

1 実験目的・課題

以下の 3 つの課題を行う。

- 課題 1
 - 数値微分の方法を理解する
 - $\sin(x)$ を微分するプログラムを作成する
 - 幅を変更し精度が変化することを確認する
- 課題 2
 - 数値積分の方法を理解する
 - 円の面積を求めるプログラムを作成する
 - 分割数を変更し精度が変化することを確認する
- 課題 3
 - 上記以外の微分法・積分法について調査しプログラムを実装する

2 実装方法

2.1 課題 1

式 1 によって関数 $f(x)$ の微分は定義される。

$$f'(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (1)$$

しかし、計算機では極限の計算はできない。そのため、 h に微小量を設定して近似して解を得る。

微分を計算する差分のとり方は 3 つあり、それぞれ前方差分 (式 2)、後方差分 (式 3)、中心差分 (式 4) である。

$$f'(x) \simeq \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \quad (2)$$

$$f'(x) \simeq \frac{f(x) - f(x-h)}{h} \quad (3)$$

$$f'(x) \simeq \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} \quad (4)$$

$f(x)$ の $x = a$ まわりでのテイラー展開は

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(a)(x-a)^k \quad (5)$$

である。よって、 $f(x+h)$ の $x = x$ まわりでのテイラー展開は

$$\begin{aligned} f(x) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} f^{(k)}(x) h^k \\ &= \frac{1}{0!} h^0 f(x) + \frac{1}{1!} h^1 f'(x) + \frac{1}{2!} h^2 f''(x) + \frac{1}{3!} h^3 f'''(x) + \dots \\ &= f(x) + h f'(x) + \frac{h^2}{2!} f''(x) + O(h^3) \end{aligned} \quad (6)$$

と書ける。前進差分の式に式 6 を代入して、

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) + \frac{h}{2!} f''(x) + O(h^2) \quad (7)$$

$$= f'(x) + O(h) \quad (8)$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + O(h) \quad (9)$$

つまり、前方差分の誤差は $O(h)$ で評価できるということがわかる。同様に、後方差分の誤差も $O(h)$ になる。

2.2 課題 2

関数 $f(x)$ の値域 a から b までの定積分は式 10 で計算することが出来る。

$$\int_a^b f(x) dx = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \sum_{x=a}^b f(x) \Delta \quad (10)$$

しかし、計算機では極限の計算が出来ないため、 Δ を微小量として長方形の面積の和を計算し近似的な値を得る。

2.2.1 台形公式

定積分 $\int_a^b f(x) dx$ の値は xy 座標平面で $y = f(x)$ と x 軸の区間 $[a, b]$ で囲まれた面積になる。よって近似値は式 11 によって計算できる。

$$\int_a^b f(x) dx \simeq (b-a) \frac{f(a) + f(b)}{2} \quad (11)$$

この式では、曲線 $y = f(x)$ が直線から離れているほど精度が悪くなる。そこで、積分区間 $[a, b]$ を n 個の区間 $[a_0, a_1], [a_1, a_2], \dots, [a_{n-1}, a_n]$ ($a_0 = a, a_n = b$) に分割し、それぞれで台形公式を適用しその和で面積を近似計算する (式 12)。

$$\int_a^b f(x) dx \simeq \sum_{k=1}^n (a_k - a_{k-1}) \frac{f(a_{k-1}) + f(a_k)}{2} \quad (12)$$

2.2.2 シンプソンの公式

シンプソンの公式は $f(x)$ を二次関数 $g(x)$ で近似することで導かれる。 $g(x)$ は $f(x)$ の点 a, m, b ($m = (a+b)/2$) におけるラグランジュ補完によって次の多項式 (式 13) になる。

$$g(x) = f(a) \frac{(x-m)(x-b)}{(a-m)(a-b)} + f(m) \frac{(x-a)(x-b)}{(m-a)(m-b)} + f(b) \frac{(x-a)(x-m)}{(b-a)(b-m)} \quad (13)$$

この多項式を $[a, b]$ で積分すると式 14(シンプソンの公式) が得られる。

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\simeq \int_a^b g(x) dx \\ &= \frac{b-a}{6} \left[f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right] \end{aligned} \quad (14)$$

2.3 課題 3

ガウスの数値積分公式を用いて数値積分を行う。

2.3.1 ガウス求積

ガウスの数値積分公式とは、 n を正の整数とし、 $f(x)$ の $[-1,1]$ の積分を式 15 の形で近似する公式のことである。

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \simeq \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) \quad (15)$$

ここで、 x_i は積分点またはガウス点と呼ばれる $[-1,1]$ 内の n 個の点であり、 w_i は重みと呼ばれる n 個の実数である。

n 次のルジャンドル多項式の $[-1,1]$ 内にある n 個の零点を積分点として選び、 w_i を適切に選ぶと、 $f(x)$ が $2n-1$ 次以下の多項式であれば式 15 が厳密に成立する。この方法を n 次のガウス・ルジャンドル公式と呼び、通常はガウス求積と言えはこの方法を指す。

$f(x)$ が $2n-1$ 次を超える多項式関数または、多項式関数ではない場合、式 15 は厳密には成立しないが、 $f(x)$ が $2n-1$ 次以下の多項式関数で精度よく近似できる場合には $f(x)$ に式 15 を適用することにより精度よく定積分値を得ることが出来る。

式 15 の積分を区間 $[a, b]$ に適用したいときは新たな変数 t での原点を $[a, b]$ の中点とし、1 目盛りの幅を $(b-a)/2$ とすると、

$$t = \frac{a+b}{2} - \frac{b-a}{2}x$$

$$dt = -\frac{b-a}{2}dx$$

から、

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)dx &= \int_{-1}^1 f(t)dt \\ &= \frac{b-a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{a+b}{2} - \frac{b-a}{2}x\right)dx \end{aligned} \quad (16)$$

$$= \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^n w_i f\left(\frac{b-a}{2}x_i + \frac{a+b}{2}\right) \quad (17)$$

と変形できる。

2.3.2 ガウス求積法の分点と重み

ルジャンドル多項式 $P_k(z)$ は、

$$\begin{aligned} P_0(z) &= 1 \\ P_1(z) &= z \\ P_k(z) &= \frac{2k-1}{k}zP_{k-1}(z) - \frac{k-1}{k}P_{k-2}(z), \quad 2 \leq k \end{aligned}$$

で定義される。

ガウス求積法の n 個の分点 x_i は、 $P_n(x_i) = 0$ となる点である。例えば $n=3$ では以下のように計算でき、

$$P_3(x) = \frac{2 \cdot 3 - 1}{3}xP_2(x) - \frac{3-1}{3}P_1(x)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{5x}{6}(3x^2 - 1) - \frac{2}{3}x \\
&= \frac{5x^3}{2} - \frac{3x}{2}
\end{aligned}$$

$P_3(x) = 0$ となる x は、

$$\begin{aligned}
\frac{5x^3}{2} - \frac{3x}{2} &= 0 \\
x(5x^2 - 3) &= 0 \\
5x^2 - 3 &= 0 \\
x^2 &= \frac{3}{5}
\end{aligned}$$

$x = 0, \pm\sqrt{\frac{3}{5}}$ となる。
次に、重み w_i は、

$$w_i = \frac{2}{(1 - x_i^2)[P'_n(x_i)]^2} \quad (18)$$

で与えられる。

	x_i	w_i
n=1		
	0	2
n=2		
	-0.5774	1.0
	0.5774	1.0
n=3		
	0	0.8889
	-0.7746	0.5556
	0.7746	0.5556
n=4		
	-0.3400	0.6521
	0.3400	0.6521
	-0.8611	0.3479
	0.8611	0.3479
n=5		
	0	0.5689
	-0.5385	0.4786
	0.5385	0.4786
	-0.9062	0.2369
	0.9062	0.2369

表 1 n=1,...,5 のときの分点と重みの値

3 結果と考察

3.1 $\sin(x)$ の微分

$\sin(x)$ の解析的な微分は $\cos(x)$ になる。

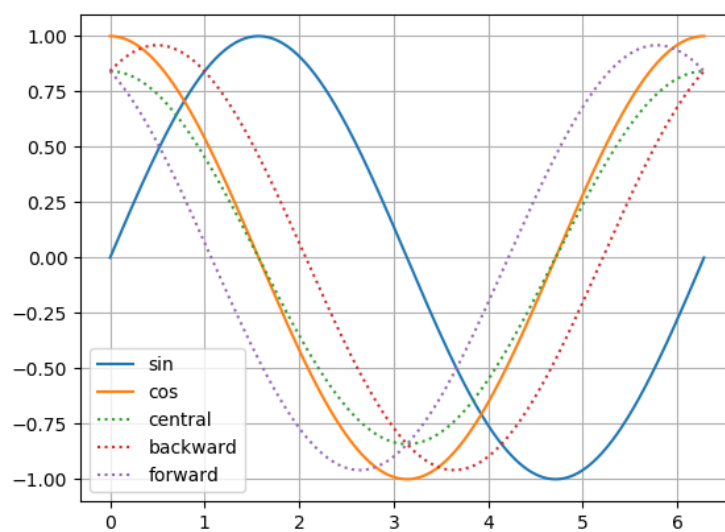


図 1 刻み幅 $h=1$ のときの各微分方法の値

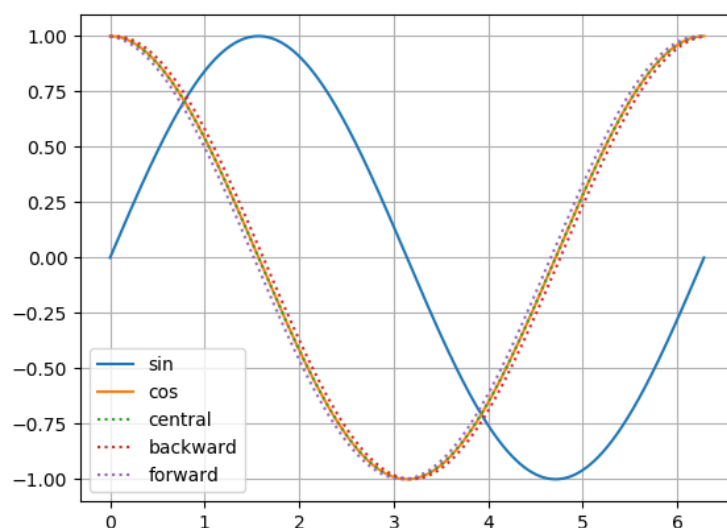


図2 刻み幅 $h=0.1$ のときの各微分方法の値

$h = 1$ としたときの前進差分 (forward)、後退差分 (backward)、中心差分 (central) によって求めた $\sin'(x)$ の値を図1に示す。また、 $h = 0.1$ としたときのものを図2に示す。

図1に点線で示された数値微分によって求められた $\sin'(x)$ の値は $\cos(x)$ の値と大きく異なっていることがわかる。次に、図2をみると h が1の時と比べて精度よく求められていることがわかる。つまり、刻み幅 h を小さい値に設定するほど数値微分によって得られた値が真値 (解析的な微分) に近くなると考えられる。

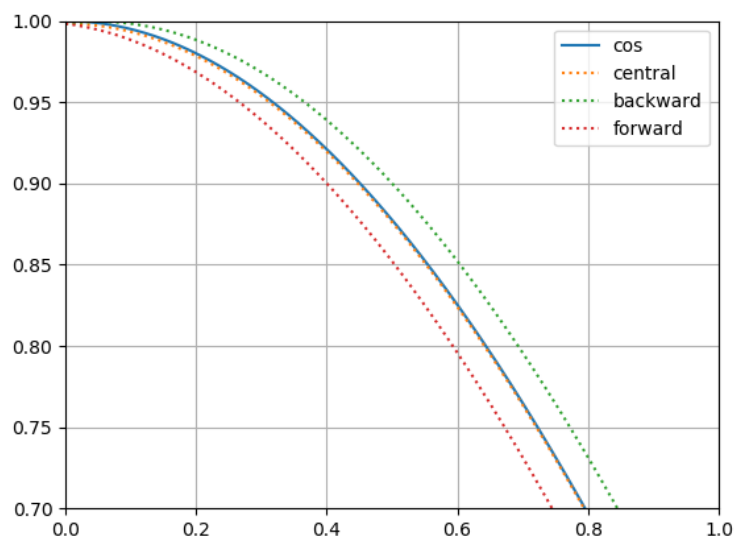


図3 $h=0.1$ のときの $x=0.5$ 付近での拡大

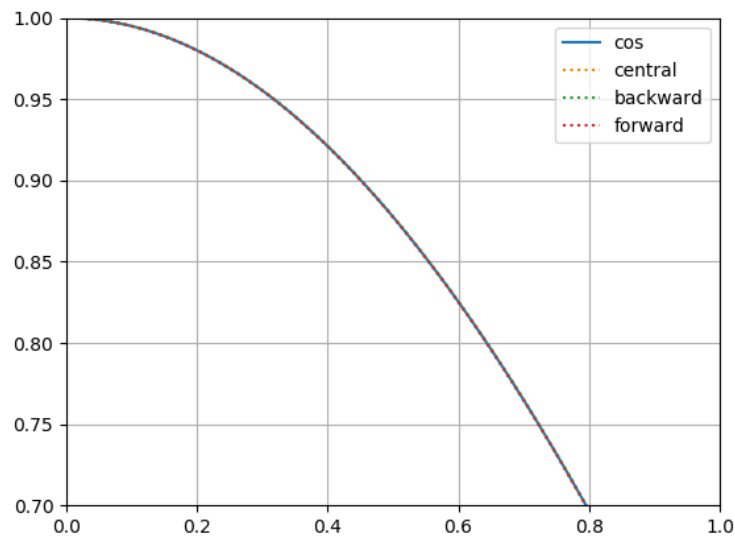


図4 $h=0.001$ のときの $x=0.5$ 付近での拡大

次に、図 3,4 に、結果のグラフを拡大したものを示す。これを見ると、 $h=0.1$ であっても前進差分のときは真値より大きく、後退差分では真値よりも小さい値になってしまっていることがわかる。しかし、中心差分はほぼ正確に近似できていることがわかる。

中心差分の誤差が前方差分、後方差分よりも小さいことは以下のように証明される。

$f(x+h)$ のテイラー展開

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + O(h^4)$$

$f(x-h)$ のテイラー展開

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + O(h^4)$$

なので、中心差分の式は

$$\begin{aligned} \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} &= \frac{2hf'(x) + \frac{2h^3}{3!}f'''(x) + O(h^4)}{2h} \\ &= f'(x) + O(h^2) \end{aligned}$$

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2) \quad (19)$$

となり、誤差は $O(h^2)$ 程度になる。ここで $h < 1$ の場合 $O(h^2)$ は $O(h)$ よりも小さい。よって中心差分によって求められるものは前方差分、後方差分で求めるよりも精度が良い。

3.2 数値積分によって円の面積を求める

半径 1 の円の式は

$$x^2 + y^2 = 1$$

$$y = \sqrt{1-x^2} \quad (20)$$

で与えられる。この式を x 軸の $[0,1]$ の範囲で積分したものを 4 倍したものが半径 1 の円の面積 S になる。

$$S = 4 \int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx = \pi \quad (21)$$

半径 1 の円の面積は π なので、数値積分で求めた解がどの程度円周率 π と一致するかで精度の良し悪しを測る。

台形公式と、シンプソンの公式で分割数 N を変更しながら計算した結果を以下に示す。

```
trapezoidal_rule
N =      1 : S = 2.000000 : err = -36.338023 [%]
N =     10 : S = 3.104518 : err = -1.180112 [%]
N =    100 : S = 3.140417 : err = -0.037421 [%]
N =   1000 : S = 3.141555 : err = -0.001184 [%]
N =  10000 : S = 3.141591 : err = -0.000037 [%]

simpsons_rule
N =      1 : S = 2.976068 : err = -5.268822 [%]
N =     10 : S = 3.136447 : err = -0.163789 [%]
N =    100 : S = 3.141430 : err = -0.005169 [%]
N =   1000 : S = 3.141588 : err = -0.000163 [%]
N =  10000 : S = 3.141592 : err = -0.000005 [%]
```

どちらの方法でも、分割数を増やすほど精度よく定積分が計算できていることがわかる。また、台形公式とシンプソンの公式で分割数が同じ場合、シンプソンの公式によって求められた値のほうが精度が良いこともわかる。これは $[a,b]$ を一次関数で近似するよりも二次関数で近似したほうが精度が良くなるということであり、このことから、 $f(x)$ の区間 $[a,b]$ を近似する関数の次数を上げれば上げるほどそれによって計算される定積分の値も精度が良くなるのではないかと考えられる。

3.3 ガウス求積によって円の面積を求める

円の面積 S は式 21 によって求めることが出来る。これにガウスの数値積分公式 (式 17) を適用すると

$$S = 4 \int_0^1 \sqrt{1-x^2} dx = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n w_i f\left(\frac{x_i}{2} + \frac{1}{2}\right) \quad (22)$$

となる。

```
N =      1 : pi = 3.464102 : err = 10.265779 [%]
N =      2 : pi = 3.184452 : err =  1.364258 [%]
N =      3 : pi = 3.156073 : err =  0.460914 [%]
N =      4 : pi = 3.148229 : err =  0.211256 [%]
N =      5 : pi = 3.145182 : err =  0.114245 [%]
N =     10 : pi = 3.142099 : err =  0.016123 [%]
```


$N = 20 : \text{pi} = 3.141660 : \text{err} = 0.002156 \text{ [\%]}$
 $N = 30 : \text{pi} = 3.141613 : \text{err} = 0.000646 \text{ [\%]}$
 $N = 32 : \text{pi} = 3.141610 : \text{err} = 0.000538 \text{ [\%]}$
 $N = 34 : \text{pi} = 3.141611 : \text{err} = 0.000570 \text{ [\%]}$
 $N = 36 : \text{pi} = 3.141637 : \text{err} = 0.001409 \text{ [\%]}$
 $N = 38 : \text{pi} = 3.141617 : \text{err} = 0.000781 \text{ [\%]}$
 $N = 40 : \text{pi} = 3.142673 : \text{err} = 0.034399 \text{ [\%]}$
 $N = 42 : \text{pi} = 3.146798 : \text{err} = 0.165686 \text{ [\%]}$
 $N = 44 : \text{pi} = 3.132774 : \text{err} = -0.280718 \text{ [\%]}$
 $N = 46 : \text{pi} = 6.632370 : \text{err} = 111.114909 \text{ [\%]}$

$f(x) = \text{sqrt}(1 - x^2)$ は多項式関数ではないため厳密に求めることはできないが $N = 30$ で計算したときに誤差率が 0.001% 未満になっていることからガウスの数値積分公式で円周率を計算できていることがわかる。結果を見ると $N = 34$ までは N を増やすことによって精度が良くなっていることがわかる。しかし、それ以上 N を大きくすると精度が悪くなってってしまう。ここで、40 次のルジャンドル多項式を式 23 に示す。

$$\begin{aligned}
 P_{40}(x) = & \frac{26876802183334044115405x^{40}}{274877906944} - \frac{66341473743672640538025x^{38}}{68719476736} \\
 & + \frac{605689039503920341535475x^{36}}{137438953472} - \frac{847964655305488478149665x^{34}}{68719476736} \\
 & + \frac{6516550296251767619752905x^{32}}{274877906944} - \frac{569050870940295200598141x^{30}}{17179869184} \\
 & + \frac{1195831540381779769372905x^{28}}{481902262541911250344305x^{26}} - \frac{17179869184}{481902262541911250344305x^{26}} \\
 & + \frac{34359738368}{293220953398517427458175x^{22}} - \frac{17179869184}{293220953398517427458175x^{22}} \\
 & + \frac{2409511312709556251721525x^{24}}{34359738368} - \frac{34359738368}{32507685580997069618175x^{18}} \\
 & + \frac{222078820442811559812585x^{20}}{32507685580997069618175x^{18}} - \frac{68719476736}{34359738368} \\
 & + \frac{29085823940892114921525x^{16}}{610192110648086327025x^{14}} - \frac{610192110648086327025x^{14}}{610192110648086327025x^{14}} \\
 & + \frac{137438953472}{17179869184} - \frac{17179869184}{6456342717179159805x^{10}} + \frac{5929294332103310025x^8}{274877906944} \\
 & + \frac{149669762989153250025x^{12}}{34359738368} - \frac{6456342717179159805x^{10}}{17179869184} + \frac{5929294332103310025x^8}{274877906944} \\
 & - \frac{51946258228689825x^6}{68719476736} + \frac{1923935489951475x^4}{137438953472} - \frac{7064634602025x^2}{68719476736} + \frac{34461632205}{274877906944}
 \end{aligned} \tag{23}$$

これを見ると、桁数が大きすぎるために誤差が発生しているのではないかと考えられる。次に、以下の 2 つの多項式の定積分を計算してみる。ガウスの数値積分公式は N 個の分点があるとき、 $2N - 1$ 次までの多項式関数の定積分を厳密に計算できる。つまり 4 次の関数は $N = 3$ のときに、15 次の関数は $N = 8$ のときに厳密に計算できる。ただし、計算機上で計算するときには x_i, w_i を求める式に無理数が含まれているためその分の誤差は生じる。

$$\int_0^1 x + \frac{x^3}{5} + 7x^4 dx = 1.95 \tag{24}$$

この定積分を計算した結果を以下に示す。

```

N = 1 : S = 0.96250000 : err = -50.6410256410256 [%]
N = 2 : S = 1.91111111 : err = -1.9943019943020 [%]
N = 3 : S = 1.95000000 : err = -0.0000000000000 [%]
N = 4 : S = 1.95000000 : err = 0.0000000000000 [%]
N = 5 : S = 1.95000000 : err = 0.0000000000000 [%]
N = 7 : S = 1.95000000 : err = 0.0000000000007 [%]
N = 8 : S = 1.95000000 : err = -0.0000000000000 [%]
N = 9 : S = 1.95000000 : err = -0.0000000000002 [%]
N = 10 : S = 1.95000000 : err = 0.0000000000018 [%]
N = 15 : S = 1.95000000 : err = -0.0000000000689 [%]
N = 20 : S = 1.95000000 : err = 0.0000000071594 [%]

```

$N = 3$ で正確に値を求めることが出来ている。次に、

$$\int_{-12}^{34} x^{15} dx = 199316230367465312358400 \quad (25)$$

を計算した結果を以下に示す。

```

N = 1 : S = 192153415793119936 : err = -99.9999035936936 [%]
N = 5 : S = 194915126436554747150336 : err = -2.2081011279395 [%]
N = 7 : S = 199308070828852973142016 : err = -0.0040937652680 [%]
N = 8 : S = 199316230367465151922176 : err = -0.0000000000001 [%]
N = 9 : S = 199316230367464447279104 : err = -0.0000000000004 [%]
N = 10 : S = 199316230367472064135168 : err = 0.0000000000034 [%]
N = 15 : S = 199316230367062599401472 : err = -0.0000000002021 [%]
N = 20 : S = 199316230404390562824192 : err = 0.0000000185260 [%]

```

$N = 8$ で 15 桁まで正確に計算出来ていることがわかる。しかし 23 桁全てを正確に求めることはできなかった。これは 2 進数では 10 進数の小数を近似的にしか得られないためだと考えられる。Python の float 型では一つの演算当たり $\frac{1}{2^{53}}$ 程度の誤差が生じてしまうため、 $2^{53} = 9007199254740992$ より、15 桁以上の数の演算をすると 1 程度の誤差が生じることになる。つまり、ガウスの数値積分公式で上から 15 桁の値が一致しているのは計算機の限界ということであり、極めて正確に値を求められているといつてよいと考えられる。

式 25 の積分を台形公式で求めると 199316303335102965874688、シンプソンの公式で求めると 199316230367466259218432 になった。台形公式では 6 桁、シンプソンの公式では 14 桁まで正確な値であった。

以上のことから、ガウスの数値積分公式で定積分の値を計算機の限界はあれど厳密に求めることができることがわかった。

参考文献

[1] 台形公式

<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E5%8F%B0%E5%BD%A2%E5%85%AC%E5%BC%8F>

[2] シンプソンの公式

<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%82%B7%E3%83%B3%E3%83%97%E3%82%BD%E3%83%B3%E3%81%AE%E5%85%AC%E5%BC%8F>

[3] ガウス求積

<https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%82%AC%E3%82%A6%E3%82%B9%E6%B1%82%E7%A9%8D>

[4] 数値解析 加古富志雄 令和元年 5 月 27 日

<https://www.ics.nara-wu.ac.jp/~kako/teaching/na/chap6.pdf>

[5] 15. 浮動小数点演算、その問題と制限

<https://docs.python.org/ja/3/tutorial/floatingpoint.html>