^4)$ の) 公式を作る事ができる¹。

式 10.13 を具体的に考えると、和をとる際、 i が奇数のものは係数が 4、偶数のものは係数が 2 になるので、

$$\begin{aligned} S_n^{(1)} &= \frac{h}{3} [f(a) + f(a + nh) + 4\{f(a + h) + f(a + 3h) + \cdots + f(a + (n - 1)h)\} \\ &\quad + 2\{f(a + 2h) + f(a + 4h) + \cdots + f(a + (n - 2)h)\}] \\ &= \frac{h}{3} \left[f(a) + f(a + nh) + 4 \sum_{i=1}^{n/2} f(a + (2i - 1)h) + 2 \sum_{i=1}^{n/2-1} f(a + 2ih) \right] \end{aligned} \quad (10.14)$$

という、Simpson 法による積分公式を得る。

証明は省略するが、台形法が関数を 2 点を通る直線で近似して面積を求めたのに対して、Simpson 法は 3 点を通る 2 次曲線で近似して面積を求めた事に対応している (興味のあるものは、証明するなり、調べるなりして欲しい)。

Simpson 法の誤差と判定法

台形法の誤差が $\mathcal{O}(h^2)$ であるのに対して、Simpson 法の場合はその導出過程から明らかなように $\mathcal{O}(h^4)$ である。

従って、“Simpson 法が Simpson 法らしく働いているか”を確認するには、台形法の場合と同じことを考えると、 $S_n^{(1)} - S_{n/2}^{(1)}$ を計算して、 n を倍にした時に約 $1/16$ になっている事を確認すればよい (刻み数 n を倍、すなわち h を半分にすると、Simpson 法の誤差は約 $1/16$ になるため)。

練習

積分

$$I = \int_0^1 e^x dx = e - 1 = 1.7182818\dots \quad (10.15)$$

を、台形法、Simpson 法により数値積分を行え。刻み数 n を変えて計算し、収束の度合や、各方法が正常に機能しているか確認せよ。

¹このやり方を一般化したものを、Richardson 補外という。

サンプルプログラム

サンプルプログラムは以下の通り。プログラムは、

```
/home/teacher/z6wt01in/SAMPLE/integral.f
```

として置いてある。

```

program integral_comp
  implicit none
c local
  integer    m,n                ! 刻み数 n=2**m
  real       h,integral        ! 刻み幅 h, 数値積分の中間変数
  real       trapezoid,simpson ! 台形法と Simpson 法の解
  real       x                 ! 積分変数
  real       exact             ! 解析解
  integer    i                 ! ループ用変数
c function:
  real       y                 ! 被積分関数
c begin:
  exact = exp(1.0)-1
  do m=0,6
    n=2**m                ! 刻み数
    h=1.0/n              ! 刻み幅
c 台形法
    integral=y(0.0)+y(1.0) ! 積分端での値
    do i=1,n-1
      x = h*i
      integral=integral+2.0*y(x)
    end do
    trapezoid=integral*h/2.0 ! 台形法の解
c Simpson 法
    integral=y(0.0)+y(1.0) ! 積分端での値
    do i=1,n/2
      x = h*(2*i-1)
      integral=integral+4.0*y(x)
    end do
    do i=1,n/2-1
      x = h*(2*i)
      integral=integral+2.0*y(x)
    end do
    simpson=integral*h/3.0 ! Simpson 法の解
c 数値積分の結果と解析解の差の出力
    write(*,'(I3,F8.5,4F12.7)') n,h,

```

```

&      trapezoid, trapezoid-exact,
&      simpson, simpson-exact
end do
stop
end

c
c 被積分関数の定義
c
  real function y(x)
  implicit none
c input:
  real x
c begin:
  y = exp(x)
  return
end

```

練習

解析解が求まる適当な被積分関数に対して、台形法、Simpson 法により数値積分を行え。刻み数 n を変えて計算し、収束の度合や、各方法が正常に機能しているか確認せよ。

10.2 不連続点がある場合の数値積分法

物理学に現われる被積分関数には、発散点や不連続点がある場合がある。発散点があることが物理的に本質的である場合も、その積分は有限な物理的に意味のある値となることがあり、そのような関数の数値積分をどのように精度良く行うかは重要である。

一般に、 $f(x)$ 自身の不連続点はもちろん、その高階の導関数が不連続になる点が予め知られている場合には、その点を c として、積分区間を

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^c f(x)dx + \int_c^b f(x)dx \quad (10.16)$$

と分割すると良い。

表 10.1 に、

$$f(x) = \begin{cases} 1 & 0 \leq x \leq \frac{1}{3} \\ 1 - \frac{9}{4} \left(x - \frac{1}{3}\right)^2 & \frac{1}{3} \leq x \leq 1 \end{cases} \quad (10.17)$$

に対する積分、

$$I = \int_0^1 f(x)dx = \frac{7}{9} \quad (10.18)$$

を、台形法及び Simpson 法により計算した結果を示す。この関数は、 $x = 1/3$ で 2 階導関数が不連続である。そこで $c = 1/3$ として積分区間を分割して数値積分した結果も併せて示した。

積分区間を分割しない場合、台形法では、 n が倍になると $S_n - I$ はほぼ $1/4$ になっているが、Simpson 法では、 n が倍になっても $S_n^{(1)} - I$ は $1/16$ からはほど遠い不規則な振舞をしている。これ

表 10.1: 不連続関数を、台形法と Simpson 法で数値積分した結果の、分割の有無に対する依存性。

n	台形法: $S_n - I$		Simpson 法: $S_n^{(1)} - I$	
	分割なし	分割あり	分割なし	分割あり
2	-0.0590278	-0.1111111	0.0138889	-0.3333333
4	-0.0160590	-0.0277777	-0.0017361	0.0000000
8	-0.0038520	-0.0069444	0.0002170	0.0000000
16	-0.0009834	-0.0017362	-0.0000271	0.0000000
32	-0.0002433	-0.0004340	0.0000034	0.0000000

に対して積分区間を分割した場合は、台形法では素直な振舞いをしているのはもちろん、Simpson 法では $n = 4$ で正確な値を出している。

このことから、被積分関数に不連続点がある場合、積分区間を不連続点で分割することが、数値積分において有効であることが分かる。