数値計算の基礎

2008 年 10 月 19 日

1　第 1 章　数値積分

この章では数値計算の基本的な問題である、数値積分について述べる。数値積分には大まかに二つほど有名な公式がある。それは、台形則とその改良である Richardson 補外法である。

1.1　台形則

台形則とは、積分を次のように近似する方法である。

$$\int_a^b f(x)dx = h[\frac{1}{2}\{f(a)+f(b)\} + \sum_{n=1}^{N-1} f(a+nh)] \qquad (\text{但し、}h = \frac{b-a}{N})$$

導出は非常に簡単であり、被積分領域を N 分割し、それぞれの領域を台形とみなして足し合わせる。被積分関数が解析的な関数のときは、誤差に関して次のような式が成り立つ。

$$I_N - I = c_2h^2[f'(b)-f'(a)] + c_4h^4[f'''(b)-f'''(a)] + \ldots + c_{2p}[f^{(2p-1)}(b)-f^{(2p-1)}(a)] + O(h^{2p+2})$$

これも Taylor 展開を使えば簡単に示せる。これから、次のことがわかる。

$$\Delta I_N \approx \frac{c}{N^2}$$

これは記憶に値することである。特に、台形公式が正常に機能しているかどうかを調べる際にこの性質は使える。さて、それでは実際にプログラムを組んで計算してみよう。

練習問題 1.1.1

台形公式を用いて実際に関数 f(x)、積分区間 $[a,b]$ 分割数 N が与えられたときに積分を計算するプログラムを作成せよ。

練習問題 1.1.2

練習問題 1.1.1 で作成したプログラムを用いて計算を行う。被積分関数としては

$$f(x) = \frac{6}{\sqrt{1-x^2}}$$

を採用し、積分区間を $[0, \frac{1}{2}]$ とする。勿論厳密解は π である。これを $N = 16, 64, 128, 256, 512$ に渡って計算せよ。更に、$\frac{I_{N/4}-I_{N/2}}{I_{N/2}-I_N}$ を計算せよ。

さて、練習問題 1.1.2 の計算結果によれば、$\frac{I_{N/4}-I_{N/2}}{I_{N/2}-I_N} \approx 4$ となっていたはずである。[*1] これは、$I_N - I \approx \frac{c}{N^2}$ という台形公式の性質から導ける公式であり、これが成り立っているかどうかを調べることでプログラムのチェックや、被積分関数が台形公式を適応上で適切な性質を持っているかどうかの確認が可能となる。

さて、上の性質を考えると、$I_{N/2} - I_N \approx \frac{3c}{N^2} \approx 3(I_N - I)$ すなわち、$I \approx I_N + (I_N - I_{N/2})/3$ という改良が出来そうではないだろうか？この発想を元に行われた改良が次の Richardson 補外である。

[*1] もし成り立っていなければプログラムがおかしい。

1.2 Richardson 補外法

近似式、

$$I_N - I = c_2h^2[f'(b) - f'(a)] + c_4h^4[f'''(b) - f'''(a)] + \ldots + c_{2p}[f^{(2p-1)}(b) - f^{(2p-1)}(a)] + O(h^{2p+2})$$

を眺めていると、

$$I_N^{(1)} = \frac{I_N - I_{N/2}/4}{1 - 1/4}$$

は、

$$I_N^{(1)} - I = c_4^{(1)}h^4[f'''(b) - f'''(a)] + \ldots + O(h^{2p+2})$$

という誤差評価式を持つことがわかる。この調子で、$k = 2, 3, \ldots$ に対して

$$I_N^{(k)} = \frac{I_N^{(k-1)} - I_{N/2}^{(k-1)}/4}{1 - 1/4^k}$$

としていけばいくらでも高精度な近似式が導出できる。では、早速練習してみよう。ちなみに、Richardson 補外第一次近似はかの有名な **Simpson 則**と一致する。[*2]

練習問題 1.2.1

Richardson 補外の第一次近似を用いて、実際に関数 f(x) と積分区間 $[a, b]$、切断数 N が与えられたときに積分値を与えるプログラムを作成せよ。

練習問題 1.2.2

練習問題 1.2.1 で作成したプログラムを用いて、$f(x) = \frac{6}{\sqrt{1-x^2}}$ を区間 $[0, \frac{1}{2}]$、$N = 16, 64, 128, 256, 512$ で積分せよ。そして、厳密解 $\pi = 3.1415926535$ との誤差をプロットし、誤差が減少していく様子を確認せよ。また、練習問題 1.1.2 での結果を用いて台形公式と Richardson 補外後の結果とで、近似精度が向上していることを確かめよ。

練習問題 1.2.3

4 ページに乗っているグラフ 1 は、積分の相対誤差と切断数の関係を調べたグラフである。見てわかるとおり、途中までは減少し精度が増している。しかし、途中からは一転して増加しているのに気づくであろう。これは、N を増やせば打切り誤差は減少するが、丸め誤差[*3]や積み残し[*4]が増加するためである。よって、切断数をむやみに大きくすることは良くなく、打切り誤差と丸め誤差、積み残しが釣り合った最適な切断数を設定

[*2] Simpson 則とは、積分を次式で近似する方法である。

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}[f(a) + f(b) + \sum_{n=1}^{N/2-1} f(a + 2nh) + \sum_{n=1}^{N/2}]f(a + (2n-1)h)]$$

この式は曲線を分割された区間を局所的に放物線とみなして積分し、和をとることで導出される。

[*3] 後述する。簡単に言えば、1/3 などは小数点表示すると $0.333\ldots$ となるが、コンピュータは有限しか扱えないため 0.33333 等のように打ち切って扱うことになる。この誤差を丸め誤差という。

[*4] 後述するが、簡単に説明するために例を挙げよう。有効数字 2 桁では 100+0.1 では 0.1 は結果に反映されない。このように、刻み幅を小さくすることで計算結果に反映されない項が増え、誤差が増すことがある。これを積み残しという。

する必要がある。そこで、大体どれぐらいが最適な切断数かを感覚的に養わなければならないだろう。そのために、次の関数を切断数 N をいろいろ変えて積分し、どのくらいの切断数が適当か調べてみよ。

$$(1)\int_1^2 \frac{dx}{x}, (2)\int_0^1 4x^3 dx, (3)\int_0^\pi \sin x dx$$

1.3　無限区間の積分法

次に無限遠まで積分する場合への対処法を考えよう。対処法としては二つ考えられる。

・1・変数変換で有限区間に直す

一番簡単なのは、変数変換をすることである。例えば、無限区間 $[0,\infty]$ の積分

$$I = \int_0^\infty \frac{2dx}{1+x^2}$$

に対しては、$t=\frac{1}{1+x}$ という変数変換を施せば、

$$I = \int_0^1 \frac{2dt}{2t^2-2t+1}$$

となって有限区間の積分に帰着される。これはお手軽で簡単である。

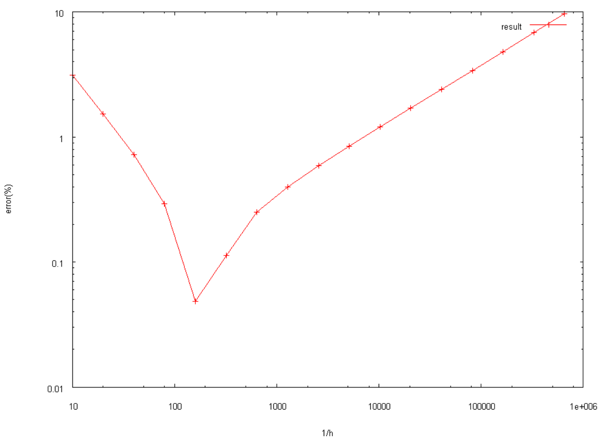
・2・まともにプログラム化する

まともにプログラム化する場合は、無限区間の場合切断数を指定するわけには行かないので、刻み幅 h を指定することになる。そして、積分終了条件は次のようになるであろう。

極少数の値 ϵ を与えておいて、$f((n+1)h), f((n+2)h), f((n+3)h)$ が連続で今までの和 S_n の ϵ 倍より小さくなったら停止する。すなわち、

$$max\{f((n+1)h), f((n+2)h), f((n+3)h)\} < \epsilon S_n$$

とすればよい。ちなみに、$\epsilon = 10^{-7}$ として、刻み幅 h を変えながら上の積分を行った様子を表すグラフがグラフ 1 である。縦軸は厳密解との相対誤差を % 表示で表している。このグラフによれば、h を小さくしていくと誤差はある点まではどんどん小さくなるが、ある点を境にだんだん大きくなっていく。これは、h を小さくすることで打切り誤差は減少するが、代わりに丸め誤差や積み残しなどの誤差が累積していく影響が大きくなってきたことを表している。



グラフ 1

練習問題 1.3.1

半無限区間 $[a, \infty]$ の積分

$$I = \int_a^\infty f(x)dx$$

を行うプログラムを実際に作成せよ。

練習問題 1.3.2

次の関数を、刻み幅を変えて実際に積分し、大体どれくらいの刻み幅が適当であるかを調べてみよ。

$$(1) \int_0^\infty \frac{2dx}{1+x^2}, (2) \int_1^\infty \frac{dx}{x^2}, (3) \int_0^\infty e^{-x^2}dx$$

1.4　特異点の除去〜変数変換〜

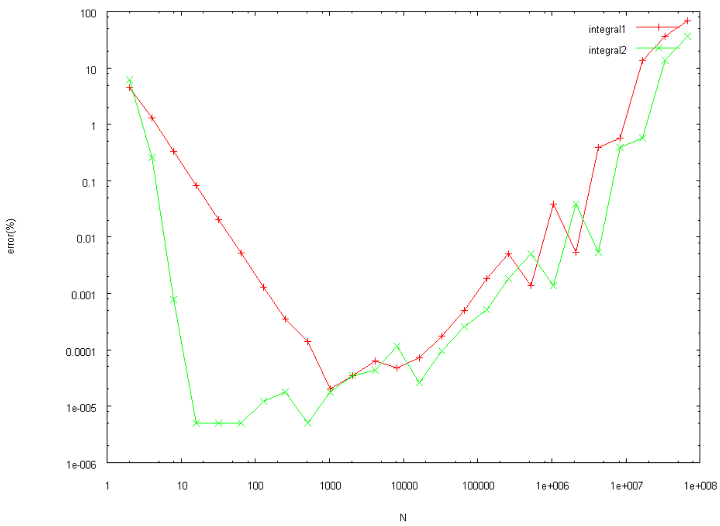
ここまでのところで数値積分の基礎的な事柄はマスターしたものと思われるが、実際に適応するに当たってのテクニック的なことを述べようと思う。今、三つの関数を用意する。

$$I_1 = \int_{-1}^1 \frac{2}{1+x^2}dx$$

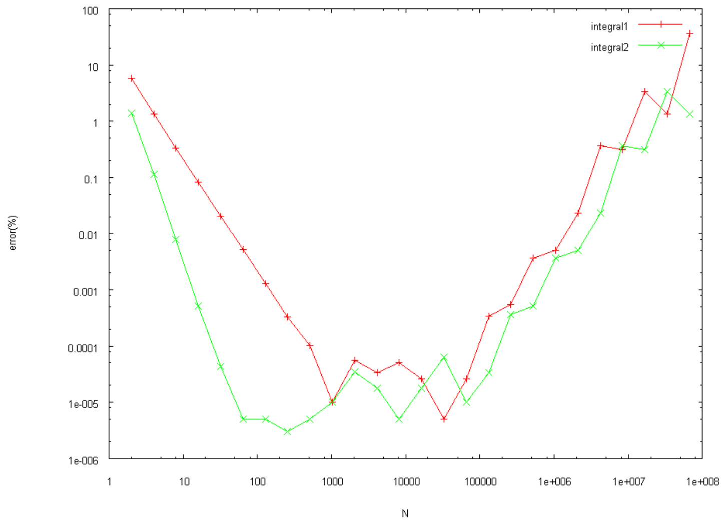
$$I_2 = \int_0^1 8x^2\sqrt{2-x^2}dx$$

$$I_3 = \int_0^1 4\sqrt{1-x^2}dx$$

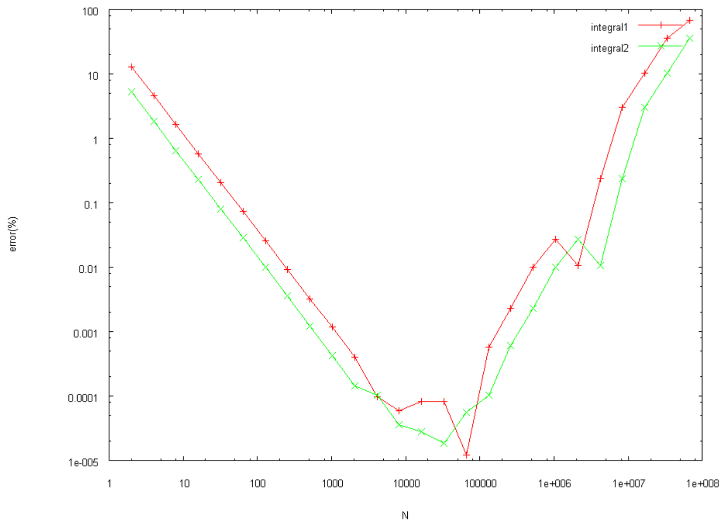
いずれも厳密解は π である。では、具体的に積分を台形公式、Richardson 補外第一次近似で行った結果を、横軸を端数 N、縦軸に相対誤差を % で表示したグラフにしてみよう。それぞれグラフ 2,3,4 である。見てわかるとおり、数学的には等価でも、Richardson 補外による誤差の減少の仕方に明らかな差が見受けられるのがわかるであろう。この計算結果では近似精度は $I_1 > I_2 >> I_3$ の順である。特に、I_3 は非常に悪い。では、この差は何から生まれるのであろうか？ (integral1 は台形公式、integral2 は Richardson 補外適応。)



グラフ 2



グラフ 3



グラフ 4

それは、**端点特異性**にある。I_3 では、**被積分関数の 1 階以上の微分が端点で ∞ になっている。**積分の誤差式の形を思い出してみると、微分係数が無限大になることは近似精度を悪くする事は理解できるであろう。では、このような場合どうすればよいだろうか？それは、**変数変換で特異性を除去してやればよいのだ。**実際、I_3 の被積分関数の端点特異性を変数変換で除去したものが I_2 である。[*5]

では、I_1 の特別近似の精度が良いのは何故だろうか？それは、被積分関数の三階微分係数が端点で 0 となる性質を持っているので、誤差の主要項がたまたま消える性質を持つからである。I_1 のような最良の積分を常に行うことは難しいとしても、端点特異性に注意を払い、式変形で特異性を取り除くくらいは心がけるべきである。

[*5] I_3 を $1-x=t^2$ と変数変換してみると I_2 が得られる。

万能変数変換 (IMT 変換)

では、常にうまくいく変数変換はあるのであろうか？実は非常に便利な変数変換が存在する。それは IMT 変換と呼ばれるものであり、次のようなものである。

積分の形を $\int_{-1}^{1} f(x)dx$ というものに限る。*6 このとき、

$$x = \tanh\left(\frac{\pi}{2}\sinh t\right), dx = \frac{\frac{\pi}{2}\cosh t}{\cosh^2 \frac{\pi}{2}\sinh t}$$

という変換で、積分区間を $[-\infty, \infty]$ にしてやると、端点特異性は無限遠に飛んで消えてしまう。

練習問題 1.4.1

次の積分に対して、そのまま数値積分する場合と特異点を変数変換で除去した場合について収束の速度差があることを実際に確かめよ。

(1)

練習問題 1.4.2

次の積分に対して、IMT 変換を施して積分せよ。

(1)

1.5 不連続点の扱い

台形公式は滑らかな曲線に適応すべきものである。すなわち、微分係数が存在する区間で成立する。Richardson 補外は更に高階の微分係数の存在が要求される。よって、不連続点の存在が予め知らされている場合はその点で分割して、区間内に不連続点が存在しないようにしておくのが良い。

1.6 周期関数への適応

周期関数にたいしては $f^{(m)}(a) = f^{(m)}(b)$ より、任意の p に対して $I_N - I = O(h^{2p+2})$ が成り立つ。*7 よって、台形則は極めて良い近似精度を示すはずである。実際、

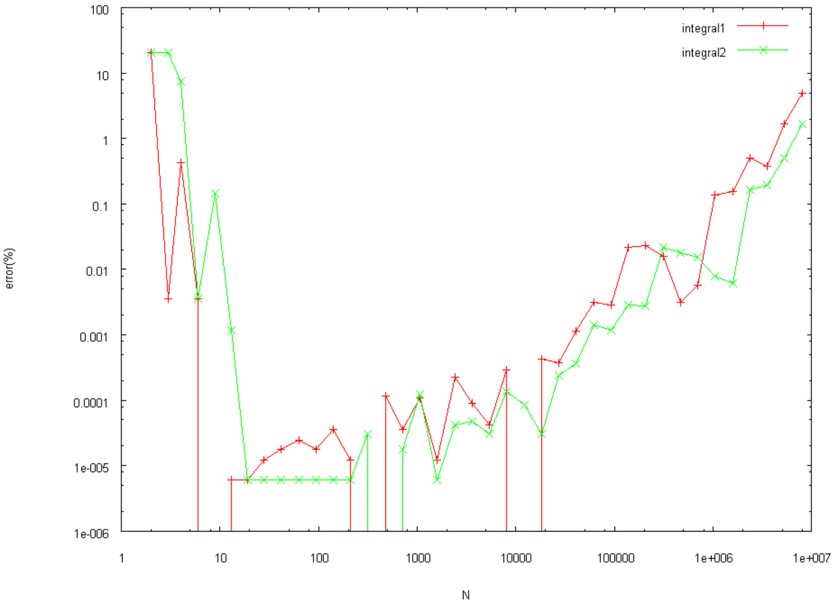
$$\int_0^{2\pi} e^{\sin x} dx$$

はあっという間に収束する。その様子を示したものがグラフ 5 である。(厳密解は 7.954926521 . . . であり、integral1 は台形公式をそのまま適応したもの、integral2 は一次 Richardson 補外を適応したものである。) *8

*6 有限区間の積分は適当なスケール変換を使えばこの形に直すことができる。また、積分区間が無限に及ぶ場合でも、$x = \frac{1+u}{1-x}$ のような変換を施してやれば必ず有限区間の積分に帰着でき、どのような積分もこの形に直すことができる。

*7 但し、当然ながら 0 というわけではない。

*8 ちなみに、台形公式をそのまま適応したものと Richardson 補外を適応したものとで解の精度に差がないのは、どちらも誤差は任意の p に対して $O(h^{2p+2})$ だからである。


integral1
integral2
error(%)
N
100
10
1
0.1
0.01
0.001
0.0001
1e-005
1e-006
1
10
100
1000
10000
100000
1e+006
1e+007

グラフ 5

2　数値微分

それでは、積分に続いて基本的な演算、「微分」を数値的に行うことを考えよう。この章では誤差の理論的な予測も考慮して最適な刻み幅についての考察も行う。

2.1　数値微分１〜定義〜

もっとも単純な微分の仕方とは、定義に乗っかってやる方法であろう。つまり、十分小さい h をとって、

$$f'(a) = \frac{f(a+h) - f(a)}{h} + O(h)$$

としてやるわけである。

練習問題 2.1.1

次の関数を、刻み幅をいろいろ変えて数値的に微分し、理論値との誤差と刻み幅の関係を調べてみよ。

$$\tag{1}$$

2.2　数値微分２〜中心差分〜

簡単に近似の次数を高める方法に、中心差分を取る方法がある。中心差分とは次のような式で微分を近似するものである。

$$f'(a) = \frac{f(a+\frac{h}{2}) - f(a-\frac{h}{2})}{h} + O(h^2)$$

単純だが精度は簡単に上がる。

練習問題 2.2.1

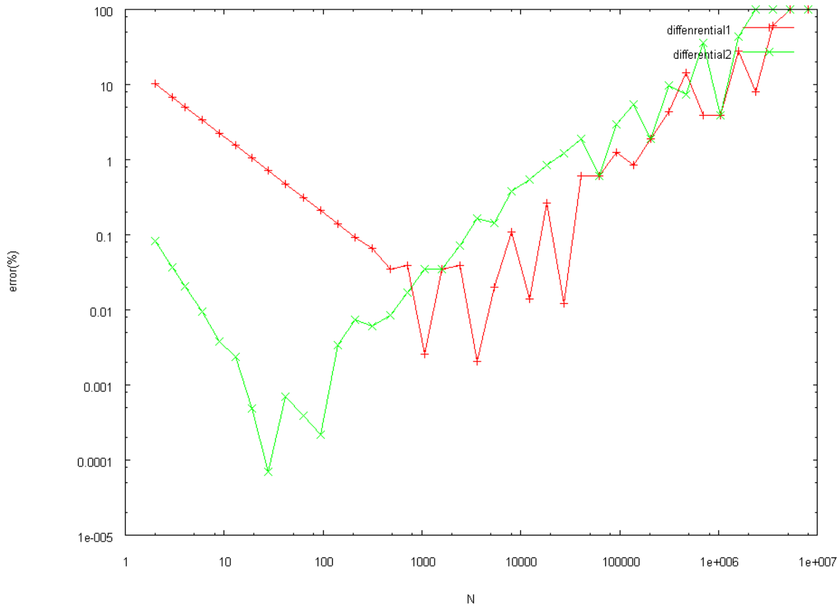
練習問題 2.1.1 で与えられた関数について、中心差分を用いて同じことを行い、中心差分に変えたことで精度が上がっていることを確かめなさい。

2.3　誤差予測〜最適な刻み幅〜

ここでは最適な刻み幅を予測するために誤差評価を行う。誤差評価を行うにあたって、例として次の関数を取り扱う。

$$f(x) = \frac{x^3}{3}$$

これの $x = 10$ における微分係数を上記の二種類の方法で計算し、厳密解 100 との相対誤差を百分率で表示したのが次のグラフ 1 である。



グラフ 1

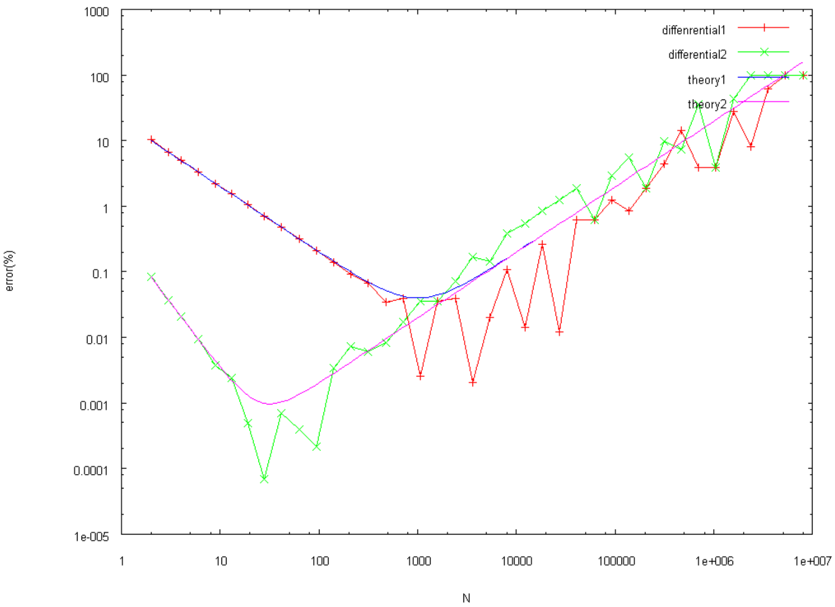
では、理論的には誤差はどうなるのであろうか？誤差にはいくつか種類があるが、微分にかかわる誤差は次の二つである。一つは打切り誤差。打切り誤差とは、Taylor 展開を途中で打ち切って無視した項による誤差のことで、微分の定義に従うと $hf'''(x)/2$ 程度の誤差が生じる。次は丸め誤差であり、無限小数を有限の小数として扱うために行う近似に伴う誤差である。float 型では大体 $f(x)$ の計算に $\delta = f(x) \times 2^{-24}$ くらいの誤差を伴うので、丸め誤差は $2\delta/h$ 程度である。よって、

$$\frac{h|f''(x)|}{2} + \frac{2\delta}{h}$$

程度の誤差となる。また、中心差分では打切り誤差は $h^2 f'''(x)/6$ 程度であり、丸め誤差は δ/h 程度なので、

$$\frac{h^2|f'''(x)|}{6} + \frac{\delta}{h}$$

程度の誤差となるであろう。実際に、その程度の誤差となっていることがグラフ 2 を見ればわかるであろう。この結果から、適当な刻み幅とは誤差を最小にする h、すなわちそれぞれ $h = 2\sqrt{\delta/|f''(x)|}, (3/|f'''(x)|)^{\frac{1}{3}}$ 程度にすればよいことになる。



グラフ 2

練習問題 2.3.1

練習問題 2.1.1 で得られた結果に対して、この節で説明した誤差の理論曲線が妥当な評価を与えているか実際に確かめなさい。

2.4 Richardson **補外**

では、更に精度の高い公式を導出することを考えよう。ここでも数値積分同様に Richardson 補外の考え方が使えて、$f_1(x,h) = (f(x+h) - f(x))/h$ に対して、

$$\frac{f_1(x,h) - (1/2)f_1(x.2h)}{1-(1/2)} \approx O(h^2)$$

となる。また、$f_2(x.h) = (f(x+h) - f(x-h))/2h$ に対しては