

14 数値積分

積分 $\int_a^b f(x) dx$ の値を知りたいければ、 f の原始関数、つまり $F' = f$ となる関数 F を見つけて

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a)$$

と計算することができる、というのが微分積分学の基本定理の使い方だった。しかしながら、例えば以下のような積分に対してはこの方法は通用しない。

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx, \quad \int_0^1 \frac{\sin x}{x} dx, \quad \int_2^3 \frac{dx}{\log x}$$

また、微分積分学の基本定理を使って例えば

$$\int_0^2 \sqrt{x} dx = \left[\frac{2}{3} x \sqrt{x} \right]_0^1 = \frac{4}{3} \sqrt{2}$$

などと計算できるものであっても、実用上はその近似値 1.8856 の方が重要なこともあるし、逆に近似値さえ求められれば十分であることもある。そのように、積分値を数値的に求めることを数値積分という。

14.1 Riemann 和による近似

有界閉区間 $[a, b]$ で積分可能な関数 f の積分値を I

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

とし、その Riemann 和を考える。 $\Delta = (x_0, x_1, \dots, x_n)$ を積分区間 $[a, b]$ の分割とし、各小区間 $[x_{i-1}, x_i]$ から代表点 ξ_i を選ぶ。このとき、Riemann 和

$$S := \sum_{i=1}^n f(\xi_i) (x_i - x_{i-1})$$

を積分値 I の近似値として採用したとき、その精度は次のように見積もれる。

定理 14.1. 上の Riemann 和 S に対し、その分割の大きさを

$$|\Delta| := \max_{1 \leq i \leq n} \{x_i - x_{i-1}\}$$

とする。また、積分区間 $[a, b]$ 上 f' は有界で、 $|f'(x)| \leq K$ が成り立つと仮定する。このとき、上の積分値 I と Riemann 和 S の誤差は以下を満たす。

$$|I - S| \leq (b - a)K|\Delta|$$

特に、分割 Δ が積分区間 $[a, b]$ の n 等分割であるとき、以下が成り立つ。

$$|I - S| \leq \frac{K(b-a)^2}{n}$$

つまり、 n 等分する Riemann 和と積分値 I との誤差は n に反比例して小さくなる。

証明. $f(\xi_i)(x_i - x_{i-1}) = \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(\xi_i) dx$ なので

$$\begin{aligned} |I - S| &= \left| \int_a^b f(x) dx - \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(\xi_i) dx \right| = \left| \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} (f(x) - f(\xi_i)) dx \right| \\ &\leq \sum_{i=1}^n \left| \int_{x_{i-1}}^{x_i} (f(x) - f(\xi_i)) dx \right| \leq \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} |f(x) - f(\xi_i)| dx \end{aligned}$$

である. ここで, $x_{i-1} \leq x \leq x_i$ のとき, 平均値の定理から $f(x) - f(\xi_i) = f'(c)(x - \xi_i)$ となる c が x ごとに存在するから

$$|f(x) - f(\xi_i)| = |f'(c)(x - \xi_i)| \leq K(x_i - x_{i-1}) \leq K|\Delta|$$

となる. これより以下を得る.

$$|I - S| \leq \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} K|\Delta| dx = \sum_{i=1}^n K|\Delta|(x_i - x_{i-1}) = (b - a)K|\Delta|$$

特に, Δ が n 等分割のときは $|\Delta| = (b - a)/n$ なので後半の主張が成り立つ. \square

例 14.2. 積分 $I = \int_0^1 e^{-x^2} dx$ の値を, 積分区間 $[0, 1]$ を n 等分割するときの Riemann 和で近似する.

各小区間 $[x_{i-1}, x_i]$ の代表点には右端の点 x_i を選ぶことにする. このときの Riemann 和 S_n は

$$S_n = \sum_{i=1}^n f(x_i)(x_i - x_{i-1}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n e^{-\left(\frac{i}{n}\right)^2}$$

である. 各 $e^{-\left(\frac{i}{n}\right)^2}$ は e^x の Maclaurin 展開などで近似値を任意の精度で計算できる. 例えば, $n = 100$ の場合の近似値 S_{100} は

$$S_{100} = \frac{1}{100} \sum_{i=1}^{100} e^{-\left(\frac{i}{100}\right)^2} \approx 0.01 \times (0.99990 + 0.99960 + \cdots + 0.36788) = 0.743657$$

と計算できる (コンピュータを使えば一瞬で終わる). また, $0 \leq x \leq 1$ のとき

$$\left| \left(e^{-x^2} \right)' \right| = \left| -2xe^{-x^2} \right| \leq 1$$

なので, S_n と積分値 I の誤差は定理 14.1 から

$$|I - S_n| \leq \frac{1}{n}$$

と見積もれる. 従って, 上で求めた S_{100} と積分値 I の誤差は 0.01 以下である. なお, 厳密には各 $e^{-(i/n)^2}$ にもその近似値を使っているのだからそれらの誤差もあるのだが, それはかなり小さいので無視している. 実際, 小数点以下 8 桁目まで正しい近似値 (を具体的にどう計算したかは触れないが) を挙げておくと,

$$I = \int_0^1 e^{-x^2} dx = 0.74682413 \cdots$$

なので確かに誤差は 0.01 以下には収まっている.

注意. 例 14.2 では、各 $e^{-(i/n)^2}$ の近似値を Maclaurin 展開で計算できるとして軽く流してしまったが、実はそもそもこの積分値 I 自体の近似値を Maclaurin 展開と項別積分によって求めることもできる。

まず、指数関数 e^x の Maclaurin 展開

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \cdots \quad (-\infty < x < \infty)$$

の x に $-x^2$ を代入して被積分関数 e^{-x^2} の Maclaurin 展開が以下のように得られる。

$$e^{-x^2} = 1 - x^2 + \frac{x^4}{2!} - \frac{x^6}{3!} + \frac{x^8}{4!} - \frac{x^{10}}{5!} + \cdots \quad (-\infty < x < \infty)$$

次に、この両辺を閉区間 $[0, 1]$ 上で積分する。特に、右辺のべき級数は項別に積分すればよいので

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx = \int_0^1 dx - \int_0^1 x^2 dx + \int_0^1 \frac{x^4}{2!} dx - \int_0^1 \frac{x^6}{3!} dx + \int_0^1 \frac{x^8}{4!} dx - \int_0^1 \frac{x^{10}}{5!} dx + \cdots$$

が成り立つ。つまり

$$I = 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{10} - \frac{1}{42} + \frac{1}{216} - \frac{1}{1320} + \cdots \quad (14.1)$$

である。こうして積分値 I の級数表示が得られた。初めの 6 項までの和を I の近似値として採用すれば

$$I \approx 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{10} - \frac{1}{42} + \frac{1}{216} - \frac{1}{1320} = \frac{31049}{41580} = 0.746729 \cdots$$

である。ついでに、この近似値と I との誤差の精度も見積もっておこう。

上の近似値と I との誤差は、 I の級数表示 (14.1) の第 7 項以降の和（つまり $+\cdots$ の部分）に等しいので

$$I - \frac{31049}{41580} = \int_0^1 \frac{x^{12}}{6!} dx - \int_0^1 \frac{x^{14}}{7!} dx + \cdots = \frac{1}{9360} - \frac{1}{75600} + \cdots$$

である。特に、これは級数の第 7 項（級数表示 (14.1) の $+\cdots$ の初めの項）にかなり近いので、誤差を

$$I - \frac{31049}{41580} \approx \frac{1}{9360} = 0.0001068 \cdots$$

と見積もれる。つまり、この場合の誤差は級数の第 7 項に近い。さらに、積分値 I は級数の 6 項目までの和より大きく、7 項目までの和よりも小さいので

$$\frac{31049}{41580} < I < \frac{32049}{41580} + \frac{1}{9360} = \frac{1614779}{2162160}$$

が成り立つ。従って、

$$0.7467 < I < 0.7469$$

なので、 I の小数点以下 3 桁目までが 0.746 と確定する。誤差評価に関しては「誤差は XX 未満である」という情報が得られるのが理想的ではあるが、このように「小数点以下 XX 桁目まで一致する近似値である」という情報もなかなか実用的である。

14.2 Simpson の公式

積分値を積分区間の等分割の Riemann 和で近似する場合, 例えば誤差を 10^{-5} 程度に抑えたければ 10^5 個程度の和を計算する必要がある, あまり効率が良くない. そこで, もっと効率よく高精度の近似値を計算できる Simpson の公式を紹介する. 引き続き, 以下の積分値 I の近似値を知るための方法を考えていく.

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

Riemann 和は各小区間 $[x_{i-1}, x_i]$ における f の積分値を長方形の面積で

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx \approx f(\xi_i)(x_i - x_{i-1})$$

と近似する. つまり, f を各小区間 $[x_{i-1}, x_i]$ で定数関数 $y = f(\xi_i)$ によって近似しているが, これを 2 次関数で近似した方がより良い精度が得らるだろうというのが Simpson の公式の基本的なアイデアである. そこで, 2 次関数の積分に関する公式を作っておく.

定理 14.3. 3 次以下の多項式 $p(x)$ と実数 $a, b, m = (a + b)/2$ に対して以下が成り立つ.

$$\int_a^b p(x) dx = \frac{b-a}{6} (p(a) + 4p(m) + p(b))$$

証明. $p(x) = c_3x^3 + \dots$ とおいて直接計算すれば確認できるが, 少しだけ効率化する. $h = (b - a)/2$ とおき, $u = x - m$ と変数変換すれば, 示したい等式は

$$\int_{-h}^h p(u + m) du = \frac{h}{3} (p(m - h) + 4p(m) + p(m + h))$$

と変形される. 従って, 3 次多項式 $q(u) = p(u + m)$ に対して

$$\int_{-h}^h q(u) du = \frac{h}{3} (q(-h) + 4q(0) + q(h))$$

が成り立つことを示せばよいが, 積分の線形性から, $q(u) = u^3, u^2, u, 1$ の場合について上の等式が成り立つことを示せば十分であり, いずれも容易に確認できる. \square

上の定理は 3 次以下の関数 $p(x)$ に対して成り立つが, ここからは 2 次以下の関数に対して適用していく.

まず, 積分 I の積分区間 $[a, b]$ の幅が小さければ, 端点 a, b とその中点 $m = (a + b)/2$ において $f(x)$ と値が一致する 2 次関数, つまり

$$f(a) = p(a), \quad f(m) = p(m), \quad f(b) = p(b)$$

となる 2 次関数 $p(x)$ によって I を以下のように近似する.

$$I = \int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b p(x) dx = \frac{b-a}{6} (f(a) + 4f(m) + f(b)) \quad (14.2)$$

そして、積分区間 $[a, b]$ の幅が小さいとは言い切れないときはこの区間を偶数個に細かく等分割し、各小区間に先ほどの近似 (14.2) を適用する。 n を偶数とし、 $\Delta_n = (x_0, x_1, \dots, x_n)$ を区間 $[a, b]$ の n 等分割とする。また、分割の幅を $h = (b - a)/n$ とする。このとき、隣り合う 2 区間を合併した区間 $[x_{2i-2}, x_{2i}]$ に対して

$$x_{2i-1} = \frac{x_{2i-2} + x_{2i}}{2}, \quad x_{2i} - x_{2i-2} = 2h$$

なので、この各小区間 $[x_{2i-2}, x_{2i}]$ での積分に (14.2) を適用して

$$\int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x) dx \approx \frac{h}{3} (f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i}))$$

と近似できる。従って、積分区間 $[a, b]$ 全体においては

$$I = \int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^{n/2} \int_{x_{2i-2}}^{x_{2i}} f(x) dx \approx \frac{h}{3} \sum_{i=1}^{n/2} (f(x_{2i-2}) + 4f(x_{2i-1}) + f(x_{2i}))$$

と近似できる。最後の近似式を整理して以下の Simpson の公式内の S_n が得られる。

定理 14.4 (Simpson の公式). n を偶数とし、 $\Delta_n = (x_0, x_1, \dots, x_n)$ を区間 $[a, b]$ の n 等分割とする。分割の幅を $h = (b - a)/n$ とおくと

$$S_n := \frac{h}{3} (f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \dots + 4f(x_{n-1}) + f(x_n))$$

は積分 I の近似値を与える。その誤差は、区間 $[a, b]$ で $|f^{(4)}(x)| \leq K$ が成り立つなら

$$|I - S_n| \leq \frac{K(b-a)^5}{180n^4}$$

と見積もれる。つまり、誤差は n^4 に反比例して小さくなる。

例 14.5. Simpson の公式を使って以下の積分の近似値を計算する。

$$\int_0^1 \frac{dx}{x^2 + 1} = \left[\tan^{-1} x \right]_0^1 = \frac{\pi}{4}$$

$f(x) = \frac{1}{x^2 + 1}$ とし、積分区間 $[0, 1]$ を 4 等分割する。分割の幅は $h = \frac{1}{4}$ なので

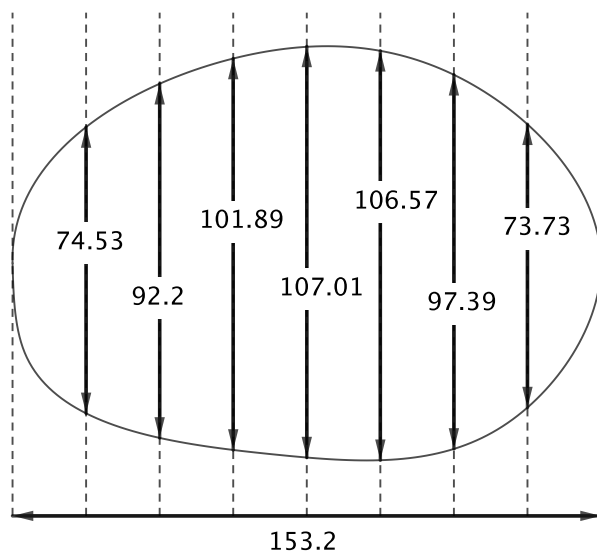
$$\begin{aligned} S_4 &= \frac{1/4}{3} (f(0) + 4f(1/4) + 2f(1/2) + 4f(3/4) + f(1)) = \frac{1}{12} \left(1 + \frac{64}{17} + \frac{8}{5} + \frac{64}{25} + \frac{1}{2} \right) \\ &= \frac{8011}{10200} = 0.785392 \dots \end{aligned}$$

である。これが $\frac{\pi}{4}$ の近似値なので、4 倍することで円周率 π の近似値

$$\pi \approx 4S_4 = 3.1415686 \dots$$

が得られる。より精密な値は $\pi = 3.14159256 \dots$ なので、労力の割にはなかなかの精度であることがわかる。

例 14.6. 下のような形の池（数字の単位はメートル）の面積の近似値を Simpson の公式を使って計算する.



池の幅 153.2 m を 8 等分して Simpson の公式を適用する. 求める近似値は

$$S_8 = \frac{153.2/8}{3} \left(0.0 + 4 \times 74.53 + 2 \times 92.2 + 4 \times 101.89 + 2 \times 107.01 + 4 \times 106.57 \right. \\ \left. + 2 \times 97.39 + 4 \times 73.73 + 0.0 \right) = 12894.84 \dots$$

となるので, 池の面積は約 12895 m^2 である.