神戸市立工業高等専門学校
電気工学科／電子工学科
専門科目「数値解析」

2017.7.21

数値積分

山浦 剛（tyamaura@riken.jp）

講義資料ページ

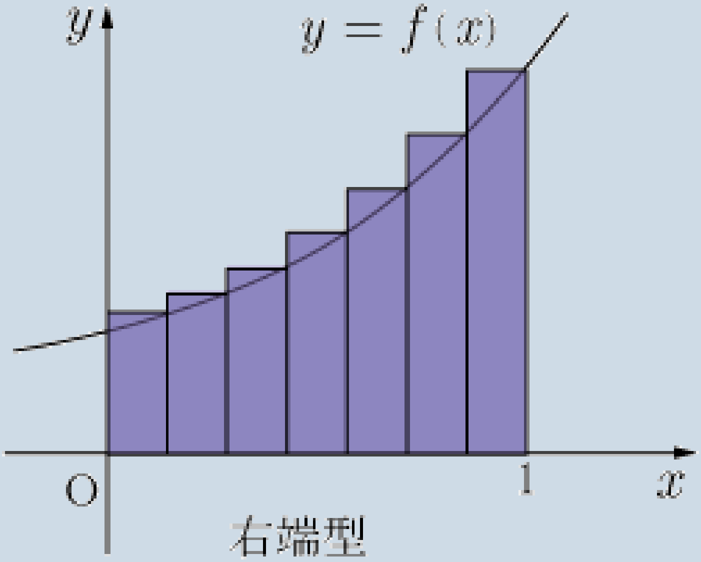
- http://climate.aics.riken.jp/members/yamaura/numerical_analysis.html

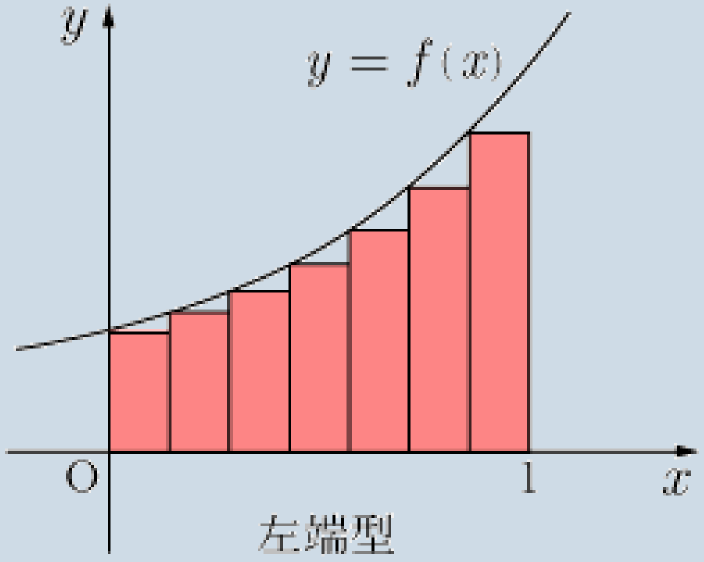
数値積分の必要性

- 微分と積分は、乗算と除算のように、お互いに逆の演算を示す。一方、初等関数の微分は初等関数で表せても、初等関数の積分が初等関数で表せるとは限らない。
  - $f(x) = e^{-x^2}$　微分：$\frac{df(x)}{dx} = -2x\,e^{-x^2}$　積分：$\int_0^x f(s)ds = \int_0^x e^{-s^2}ds = Erf(x)$
- 特殊な関数は、その数学的性質から数値計算ライブラリによって値を得られることもある。しかし、一般的な関数$f(x)$の積分値について常にライブラリが用意されているわけではない
- 数値計算により、$I = \int_a^b f(x)dx$ の値を得るための方法を考える　⇒「数値積分」
- 数値積分の問題は、次節の常微分方程式の問題によく似ている
  - $\frac{dy}{dx} = f(x)$　⇒　$\int_a^b \frac{dy}{dx}dx = y(b) - y(a) = \int_a^b f(x)dx$
- $y(a) = 0$ の条件を与えると、$y(b) = \int_a^b f(x)dx$ という積分問題に帰着する

数値積分の基礎：区分求積法

- 右端型
  - $\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\left\{f\left(\frac{1}{n}\right)+f\left(\frac{2}{n}\right)+\cdots+f\left(\frac{n}{n}\right)\right\}=\int_0^1 f(x)dx$
- 左端型
  - $\lim_{n\to\infty}\frac{1}{n}\left\{f(0)+f\left(\frac{1}{n}\right)+\cdots+f\left(\frac{n-1}{n}\right)\right\}=\int_0^1 f(x)dx$

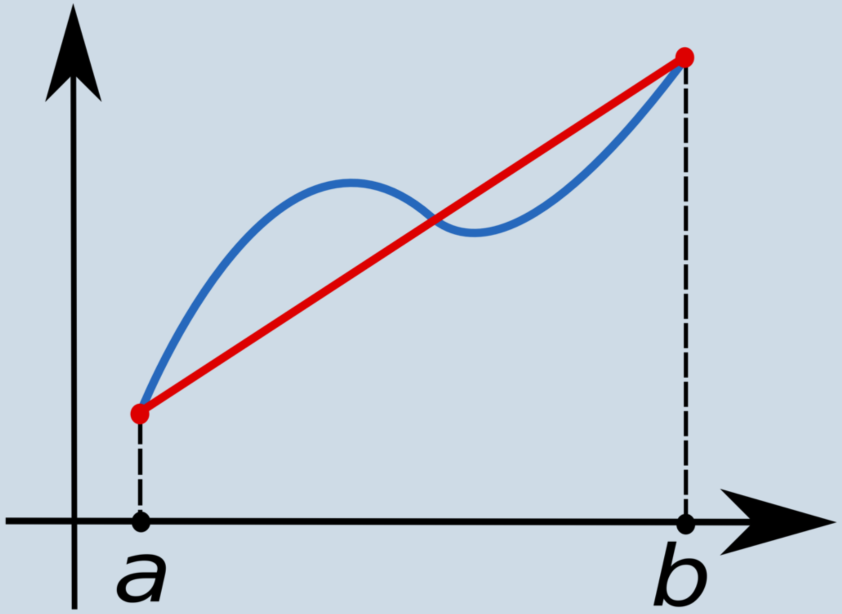




出典: http://w3e.kanazawa-it.ac.jp/math/category/sekibun/henkan-tex.cgi?target=/math/category/sekibun/kubun-kyuuseki-hou.html

台形則

- 台形で積分範囲を近似する（台形則）
  - $T = \int_a^b f(x)dx \approx (b-a)\frac{f(a)+f(b)}{2}$
- 区分求積法よりも誤差が小さくなる
- 台形の幅（x軸の長さ）を小さく刻んでいくと、より近似が良くなっていく
- 台形の幅を$h = (b-a)/N$で等間隔に刻んでいく場合、台形の総和面積Tは、
  - $T = \sum_{j=0}^{N-1} \frac{h}{2}\{f(a+jh) + f(a+(j+1)h)\}$
  - $T = h\left\{\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + f(a+2h) + \cdots + f(b-h) + \frac{f(b)}{2}\right\}$



出典: https://ja.wikipedia.org/wiki/台形公式

台形則の計算例

- 台形則で区間をN等分したときの各x座標の値を「分点」という
- 分割数Nを増やすと、Tの値とその誤差が小さくなっていくことは図からも読み取ることができる
- Nを倍にすると、誤差がおよそ1/4になっていく
  - 台形則の誤差 $\propto 1/N^2$

N	積分近似値T	誤差$\lvert T - I \rvert$
1	1.85914091	1.408×10^{-1}
2	1.75393109	3.564×10^{-2}
4	1.72722190	8.940×10^{-3}
8	1.72051859	2.236×10^{-3}
16	1.71884112	5.593×10^{-4}
32	1.71842166	1.398×10^{-4}
64	1.71831678	3.495×10^{-5}
128	1.71829056	8.739×10^{-6}
256	1.71828401	2.184×10^{-6}
512	1.71828237	5.462×10^{-7}
1024	1.71828196	1.365×10^{-7}

$I = \int_0^1 \exp(x)\, dx = 1.71828182 \ldots$ の台形近似

台形則の誤差

- 台形則は、関数$f(x)$を折れ線関数$F(x)$で近似し、$F(x)$の積分値を求めるものと考えられる。関数$F(x)$のグラフは、2点$(x_j, f(x_j))$ $(x_{j+1}, f(x_{j+1}))$を結んだ折れ線グラフとなる。これは1次のラグランジュ補間なので、ラグランジュ補間の誤差の式より、
  - $|f(x) - F(x)| \leq \frac{1}{2} \max_{x_j<\xi\leq x_{j+1}} |f''(\xi)| \cdot \left|(x - x_j)(x - x_{j+1})\right|$
- 区間$[x_j, x_{j+1}]$で両辺を積分
  - $\left|\int_{x_j}^{x_{j+1}} f(x)dx - \int_{x_j}^{x_{j+1}} F(x)dx\right| \leq \frac{1}{2} \max_{x_j<\xi\leq x_{j+1}} |f''(\xi)| \int_{x_j}^{x_{j+1}} \left|(x - x_j)(x - x_{j+1})\right| dx \approx \frac{h^3}{12} \max_{x_j<\xi\leq x_{j+1}} |f''(\xi)|$
- 全区間$[a, b]$での積分を考える
  - $\left|\int_a^b f(x)dx - \int_a^b F(x)dx\right| \leq \frac{h^3}{12} \sum_{j=0}^{N-1} \max_{a<\xi\leq b} |f''(\xi)| = \frac{h^3}{12} N \max_{a<\xi\leq b} |f''(\xi)| = \frac{(b-a)^3}{12N^2} \max_{a<\xi\leq b} |f''(\xi)|$

台形則の計算アルゴリズム1

- 台形則を用いて積分値の近似を行う場合、誤差を考えて途中で計算を打ち切ることになる
  - ただし一般的に $\max_{a<\xi\leq b}|f''(\xi)|$を見積もるのは面倒
  - 代替措置として、Nを徐々に増やして先頭からp桁変化しなくなれば計算終了、という条件を用いる
- 演算コストの多い部分は$f(x_j)$を求める箇所。計算効率を高めるため、一度計算した$f(x_j)$を使いまわせるようにする
  - これは、Nを2倍にしていくことで実現できる（pp.64 図4-5）
- $N=2^n$における台形則の総和面積をT_nとし、台形の幅$h=(b-a)/2^n$とすると、
  - $T_n=\frac{b-a}{2^n}\left\{\frac{f(a)}{2}+f\left(a+1\cdot\frac{b-a}{2^n}\right)+f\left(a+2\cdot\frac{b-a}{2^n}\right)+\cdots+\frac{f(b)}{2}\right\}$
  - $T_{n+1}=\frac{b-a}{2^{n+1}}\left\{\frac{f(a)}{2}+f\left(a+1\cdot\frac{b-a}{2^{n+1}}\right)+f\left(a+2\cdot\frac{b-a}{2^{n+1}}\right)+f\left(a+3\cdot\frac{b-a}{2^{n+1}}\right)+f\left(a+4\cdot\frac{b-a}{2^{n+1}}\right)+\cdots+\frac{f(b)}{2}\right\}$

台形則の計算アルゴリズム2

- T_nを用いてT_{n+1}を表すと、
  - $\frac{T_n}{2}=\frac{b-a}{2^{n+1}}\left\{\frac{f(a)}{2}+f\left(a+2\cdot\frac{b-a}{2^{n+1}}\right)+f\left(a+4\cdot\frac{b-a}{2^{n+1}}\right)+\cdots+\frac{f(b)}{2}\right\}$
  - $T_{n+1}=\frac{T_n}{2}+\frac{b-a}{2^{n+1}}\left\{f\left(a+1\cdot\frac{b-a}{2^{n+1}}\right)+f\left(a+3\cdot\frac{b-a}{2^{n+1}}\right)+\cdots+f\left(b-\frac{b-a}{2^{n+1}}\right)\right\}$
- という漸化式を作ることができる。ただし、
  - $T_0=\frac{b-a}{2}\{f(a)+f(b)\}$

シンプソン則の原理1

- 台形則　⇒　1次のラグランジュ補間多項式による近似
- 近似精度をあげる（2次以上のラグランジュ補間多項式を用いる）ことで、得られる積分値の誤差を小さくすることができるはず
- 積分区間$[a, b]$、分点の間隔$h = (b - a)/N$、分点を$x_j = a + jh\ (j = 0,1, \dots, N)$とする
- 隣り合う3つの分点x_j, x_{j+1}, x_{j+2}から2次のラグランジュ補間多項式$P(x)$で近似
  - $P(x) = \frac{(x-x_{j+1})(x-x_{j+2})}{(x_j-x_{j+1})(x_j-x_{j+2})} f(x_j) + \frac{(x-x_j)(x-x_{j+2})}{(x_{j+1}-x_j)(x_{j+1}-x_{j+2})} f(x_{j+1}) + \frac{(x-x_j)(x-x_{j+1})}{(x_{j+2}-x_j)(x_{j+2}-x_{j+1})} f(x_{j+2})$

シンプソン則の原理2

- $P(x)$を区間$[x_j, x_{j+2}]$で積分することを考えると、
  - $\int_{x_j}^{x_{j+2}} P(x)dx = \int_{x_j}^{x_{j+2}} \left\{ \frac{(x-x_{j+1})(x-x_{j+2})}{(x_j-x_{j+1})(x_j-x_{j+2})} f(x_j) + \frac{(x-x_j)(x-x_{j+2})}{(x_{j+1}-x_j)(x_{j+1}-x_{j+2})} f(x_{j+1}) + \frac{(x-x_j)(x-x_{j+1})}{(x_{j+2}-x_j)(x_{j+2}-x_{j+1})} f(x_{j+2}) \right\} dx$
- $x_j = a + jh$ であるので、
  - $x_j - x_{j+1} = (a + jh) - (a + (j + 1)h) = -h, \quad x_j - x_{j+2} = (a + jh) - (a + (j + 2)h) = -2h$
- ゆえに、
  - $\int_{x_j}^{x_{j+2}} P(x)dx = \int_{x_j}^{x_{j+2}} \left\{ \frac{(x-x_{j+1})(x-x_{j+2})}{2h^2} f(x_j) + \frac{(x-x_j)(x-x_{j+2})}{-h^2} f(x_{j+1}) + \frac{(x-x_j)(x-x_{j+1})}{2h^2} f(x_{j+2}) \right\} dx$
- 変換変数$t = \frac{x-x_j}{h}$を用意すると、
  - $\frac{x-x_{j+1}}{h} = \frac{x-\{a+(j+1)h\}}{h} = \frac{x-x_j-h}{h} = \frac{x-x_j}{h} - 1 = t - 1, \quad \frac{x-x_{j+2}}{h} = \frac{x-\{a+(j+2)h\}}{h} = \frac{x-x_j-2h}{h} = \frac{x-x_j}{h} - 2 = t - 2$

シンプソン則の原理3

- このとき、変換変数tにおける積分を考えると、
  - $x = x_j \to t = 0, \quad x = x_{j+2} \to t = 2, \quad dx = dt\frac{dx}{dt} = h\,dt$
- よって、
  - $\int_{x_j}^{x_{j+2}} P(x)dx = h\int_0^2 \left\{\frac{1}{2}(t-1)(t-2)f(x_j) - t(t-2)f(x_{j+1}) + \frac{1}{2}t(t-1)f(x_{j+2})\right\}dt$
  - $= \frac{h}{2}\int_0^2 \{(t^2-3t+2)f(x_j) - (2t^2-4t)f(x_{j+1}) + (t^2-t)f(x_{j+2})\}dt$
  - $= \frac{h}{2}\left\{\left[\frac{1}{3}t^3 - \frac{3}{2}t^2 + 2t\right]_0^2 f(x_j) - \left[\frac{2}{3}t^3 - 2t^2\right]_0^2 f(x_{j+1}) + \left[\frac{1}{3}t^3 - \frac{1}{2}t^2\right]_0^2 f(x_{j+2})\right\}$
  - $= \frac{h}{2}\left\{\frac{2}{3}f(x_j) + \frac{8}{3}f(x_{j+1}) + \frac{2}{3}f(x_{j+2})\right\}$
  - $= \frac{h}{3}\{f(x_j) + 4f(x_{j+1}) + f(x_{j+2})\}$

シンプソン則の原理4

- 次に、積分区間を左端から順に$[x_0, x_2]$, $[x_2, x_4]$, ..., $[x_{N-2}, x_N]$という小区間に分割し（Nは偶数でなければならない）、各小区間で得られた総和面積Sを求める。
  - Sが本来の積分値の近似に相当する。
  - $S = \frac{h}{3}\{f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\} + \frac{h}{3}\{f(x_2) + 4f(x_3) + f(x_4)\} + \cdots \frac{h}{3}\{f(x_{N-2}) + 4f(x_{N-1}) + f(x_N)\}$
  - $S = \frac{h}{3}\{f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + 2f(x_4) + \cdots + 2f(x_{N-2}) + 4f(x_{N-1}) + f(x_N)\}$
- この式に従って積分値を近似する方法を「シンプソン則」という
- シンプソン則の誤差
  - $\left|\int_a^b f(x)dx - S\right| \leq \frac{(b-a)^5}{180N^4} \max_{a<\xi<b} \left|f^{(4)}(\xi)\right|$
  - 誤差は、最悪でも$1/N^4$に比例して小さくなるが、同じ分割数Nでシンプソン則のほうが台形則よりも常に良いことを保証するわけではない

シンプソン則と台形則

- シンプソン則のアルゴリズムを考える
  - 台形則同様、Nを徐々に増やして先頭からp桁変化しなくなれば計算終了、という条件を用いる
  - $N=2^n$のときの台形則およびシンプソン則による積分近似値をそれぞれT_n、S_nとする
- このとき、次の式が成立する
  - $S_{n+1}=\frac{4}{3}T_{n+1}-\frac{1}{3}T_n$
  - $=\frac{4}{3}h\left\{\frac{f(a)}{2}+f(a+h)+\cdots+f(b-h)+\frac{f(b)}{2}\right\}-\frac{2}{3}h\left\{\frac{f(a)}{2}+f(a+2h)+\cdots+f(b-2h)+\frac{f(b)}{2}\right\}$
  - $=\frac{h}{3}\{f(a)+4f(a+h)+2f(a+2h)+\cdots+2f(b-2h)+4f(b-h)+f(b)\}$
  - $=S_{n+1}$

ロンバーグ積分法

- シンプソン則は、台形則の分割数Nと2Nでの積分値に適当な係数をかけて差をとるだけで導くことができる
  - 台形則の誤差は$1/N^2$に比例し、シンプソン則の誤差は$1/N^4$に比例する
  - 同様に、適当な係数をかけて誤差をさらに小さくする計算法を作ることができるのでは？
- 分割数を$N = 2^n$とし、各nにおける台形則の積分近似値を$T_n^{(0)}$とする
  - $T_n^{(k)} = \frac{4^k T_n^{(k-1)} - T_{n-1}^{(k-1)}}{4^k - 1} \quad (k = 1,2, \ldots \cap n \geq k)$
- このとき、$k = 1$を考えると、
  - $T_n^{(1)} = \frac{4}{3} T_n^{(0)} - \frac{1}{3} T_{n-1}^{(0)}$
- シンプソン則の積分近似値$S_n = T_n^{(1)}$であることが分かる

練習問題

- 関数$f(x) = x\sqrt{1+x^2}$について、$x = 0 \sim 1$の範囲で定積分を行うと、その値は
  - $\int_0^1 x\sqrt{1+x^2}dx = \frac{1}{2}\int_1^2 \sqrt{a}da = \frac{1}{2}\left[\frac{2}{3}a^{\frac{3}{2}}\right]_1^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{2}{3}2\sqrt{2} - \frac{2}{3}\right) = \frac{1}{3}(2\sqrt{2} - 1) \approx 0.6094757$
- となる。
  - 関数$f(x)$について、台形則を用いて分割数$N = 4$の積分近似値を計算し、絶対誤差を有効数字3桁で求めよ。
  - 関数$f(x)$について、シンプソン則を用いて分割数$N = 4$の積分近似値を計算し、絶対誤差を有効数字3桁で求めよ。
  - 関数$f(x)$について、ロンバーグ積分法の$T_2^{(2)}$によって積分近似値を計算し、絶対誤差を有効数字3桁で求めよ。

解答例1

- $a = 0, b = 1, N = 4 = 2^2$となるので、台形則による積分近似値は、
  - $T_0 = \frac{1}{2}\{f(0) + f(1)\} = \frac{\sqrt{2}}{2}$
  - $T_1 = \frac{T_0}{2} + \frac{1}{2} f\left(\frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{2}}{4} + \frac{\sqrt{5}}{8} = \frac{2\sqrt{2}+\sqrt{5}}{8}$
  - $T_2 = \frac{T_1}{2} + \frac{1}{4}\left\{f\left(\frac{1}{4}\right) + f\left(\frac{3}{4}\right)\right\} = \frac{2\sqrt{2}+\sqrt{5}}{16} + \frac{\sqrt{17}}{64} + \frac{15}{64} = \frac{8\sqrt{2}+4\sqrt{5}+\sqrt{17}+15}{64} \approx 0.6153294$
  - $|0.6094757 - 0.6153294| = 5.85 \times 10^{-3}$

解答例2

- シンプソン則の積分近似値S_2は、台形則より、
  - $S_2 = \frac{4}{3}T_2 - \frac{1}{3}T_1$
  - $T_1 = \frac{2\sqrt{2}+\sqrt{5}}{8}$
  - $T_2 = \frac{8\sqrt{2}+4\sqrt{5}+\sqrt{17}+15}{64}$
  - $S_2 = \frac{4}{3}\frac{8\sqrt{2}+4\sqrt{5}+\sqrt{17}+15}{64} - \frac{1}{3}\frac{2\sqrt{2}+\sqrt{5}}{8} = \frac{16\sqrt{2}+8\sqrt{5}+4\sqrt{17}+60}{192} \approx 0.6094186$
  - $|0.6094757 - 0.6094186| = 5.71 \times 10^{-5}$

解答例3

- ロンバーグ積分法の積分近似値$T_2^{(2)}$は、
  - $T_2^{(2)} = \frac{16}{15}T_2^{(1)} - \frac{1}{15}T_1^{(1)}$
  - $T_1^{(1)} = \frac{4}{3}T_1^{(0)} - \frac{1}{3}T_0^{(0)} = \frac{4}{3}\frac{2\sqrt{2}+\sqrt{5}}{8} - \frac{1}{3}\frac{\sqrt{2}}{2} = \frac{4\sqrt{2}+4\sqrt{5}}{24}$
  - $T_2^{(1)} = \frac{4}{3}T_2^{(0)} - \frac{1}{3}T_1^{(0)} = \frac{16\sqrt{2}+8\sqrt{5}+4\sqrt{17}+60}{192}$
  - $T_2^{(2)} = \frac{16}{15}\frac{16\sqrt{2}+8\sqrt{5}+4\sqrt{17}+60}{192} - \frac{1}{15}\frac{4\sqrt{2}+4\sqrt{5}}{24} = \frac{224\sqrt{2}+96\sqrt{5}+64\sqrt{17}+960}{2880} \approx 0.6094878$
  - $|0.6094757 - 0.6094878| = 1.21 \times 10^{-5}$