数値計算法 第 14 回

数値積分 (2)

濱本 雄治 [1]

情報工学部 情報通信工学科

2025 年 7 月 25 日

[1] hamamoto@c.oka-pu.ac.jp

復習: 数値積分

- 合成台形公式

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = h\left(\frac{y_0}{2} + y_1 + y_2 + \cdots + y_{n-1} + \frac{y_n}{2}\right)$$

- 合成 Simpson の公式

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = h\Biggl[&\frac{y_0}{3} + \frac{4}{3}(y_1 + y_3 + \cdots + y_{n-1}) \\ &+\frac{2}{3}(y_2 + y_4 + \cdots + y_{n-2}) + \frac{y_n}{3}\Biggr]\end{aligned}$$

前回の小テストの解説

台形公式を用いて次の定積分を有効数字 3 桁で計算せよ。ただし積分区間 $[-1, 1]$ は $x_0 = -1, x_8 = 1$ となるように 8 等分すること。

$$S = \int_{-1}^{1} 2\sqrt{1 - x^2}\, \mathrm{d}x$$

- まず $\sqrt{1 - x^2}$ は原点を中心とする単位円の上半分なので、区間 $[-1, 1]$ で積分すると半円の面積 $\dfrac{\pi}{2}$ が得られる。よって S の解析解は

$$S = \frac{\pi}{2} \times 2 = \pi$$

- 次に台形公式を用いるために積分区間 $[-1,1]$ を 8 等分すると

$$h = \frac{1-(-1)}{8} = \frac{1}{4}$$

- 各データ点の座標は

$$
\begin{aligned}
x_0 &= -1, & y_0 &= y_8 = 2\sqrt{1-(-1)^2} = 0,\\
x_1 &= -1+h = -\frac{3}{4}, & y_1 &= y_7 = 2\sqrt{1-\left(-\frac{3}{4}\right)^2} = \frac{\sqrt{7}}{2},\\
x_2 &= -1+2h = -\frac{1}{2}, & y_2 &= y_6 = 2\sqrt{1-\left(-\frac{1}{2}\right)^2} = \sqrt{3},\\
x_3 &= -1+3h = -\frac{1}{4}, & y_3 &= y_5 = 2\sqrt{1-\left(-\frac{1}{4}\right)^2} = \frac{\sqrt{15}}{2},\\
x_4 &= -1+4h = 0, & y_4 &= 2\sqrt{1-0^2} = 2
\end{aligned}
$$

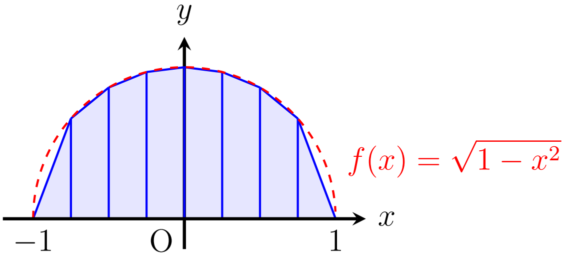
- これらを台形公式に代入すると

$$S \simeq h\left(\frac{y_0}{2} + \sum_{i=1}^{7} y_i + \frac{y_8}{2}\right)$$

$$= \frac{1}{4}\left(\frac{0}{2} + \frac{\sqrt{7}}{2} + \sqrt{3} + \frac{\sqrt{15}}{2} + 2 + \frac{\sqrt{15}}{2} + \sqrt{3} + \frac{\sqrt{7}}{2} + \frac{0}{2}\right)$$

$$= \frac{1}{4}(2 + \sqrt{7} + 2\sqrt{3} + \sqrt{15}) = 2.995\cdots \simeq 3.00$$

- S の過小評価の原因は $x \to \pm 1$ における $\sqrt{1-x^2}$ の急激な変化



台形公式の分割数を倍々に増やす

- $n = 1$ のとき $h_1 = b - a$

$$S_1 = h_1 \left[\frac{f(a)}{2} + \frac{f(b)}{2} \right]$$

- $n = 2$ のとき $h_2 = \dfrac{b-a}{2} = \dfrac{h_2}{2}$

$$\begin{aligned} S_2 &= h_2 \left[\frac{f(a)}{2} + \underbrace{f(a+h_2)}_{\text{新しい項}} + \frac{f(b)}{2} \right] \\ &= \frac{h_1}{2} \left[\frac{f(a)}{2} + \frac{f(b)}{2} \right] + h_2 f(a+h_2) \\ &= \frac{S_1}{2} + h_2 \underbrace{f(a+h_2)}_{\text{奇数番目の項}} \end{aligned}$$

S_2 が S_1 と奇数番目の項で書けた

- $n=4$ のとき $h_4=\dfrac{b-a}{4}=\dfrac{h_2}{2}$

$$S_4 = h_4\left[\frac{f(a)}{2} + \underbrace{f(a+h_4)}_{\text{新しい項}} + \underbrace{f(a+2h_4)}_{=f(a+h_2)} + \underbrace{f(a+3h_4)}_{\text{新しい項}} + \frac{f(b)}{2}\right]$$

$$= \frac{h_2}{2}\left[\frac{f(a)}{2} + f(a+h_2) + \frac{f(b)}{2}\right] + h_4[f(a+h_4) + f(a+3h_4)]$$

$$= \frac{S_2}{2} + h_4[\underbrace{f(a+h_4) + f(a+3h_4)}_{\text{奇数番目の項}}]$$

S_4 が S_2 と奇数番目の項で書けた

- $n=8$ のとき $h_8 = \dfrac{b-a}{8} = \dfrac{h_4}{2}$

$$
\begin{aligned}
S_8 = h_8\Bigg[&\frac{f(a)}{2} + \underbrace{f(a+h_8)}_{\text{新しい項}} + \underbrace{f(a+2h_8)}_{=f(a+h_4)} + \underbrace{f(a+3h_8)}_{\text{新しい項}} + \underbrace{f(a+4h_8)}_{=f(a+2h_4)} \\
&+ \underbrace{f(a+5h_8)}_{\text{新しい項}} + \underbrace{f(a+6h_8)}_{=f(a+3h_4)} + \underbrace{f(a+7h_8)}_{\text{新しい項}} + \frac{f(b)}{2}\Bigg] \\
= \frac{h_4}{2}&\left[\frac{f(a)}{2} + f(a+h_4) + f(a+2h_4) + f(a+3h_4) + \frac{f(b)}{2}\right] \\
&+ h_8[f(a+h_8) + f(a+3h_8) + f(a+5h_8) + f(a+7h_8)] \\
= \frac{S_4}{2}& + h_8[\underbrace{f(a+h_8) + f(a+3h_8) + f(a+5h_8) + f(a+7h_8)}_{\text{奇数番目の項}}]
\end{aligned}
$$

S_8 が S_4 と奇数番目の項で書けた

台形公式の漸増計算

- 分割数が n のとき $h_n = \dfrac{b-a}{n}$

$$S_n = \frac{S_{n/2}}{2} + h_n[f(a+h_n) + f(a+3h_n) + \cdots + f(a+(n-1)h_n)]$$

- 古い結果から新しい結果が効率的に求まることを**漸増的**と呼ぶ
- 必要な計算精度を ε として、分割数 n を倍々に増やしていき

$$|S_n - S_{n/2}| < \varepsilon$$

となったら収束したとみなして計算を停止

冪級数展開

- 区間 $[x_0, x_1]$ において $f(x)$ を $x = x_0$ の周りで展開

$$f(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)^2 + \cdots + a_n(x - x_0)^n + \cdots$$

- $y = f(x)$ が 2 点 $(x_0, y_0), (x_1, y_1)$ を通ると仮定すると

$$\begin{aligned} y_0 &= a_0 \\ y_1 &= y_0 + a_1 h + a_2 h^2 + \cdots + a_n h^n + \cdots \qquad (h \equiv x_1 - x_0) \end{aligned}$$

- 以下、展開を有限次で打ち切って台形公式の誤差を見積もる

- 展開を $n=1$ で打ち切ったとき

$$f_1(x) = y_0 + \frac{y_1 - y_0}{h}(x - x_0) \qquad \text{(Newton 補間)}$$

$$\begin{aligned} S_0 &= \int_{x_0}^{x_1} f_1(x)\,\mathrm{d}x \\ &= y_0 h + \frac{y_1 - y_0}{h}\left[\frac{(x - x_0)^2}{2}\right]_{x_0}^{x_1} = \frac{h}{2}(y_0 + y_1) \quad \text{(台形公式)} \end{aligned}$$

- 展開を $n=2$ で打ち切ったとき

$$\begin{aligned} f_2(x) &= y_0 + a(x - x_0) + b(x - x_0)^2 \\ S &= \int_{x_0}^{x_1} f_2(x)\,\mathrm{d}x \\ &= y_0 h + a\left[\frac{(x - x_0)^2}{2}\right]_{x_0}^{x_1} + b\left[\frac{(x - x_0)^3}{3}\right]_{x_0}^{x_1} \\ &= y_0 h + \frac{1}{2}ah^2 + \frac{1}{3}bh^3 \end{aligned}$$

台形公式の誤差

- S と S_0 の差から区間 $[x_0, x_1]$ 台形公式の誤差を見積もると

$$\begin{aligned} S - S_0 &= y_0 h + \frac{1}{2}ah^2 + \frac{1}{3}bh^3 - \frac{h}{2}(y_0 + y_1) \\ &= \frac{1}{6}bh^3 \qquad (\because y_1 = y_0 + ah + bh^2) \end{aligned}$$

$$\therefore \int_{x_0}^{x_1} f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{h}{2}(y_0 + y_1) + \mathcal{O}(h^3)$$

ここで Landau の記号 $\mathcal{O}(h^n)$ は h^n の定数倍以下の微小量

- n 区間の台形公式を合成すると、誤差が $n \propto \dfrac{1}{h}$ 倍蓄積するので

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = h\left(\frac{y_0}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} y_i + \frac{y_n}{2}\right) + \mathcal{O}(h^2)$$

合成台形公式の誤差は $\mathcal{O}(h^2)$

Richardson 補外

- 変数 h の関数 $S(h)$ に対する漸近的な近似列

$$S(h), S(h/2), S(h/4), \cdots$$

  から極限値 $S(h/\infty) = S(0)$ を高精度に推定
- Richardson 補外の手順

1. $S(h)$ を n 次多項式で表現

$$S(h) \simeq a_0 + a_1 h + a_2 h^2 + \cdots + a_n h^n$$

2. h の初期値を h_0、変化率を $0 < r < 1$ として

$$h_j = h_0 r^j \qquad (j = 0, \cdots, n)$$

   に対する $S_j = S(h_j)$ を計算
3. $n+1$ 個の標本点 (h_j, S_j) $(j = 0, \cdots, n)$ から係数 a_j を決定
4. $h = 0$ として極限値 $S(0) = a_0$ を得る

Richardson 補外の例

- 合成台形公式の誤差は $h \ll 1$ のとき $\mathcal{O}(h^2)$ なので

$$S(h) \simeq S + Ch^2 \tag{1}$$

- 刻み幅を半分 $(r = 1/2)$ にすると

$$S(h/2) \simeq S + C\left(\frac{h}{2}\right)^2 = S + \frac{1}{4}Ch^2 \tag{2}$$

- $(2) \times 4 - (1)$ から

$$4S(h/2) - S(h) \simeq 3S, \qquad \therefore S \simeq \frac{4S(h/2) - S(h)}{3}$$

$\mathcal{O}(h^2)$ の誤差を相殺 $\quad\rightarrow\quad$ 誤差は高々 $\mathcal{O}(h^3)$

Richardson 補外の計算例 (円周率)

- richardson.c

```c
#include <stdio.h>
double func(double x){
  return 4.0 / (1.0 + x * x);
}
int main(){
  double a=0.0, b=1.0, s_old;
  for(int n=2; n<=1024; n*=2){
    double h = (b - a) / n;
    double sum = func(a)+func(b);
    for(int i=1; i!=n; ++i){
      double x = a + i * h;
      sum += 2 * func(x);
    }
    double s = 0.5 * sum * h;
```

```c
    printf("%-4d %f", n, s);
    if(num>2)
      printf(" %f", (4*s-s_old)/3);
    printf("\n");
    s_old = s;
  }
}
```

```
$ gcc richardson.c
$ ./a.out
2    3.100000
4    3.131176 3.141569
8    3.138988 3.141593
16   3.140942 3.141593
...
256  3.141590 3.141593
512  3.141592 3.141593
1024 3.141592 3.141593
```

3 列目は素早く π に収束 $\rightarrow$

Simpson の公式・再訪

- 台形公式の Richardson 補外

$$S \simeq \frac{4S(h/2) - S(h)}{3}$$

- 台形公式

$$\begin{aligned} S(h/2) &= h \left(\frac{y_0}{2} + y_1 + y_2 + y_3 + \cdots + y_{n-2} + y_{n-1} + \frac{y_n}{2} \right) \\ S(h) &= 2h \left(\frac{y_0}{2} + + y_2 + + \cdots + y_{n-2} + \phantom{y_{n-1}} + \frac{y_n}{2} \right) \end{aligned}$$

を上式に代入すると

$$S \simeq \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + 2y_2 + \cdots + 2y_{n-2} + 4y_{n-1} + y_n)$$

Simpson の公式は台形公式の Richardson 補外の一例に過ぎない

Romberg積分の考え方

- 合成台形公式は一般に h^2 より高次の誤差も含む

$$S(h) = S + C_1 h^2 + C_2 h^4 + C_3 h^6 + \cdots$$

- 実用上は $h^{2\ell}$ の項で打ち切る (レベル ℓ)

$$S(h) \simeq S + C_1 h^2 + C_2 h^4 + C_3 h^6 + \cdots + C_\ell h^{2\ell}$$

- 以下、C_ℓ を順に消去して低次の S_ℓ から高次の S_ℓ を導く

レベル 1 の補外

- 合成台形公式を h^4 $(\ell = 2)$ の項まででで打ち切ると

$$S(h) \simeq S + C_1 h^2 + C_2 h^4$$
$$S(h/2) \simeq S + \frac{1}{4} C_1 h^2 + \frac{1}{16} C_2 h^4$$

- C_1 を消去して

$$S \simeq \frac{4S(h/2) - S(h)}{3} + \frac{1}{4} C_2 h^4 \equiv S_1(h) + \frac{1}{4} C_2 h^4$$

- レベル 1 の補外 ($\ell = 1$ の項まででで打ち切った場合と同じ)

$$S_1(h) \equiv \frac{4S_0(h/2) - S_0(h)}{3} \qquad [S_0(h) \equiv S(h)]$$

レベル 2 の補外

- $S_1(h)$ の刻み幅を半分にする

$$S_1(h/2) = \frac{4S_0(h/4) - S_0(h/2)}{3}, \qquad S \simeq S_1(h/2) + \frac{1}{64}C_2 h^4$$

- S の 2 つの表式

$$\begin{cases} S \simeq S_1(h) + \dfrac{1}{4}C_2 h^4 \\ S \simeq S_1(h/2) + \dfrac{1}{64}C_2 h^4 \end{cases}$$

から C_2 を消去すると

$$S \simeq S_2(h) \equiv \frac{16S_1(h/2) - S_1(h)}{15} \qquad (\text{レベル 2 の補外})$$

データの流れ

$$
S_1(h) = \frac{4S_0(h/2) - S_0(h)}{3}, \qquad S_1(h/2) = \frac{4S_0(h/4) - S_0(h/2)}{3}
$$

$$
S_2(h) = \frac{16S_1(h/2) - S_1(h)}{15}
$$

$$
\begin{array}{ccccc}
\boxed{S_0(h)} & \to & \boxed{S_1(h)} & \to & \boxed{S_2(h)} \\
 & \nearrow & & \nearrow & \\
\boxed{S_0(h/2)} & \to & \boxed{S_1(h/2)} & & \\
 & \nearrow & & & \\
\boxed{S_0(h/4)} & & & &
\end{array}
$$

一般の Romberg 積分

- レベル 1, 2 の補外を一般化すると

$$S_\ell(h) = \frac{4^\ell S_{\ell-1}(h/2) - S_{\ell-1}(h)}{4^\ell - 1}$$

- 刻み幅を次々と半分にしていったとき $h = h_0/2^k$ と表すと

$$S_\ell(h_0/2^k) = \frac{4^\ell S_{\ell-1}(h_0/2^{k+1}) - S_{\ell-1}(h_0/2^k)}{4^\ell - 1}$$

- 簡単のため $R_{\ell k} \equiv S_\ell(h_0/2^k)$ と書くと

$$R_{\ell k} = \frac{4^\ell R_{\ell-1,k+1} - R_{\ell-1,k}}{4^\ell - 1}, \qquad R_{0k} = h\left(\frac{y_0}{2} + \sum_{i=1}^{2^k-1} y_i + \frac{y_{2^k}}{2}\right)$$